



مکانیک کوانتومی

مفاهیم و کاربردها

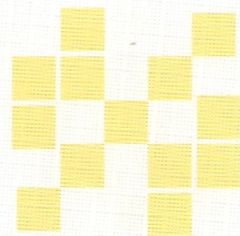
نورالدین زتیلی

ویرایش دوم

۲۰۱۰

جلد دوم

مترجمان: مسهر باقری، نیما یوسفی



مکانیک کوانتومی

مفاهیم و کاربردها

(جلد دوم)

مترجمان
مُسَهَر باقری گرجی
نیما یوسفی

توضیح کامپیوتری
علی اصل هاشمی

ویراستار
علی مقدم

مقدمه

این کتاب را می‌توان نتیجه خلاء‌هایی دانست که در طی چندین دهه از تدریس مکانیک کوانتومی، دانشجویان و حتی اساتید با آن مواجه بوده‌اند.

این کتاب به‌شکلی اصولی و ساختاری مکانیک کوانتومی را به دانشجو می‌آموزد و اشکال‌های احتمالی‌ای که در این مسیر برای آن‌ها پدید می‌آید را نیز به‌گونه‌ای زیرکانه شرح می‌دهد. CD پیوست کتاب نیز پدیده‌ای جدید و منحصر به فرد است. این CD که ورژن سوم «اینترکوانتا» است دانشجو را پایه‌ای درس نظری به‌صورت تجربی آموزش می‌دهد که این خود به فهم مطلب کمک نموده و به آن عمق می‌بخشد.

موضوع بسته‌ی موج درحقیقت پایه‌ی آموزش موضوع مکانیک موجی است و جا دارد که مفاهیم درگیر با آن به‌خوبی تبیین شوند و CD الصاقی به‌خوبی از عهده این قسمت و ادامه‌ی شکل‌گیری مکانیک کوانتومی با بسته موج برمی‌آید. در این CD هم‌چنین مسائل بسیار مهم و مهندسی‌ای که از رده‌ی مسائل مهندسی کوانتومی هستند نیز آمده است که دانشجو می‌تواند با حل آن‌ها به فهم کامل این نظریه نزدیک شده و با دید بسیار بالایی به نانوفیزیک و نانوتکنولوژی وارد شود و ...

نشر آراکس

فهرست مطالب جلد اول

۷	پیشگفتار ویرایش اول
۹	پیشگفتار ویرایش دوم
۱۱	فصل اول منشاء پیدایش فیزیک کوانتومی
۱۱	۱-۱ یادآوری تاریخی
۱۵	۲-۱ جنبه‌ی ذره‌ای تابش
۱۵	۱-۲-۱ تابش جسم سیاه
۲۳	۲-۲-۱ اثر فتوالکتریک
۲۷	۳-۲-۱ اثر کامپتون
۳۰	۴-۲-۱ تولید زوج
۳۳	۳-۱ جنبه‌ی موجی ذره‌ها
۳۳	۱-۳-۱ فرضیه‌ی دوبروی: موج‌های مادی
۳۳	۲-۳-۱ تأیید تجربی فرضیه‌ی دوبروی
۳۶	۳-۳-۱ موج‌های مادی اجسام ماکروسکوپی
۳۷	۴-۱ ذره‌ها در مقابل موج‌ها
۳۷	۱-۴-۱ دیدگاه کلاسیک ذره‌ها و موج‌ها
۳۹	۲-۴-۱ دیدگاه کوانتومی ذره‌ها و موج‌ها

۴۲ دوگانگی موج - ذره: اصل مکمل بودن	۳-۴-۱
۴۳ اصل برهم‌نهی خطی	۴-۴-۱
۴۴ طبیع غیرقطعی دنیای میکروفیزیکی	۵-۱
۴۵ اصل عدم قطعیت هایزنبرگ	۱-۵-۱
۴۷ تفسیر احتمالاتی	۲-۵-۱
۴۸ گذارهای اتمی و طیف‌نمایی	۶-۱
۴۸ مدل سیاره‌ای رادرفورد برای اتم	۱-۶-۱
۴۹ مدل بوهر برای اتم هیدروژن	۲-۶-۱
۵۶ قاعده‌های کوانتس	۷-۱
۵۸ بسته‌ای موج	۸-۱
۵۹ بسته‌های موج جایگزیده	۱-۸-۱
۶۳ بسته‌های موج و رابطه‌های عدم قطعیت	۲-۸-۱
۶۵ حرکت بسته‌های موج	۳-۸-۱
۷۹ ملاحظات پایانی	۹-۱
۸۱ مسأله‌های پایانی	۱۰-۱
۱۰۲ تمرین‌ها	۱۱-۱
۱۱۱	فصل دوم ابزارهای مکانیک کوانتومی	
۱۱۱ مقدمه	۱۲-۱
۱۱۲ فضای هیلبرت و تابع‌های موج	۱۳-۱
۱۱۲ فضای برداری خطی	۱-۱۳-۱
۱۱۳ فضای هیلبرت	۲-۱۳-۱
۱۱۴ بُعد و پایه‌ی یک فضای برداری	۳-۱۳-۱
۱۱۸ تابع‌های انتگرال‌پذیر مجددوری: تابع‌های موج	۴-۱۳-۱
۱۱۹ نمادگذاری دیراک	۱۴-۱
۱۲۵ عملگرها	۱۵-۱
۱۲۵ تعریف‌های عمومی	۱-۱۵-۱
۱۲۷ الحاقی هرمیتی	۲-۱۵-۱
۱۳۰ عملگرهای تصویر	۳-۱۵-۱
۱۳۰ جبر جابه‌جاگر	۴-۱۵-۱
۱۳۳ رابطه‌ی عدم قطعیت بین دو عملگر	۵-۱۵-۱

۱۳۵	تابع‌های عملگرها	۶-۱۵-۱
۱۳۶	عملگرهای وارون و یکانی	۷-۱۵-۱
۱۳۸	ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای یک عملگر	۸-۱۵-۱
۱۴۱	تبدیل‌های یکانی بی‌نهایت کوچک و متناهی	۹-۱۵-۱
۱۴۵	نمایش در پایه‌های گسسته	۱۶-۱
۱۴۵	نمایش ماتریسی کت‌ها، براه‌ها و عملگرها	۱-۱۶-۱
۱۵۹	تغییر پایه‌ها و تبدیلات یکانی	۲-۱۶-۱
۱۶۳	نمایش ماتریسی مسأله‌ی ویژه‌مقدار	۳-۱۶-۱
۱۶۸	نمایش در پایه‌های پیوسته	۱۷-۱
۱۶۸	بحث عمومی	۱-۱۷-۱
۱۷۰	نمایش مکان	۲-۱۷-۱
۱۷۱	نمایش تکانه	۳-۱۷-۱
۱۷۲	ارتباط بین نمایش‌های مکان و تکانه	۴-۱۷-۱
۱۷۷	عملگر پارینه	۵-۱۷-۱
۱۷۹	مکانیک ماتریسی و مکانیک موجی	۱۸-۱
۱۸۰	مکانیک ماتریسی	۱-۱۸-۱
۱۸۱	مکانیک موجی	۲-۱۸-۱
۱۸۲	ملاحظات پایانی	۱۹-۱
۱۸۳	مسأله‌های حل‌شده	۲۰-۱
۲۱۲	تمرین‌ها	۲۱-۱
۲۲۵	فصل سوم اصول موضوعه‌ی مکانیک کوانتومی	
۲۲۵	مقدمه	۱-۳
۲۲۸	اصول موضوعه‌ی پایه‌ی مکانیک کوانتومی	۲-۳
۲۲۸	حالت یک سیستم	۳-۳
۲۲۸	چگالی احتمال	۱-۳-۳
۲۲۹	اصل برهنه‌ی	۲-۳-۳
۲۳۲	مشاهده‌پذیرها و عملگرها	۴-۳
۲۳۴	اندازه‌گیری در مکانیک کوانتومی	۵-۳
۲۳۴	چگونه اندازه‌گیری سیستم‌ها را مختل می‌کند	۱-۵-۳
۲۳۶	مقدارهای چشمداشتی	۲-۵-۳

۲۳۸	مجموعه‌های کامل عملگرهای جابه‌جاشونده	۳-۵-۳
۲۴۱	اندازه‌گیری و رابطه‌های عدم قطعیت	۴-۵-۳
۲۴۲	تحول زمانی حالت سیستم	۶-۳
۲۴۲	عملگر تحول زمانی	۱-۶-۳
۲۴۳	حالت‌های مانا: پتانسیل‌های مستقل از زمان	۲-۶-۳
۲۴۵	معادله‌ی شرودینگر و بسته‌های موج	۳-۶-۳
۲۴۶	پایستگی احتمال	۴-۶-۳
۲۴۸	تحول زمانی مقدارهای چشمداشتی	۵-۶-۳
۲۴۹	تقارن‌ها و قانون‌های پایستگی	۷-۳
۲۴۹	تبدیل‌های یکانی بی‌نهایت کوچک	۱-۷-۳
۲۵۱	تبدیل‌های یکانی منتهای	۲-۷-۳
۲۵۲	تقارن‌ها و قانون‌های پایستگی	۳-۷-۳
۲۵۴	ارتباط بین مکانیک کوانتومی و مکانیک کلاسیک	۸-۳
۲۵۴	براکت‌های پواسون و جابه‌جاگرها	۱-۸-۳
۲۵۶	قضیه‌ی اهرنفتست	۲-۸-۳
۲۵۸	مکانیک کوانتومی و مکانیک کلاسیک	۳-۸-۳
۲۶۰	مسأله‌های حل شده	۹-۳
۲۸۳	تمرین‌ها	۱۰-۳
۲۹۱	فصل چهارم مسأله‌های یک بعدی	
۲۹۱	مقدمه	۱-۴
۲۹۲	ویژگی‌های حرکت یک بعدی	۲-۴
۲۹۲	طیف گسسته (حالت‌های مقید)	۱-۲-۴
۲۹۳	طیف پیوسته (حالت‌های نامقید)	۲-۲-۴
۲۹۴	طیف آمیخته	۳-۲-۴
۲۹۴	پتانسیل‌های متقارن و پاریته	۴-۲-۴
۲۹۵	ذره‌ی آزاد: حالت‌های پیوسته	۳-۴
۲۹۷	پله‌ی پتانسیل	۴-۴
۳۰۲	سد و چاه پتانسیل	۵-۴
۳۰۳	حالت $V_0 < E$	۱-۵-۴
۳۰۶	حالت $E > V_0$: تونل زنی	۲-۵-۴

۳۱۰	اثر تونل زنی	۳-۵-۴
۳۱۱	پتانسیل و چاه مربعی نامتناهی	۶-۴
۳۱۱	چاه مربعی نامتقارن	۱-۶-۴
۳۱۶	چاه پتانسیل متقارن	۲-۶-۴
۳۱۶	پتانسیل چاه مربعی متناهی	۷-۴
۳۱۷	جواب‌های پراکندگی ($V_0 < E$)	۱-۷-۴
۳۱۷	جواب‌های حالت مقید ($0 < E < V_0$)	۲-۷-۴
۳۲۱	نوسان گر هماهنگ	۸-۴
۳۲۵	ویژه‌مقدارهای انرژی	۱-۸-۴
۳۲۷	ویژه‌حالت‌های انرژی	۲-۸-۴
۳۲۸	ویژه‌حالت‌های انرژی در فضای مکان	۳-۸-۴
۳۳۲	نمایش ماتریسی عملگرهای گوناگون	۴-۸-۴
۳۳۴	مقدارهای چشمداشتی عملگرهای مختلف	۵-۸-۴
۳۳۵	حل عددی معادله‌ی شرودینگر	۹-۴
۳۳۵	روش عددی	۱-۹-۴
۳۳۷	الگوریتم	۲-۹-۴
۳۴۰	مسئله‌های حل شده	۱۰-۴
۳۷۰	تمرین‌ها	۱۱-۴
۳۷۹	فصل پنجم تکانه‌ی زاویه‌ای	
۳۷۹	مقدمه	۱-۵
۳۷۹	تکانه‌ی زاویه‌ای مداری	۲-۵
۳۸۲	صورت‌بندی عمومی تکانه‌ی زاویه‌ای	۳-۵
۳۸۸	نمایش ماتریسی تکانه‌ی زاویه‌ای	۴-۵
۳۹۲	نمایش هندسی تکانه‌ی زاویه‌ای	۵-۵
۳۹۴	تکانه‌ی زاویه‌ای اسپینی	۶-۵
۳۹۴	شواهد تجربی اسپین	۱-۶-۵
۳۹۸	نظریه‌ی عمومی اسپین	۲-۶-۵
۳۹۸	اسپین ۱/۲ و ماتریس‌های پائولی	۳-۶-۵
۴۰۳	ویژه‌تابع‌های تکانه‌ی زاویه‌ای مداری	۷-۵
۴۰۴	ویژه‌تابع‌ها و ویژه‌مقدارهای \hat{L}_z	۱-۷-۵

۴۰۵	ویژه‌تابع‌های L^2	۲-۷-۵
۴۱۰	ویژگی‌های هماهنگ کروی	۳-۷-۵
۴۱۴	مسئله‌های حل‌شده	۸-۵
۴۳۳	تمرین‌ها	۹-۵
۴۲۵	فصل ششم مسئله‌های سه‌بعدی	
	مقدمه ۴۴۳	۱-۶
۴۴۳	مسئله‌های سه‌بعدی در مختصات دکارتی	۲-۶
۴۴۴	بحث عمومی: جداسازی متغیرها	۱-۲-۶
۴۴۵	ذره‌ی آزاد	۲-۲-۶
۴۴۷	جعبه‌ی پتانسیل	۳-۲-۶
۴۴۹	نوسان‌گر هماهنگ	۴-۲-۶
۴۵۲	مسئله‌های سه‌بعدی در مختصات کروی	۳-۶
۴۵۲	پتانسیل مرکزی: بحث عمومی	۱-۳-۶
۴۵۶	ذره‌ی آزاد در مختصات کروی	۲-۳-۶
۴۵۹	پتانسیل چاه مربعی کروی	۳-۳-۶
۴۶۱	نوسان‌گر هماهنگ همسانگرد	۴-۳-۶
۴۶۷	اتم هیدروژن	۵-۳-۶
۴۸۳	اثر میدان‌های مغناطیسی روی پتانسیل مرکزی	۶-۳-۶
۴۸۷	ملاحظات پایانی	۴-۶
۴۸۹	مسئله‌های حل‌شده	۵-۶
۵۱۱	تمرین‌ها	۶-۶
۵۱۸	پیوست	

فهرست مطالب جلد دوم

۵۶۹	فصل هفتم چرخش‌ها و جمع تکانه‌های زاویه‌ای	
۵۶۹	چرخش‌ها در فیزیک کلاسیک	۱-۷
۵۷۱	چرخش‌ها در مکانیک کوانتومی	۲-۷
۵۷۲	چرخش‌های بی‌نهایت کوچک	۱-۲-۷
۵۷۳	چرخش‌های متناهی	۲-۲-۷
۵۷۵	ویژگی‌های عملگر چرخش	۳-۲-۷

۵۷۶	چرخش‌های اویلر	۴-۲-۷
۵۷۷	نمایش عملگر چرخش	۵-۲-۷
۵۸۰	ماتریس‌های چرخش و هماهنگ‌های کروی	۶-۲-۷
۵۸۳	جمع تکانه‌های زاویه‌ای	۳-۷
۵۸۴	جمع دو تکانه‌ی زاویه‌ای: صورت‌بندی عمومی	۱-۳-۷
۵۹۰	محاسبه‌ی ضریب‌های کلیش - گوردن	۲-۳-۷
۵۹۸	جفت‌شدگی تکانه‌های زاویه‌ای مداری و اسپینی	۳-۳-۷
۶۰۲	جمع بیش از دو تکانه‌ی زاویه‌ای	۴-۳-۷
۶۰۴	ماتریس‌های چرخش برای جفت‌شدگی دو تکانه‌ی زاویه‌ای	۵-۳-۷
۶۰۷	ایزواسپین	۶-۳-۷
۶۱۱	عملگرهای نرده‌ای، برداری و تانسوری	۴-۷
۶۱۱	عملگرهای نرده‌ای	۱-۴-۷
۶۱۱	عملگرهای برداری	۲-۴-۷
۶۱۴	عملگرهای تانسوری: تانسورهای تحویل‌پذیر و تانسورهای تحویل‌ناپذیر	۳-۴-۷
۶۱۶	قضیه‌ی ویگنر - اکارت برای عملگرهای تانسوری کروی	۴-۴-۷
۶۲۰	مسئله‌های حل‌شده	۵-۷
۶۴۰	تمرین‌ها	۶-۷
۶۴۵	فصل هشتم ذره‌های یکسان	
۶۴۵	سیستم‌های چندذره‌ای	۱-۸
۶۴۵	معادله‌ی شرودینگر	۱-۱-۸
۶۴۷	تقارن تعویض	۲-۱-۸
۶۴۹	سیستم‌های متشکل از ذره‌های غیربرهمکنشی تمایزپذیر	۳-۱-۸
۶۵۲	سیستم‌های متشکل از ذره‌های یکسان	۲-۸
۶۵۲	ذره‌های یکسان در مکانیک کلاسیک و مکانیک کوانتومی	۱-۲-۸
۶۵۴	واگنی تبادلی	۲-۲-۸
۶۵۵	اصل موضوعه‌ی مقارن‌سازی	۳-۲-۸
۶۵۶	ساختن تابع‌های مقارن و پادمقارن	۴-۲-۸
۶۵۷	سیستم‌های متشکل از ذره‌های غیربرهمکنشی یکسان	۵-۲-۸
۶۶۰	اصل طرد پائولی	۳-۸
۶۶۲	اصل طرد و جدول تناوبی	۴-۸

۶۷۰	۵-۸	مسأله‌های حل شده
۶۸۱	۶-۸	تمرین‌ها
۶۸۵		فصل نهم روش‌های تقریب برای حالت‌های مانا
۶۸۵	۱-۹	مقدمه
۶۸۶	۲-۹	نظریه‌ی اختلال مستقل از زمان
۶۸۷	۱-۲-۹	نظریه اختلال غیرواگن
۶۹۴	۲-۲-۹	نظریه اختلال واگن
۶۹۷	۳-۲-۹	ساختار ریز و اثر نابهنجار زمین
۷۰۸	۳-۹	روش وردشی
۷۱۸	۴-۹	روش ونتزل - کرامرز - بریلوتن
۷۱۸	۱-۴-۹	صورت‌بندی عمومی
۷۲۲	۲-۴-۹	حالت‌های مقید چاه‌های پتانسیل بدون دیواره‌های صلب
۷۲۹	۳-۴-۹	حالت‌های مقید چاه‌های پتانسیل با یک دیواره‌ی صلب
۷۳۰	۴-۴-۹	حالت‌های مقید چاه‌های پتانسیل با دو دیواره‌ی صلب
۷۳۳	۵-۴-۹	تونل‌زنی از یک سد پتانسیل
۷۳۷	۵-۹	ملاحظات پایانی
۷۳۷	۶-۹	مسأله‌های حل شده
۷۷۶	۷-۹	تمرین‌ها
۷۸۵		فصل دهم نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان
۷۸۵	۱-۱۰	مقدمه
۷۸۵	۲-۱۰	تصویرهای مکانیک کوانتومی
۷۸۶	۱-۲-۱۰	تصویر شرودینگر
۷۸۶	۲-۲-۱۰	تصویر هایزنبرگ
۷۸۸	۳-۲-۱۰	تصویر برهمکنش
۷۸۹	۳-۱۰	نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان
۷۹۲	۱-۳-۱۰	احتمال گذار
۷۹۳	۱-۳-۱۰	احتمال گذار برای یک اختلال ثابت
۷۹۵	۱-۳-۱۰	احتمال گذار برای یک اختلال هماهنگ
۷۹۹	۴-۱۰	تقریب‌های بی‌دررو و ناگهانی
۷۹۹	۱-۴-۱۰	تقریب بی‌دررو

۸۰۰	تقریب ناگهانی	۲-۴-۱۰
۸۰۳	برهمکنش اتم‌ها با تابش	۵-۱۰
۸۰۴	بحث کلاسیکی تابش فرودی	۱-۵-۱۰
۸۰۷	کوانتس میدان الکترومغناطیسی	۲-۵-۱۰
۸۱۰	آهنگ‌های گذار برای جذب و گسیل تابش	۳-۵-۱۰
۸۱۱	آهنگ‌های گذار در چارچوب تقریب دوقطبی	۴-۵-۱۰
۸۱۲	قاعده‌های گزینش دوقطبی الکتریکی	۵-۵-۱۰
۸۱۳	گسیلش خودبه‌خودی	۶-۵-۱۰
۸۱۷	مسأله‌های حل شده	۶-۱۰
۸۳۷	تمرین‌ها	۷-۱۰
۸۴۱	فصل یازدهم نظریه‌ی پراکندگی	
۸۴۱	پراکندگی و سطح مقطع	۱-۱۱
۸۴۳	ارتباط بین زاویه‌ها در چارچوب Lab و CM	۱-۱-۱۱
۸۴۵	ارتباط بین سطح مقطع‌های Lab و CM	۲-۱-۱۱
۸۴۷	دامنه‌ی پراکندگی ذره‌های بدون اسپین	۲-۱۱
۸۴۹	دامنه‌ی پراکندگی و سطح مقطع دیفرانسیلی	۱-۲-۱۱
۸۵۰	دامنه‌ی پراکندگی	۲-۲-۱۱
۸۵۴	تقریب بورن	۳-۱۱
۸۵۴	تقریب نخست بورن	۱-۳-۱۱
۸۵۶	اعتبار تقریب نخست بورن	۲-۳-۱۱
۸۵۸	تحلیل پاره موجی	۴-۱۱
۸۵۸	تحلیل پاره موجی برای پراکندگی کشسان	۱-۴-۱۱
۸۶۲	تحلیل پاره موجی برای پراکندگی ناکشسان	۲-۴-۱۱
۸۶۴	پراکندگی ذره‌های یکسان	۵-۱۱
۸۶۷	مسأله‌های حل شده	۶-۱۱
۸۸۱	تمرین‌ها	۷-۱۱
۸۸۳	پیوست الف	
۸۸۹	پیوست ب	
۸۹۳	پیوست ج	
	نمایه	

فصل هفتم

چرخش‌ها و جمع تکانه‌های زاویه‌ای

در این فصل با چرخش‌ها، ویژگی‌های جمع تکانه‌های زاویه‌ای و ویژگی‌های عملگرهای تانسوری سروکار داریم.

۱-۷ چرخش‌ها در فیزیک کلاسیک

چرخش با زاویه‌ی چرخش و محوری که چرخش حول آن صورت می‌پذیرد، تعریف می‌شود. با دانستن ماتریس چرخش R ، می‌توانیم تعیین کنیم که چگونه بردارها تحت چرخش‌ها تبدیل می‌شوند. در یک فضای سه‌بعدی، بردار \mathbf{A} پس از چرخش به بردار \mathbf{A}' تبدیل می‌شود: $\mathbf{A}' = R\mathbf{A}$. به عنوان مثال، یک چرخش تحت زاویه‌ی ϕ حول محور z ، مؤلفه‌های A_x و A_y و بردار \mathbf{A} را به A'_x ، A'_y و A'_z تبدیل می‌کند:

$$\begin{pmatrix} A'_x \\ A'_y \\ A'_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \\ A_z \end{pmatrix} \quad (1-7)$$

یا

$$\mathbf{A}' = R_z(\phi)\mathbf{A} \quad (2-7)$$

که در آن

$$R_z(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (۳-۷)$$

به صورت مشابه، ماتریس‌های چرخش حول محورهای x و y از ماتریس‌های زیر به دست می‌آیند:

$$R_x(\phi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \phi & \sin \phi \\ 0 & -\sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix}, \quad R_y(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & 0 & \sin \phi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \phi & 0 & \cos \phi \end{pmatrix} \quad (۴-۷)$$

از فیزیک کلاسیک می‌دانیم که چرخش‌های حول یک محور با هم جابه‌جا می‌شوند ولی چرخش‌های

حول محورهای متفاوت با هم جابه‌جا نمی‌شوند. از (۴-۷) می‌توانیم ثابت کنیم که $R_x(\phi)R_y(\phi) \neq R_y(\phi)R_x(\phi)$. در واقع، با استفاده از (۴-۷) می‌توانیم داشته باشیم:

$$R_x(\phi)R_y(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & 0 & \sin \phi \\ -\sin^2 \phi & \cos \phi & \cos \phi \sin \phi \\ -\cos \phi \sin \phi & -\sin \phi & \cos^2 \phi \end{pmatrix} \quad (۵-۷)$$

$$R_y(\phi)R_x(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin^2 \phi & \cos \phi \sin \phi \\ 0 & \cos \phi & \sin \phi \\ -\sin \phi & -\sin \phi \cos \phi & \cos^2 \phi \end{pmatrix} \quad (۶-۷)$$

از این رو $R_x(\phi)R_y(\phi) - R_y(\phi)R_x(\phi)$ از ماتریس زیر به دست می‌آید:

$$\begin{pmatrix} 0 & \sin^2 \phi & \sin \phi - \cos \phi \sin \phi \\ -\sin^2 \phi & 0 & \cos \phi \sin \phi - \sin \phi \\ \sin \phi - \cos \phi \sin \phi & \cos \phi \sin \phi - \sin \phi & 0 \end{pmatrix} \quad (۷-۷)$$

در مورد چرخش‌های بی‌نهایت کوچک با زاویه‌ی δ حول محورهای x ، y و z و با استفاده از $\cos \delta \simeq 1 - \delta^2/2$ و $\sin \delta \simeq \delta$ می‌توانیم (۷-۷) را به رابطه‌ی زیر کاهش دهیم:

$$R_x(\delta)R_y(\delta) - R_y(\delta)R_x(\delta) = \begin{pmatrix} 0 & \delta^2 & 0 \\ -\delta^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (۸-۷)$$

و زمانی که با $R_z(\delta^2)$ از معادله‌ی (۳-۷) ترکیب شود:

$$R_z(\delta) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\delta^2}{2} & \delta & 0 \\ -\delta & 1 - \frac{\delta^2}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \implies R_z(\delta^2) = \begin{pmatrix} 1 & \delta^2 & 0 \\ -\delta^2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (۹-۷)$$

به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$R_x(\delta)R_y(\delta) - R_y(\delta)R_x(\delta) = R_z(\delta^2) - 1 = \begin{pmatrix} 1 & \delta^2 & 0 \\ -\delta^2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (10-7)$$

بعداً نشان خواهیم داد که می‌توان از این رابطه برای به دست آوردن رابطه‌های جابه‌جایی بین مؤلفه‌های تکانه‌ی زاویه‌ای (۲۶-۷) استفاده کرد.

ماتریس‌های چرخش R متعامدند یعنی

$$RR^T = R^T R = 1 \quad (11-7)$$

که در آن R^T ترانپوز ماتریس R است. علاوه بر این ماتریس‌های متعامد اندازه‌ی بردارها را حفظ می‌کنند:

$$|\mathbf{A}'| = |\mathbf{A}| \quad (12-7)$$

چون $\mathbf{A}' = \hat{R}\mathbf{A}$ است، $\mathbf{A}'^2 = \mathbf{A}^2$ یا $A_x'^2 + A_y'^2 + A_z'^2 = A_x^2 + A_y^2 + A_z^2$ را نتیجه می‌دهد.

نشان دادن این که ماتریس‌های چرخش‌های متعامد یک گروه (غیرآبلی) را تشکیل می‌دهند و در

رابطه‌ی زیر صدق می‌کنند، کار ساده‌ای است:

$$\det(R) = 1 \quad (13-7)$$

این گروه، گروه متعامد سه‌بعدی خاص ($SO(3)$) نامیده می‌شود زیرا گروه چرخش، حالت خاصی از یک گروه عمومی‌تر (گروه تبدیل‌های متعامد سه‌بعدی ($O(3)$)) است که هم از چرخش‌ها و هم از بازتاب‌ها تشکیل شده است و به‌ازای هر کدام که

$$\det(R) = \pm 1 \quad (14-7)$$

باشد، گروه $SO(3)$ بردار \mathbf{A} را به بردار دیگر \mathbf{A}' تبدیل می‌کند و اندازه‌ی بردار در این تبدیل حفظ می‌شود.

۲-۷ چرخش‌ها در مکانیک کوانتومی

در این بخش به مطالعه‌ی رابطه‌ی بین تکانه‌ی زاویه‌ای و عملگر چرخش می‌پردازیم و سپس ویژگی‌ها و همچنین نمایش عملگر چرخش را مطالعه می‌کنیم. این ارتباط مشابه با ارتباط بین عملگر تکانه‌ی خطی و انتقال‌ها است. خواهیم دید که عملگر تکانه‌ی زاویه‌ای به‌عنوان مولد چرخش‌ها عمل می‌کند.

یک چرخش با یک زاویه و بردار یکه‌ی \mathbf{n} که چرخش حول آن انجام می‌شود، مشخص می‌گردد. با دانستن عملگر چرخش \hat{R} ، می‌توانیم تعیین کنیم که چگونه بردارهای حالت و عملگرها تحت چرخش تبدیل می‌یابند. همانطور که در فصل ۲ نشان داده شد، حالت $|\psi\rangle$ و عملگر \hat{A} مطابق با رابطه‌های زیر تبدیل می‌شوند:

$$|\psi'\rangle = \hat{R}|\psi\rangle, \quad \hat{A}' = \hat{R}\hat{A}\hat{R}^\dagger \quad (15-7)$$

آنگاه مسأله به یافتن \hat{R} منتهی می‌شود. حال می‌توانیم چرخش‌های بی‌نهایت کوچک و چرخش‌های متناهی را در نظر بگیریم.

۱-۲-۷ چرخش‌های بی‌نهایت کوچک

چرخش مختصات یک ذره‌ی بدون اسپین تحت زاویه‌ی بی‌نهایت کوچک $\delta\phi$ حول محور z را در نظر بگیرید. اگر این چرخش را با عملگر $\hat{R}_z(\delta\phi)$ نمایش دهیم آنگاه داریم:

$$\hat{R}_z(\delta\phi)\psi(r, \theta, \phi) = \psi(r, \theta, \phi - \delta\phi) \quad (۱۶-۷)$$

با بسط تیلور تابع موج تا مرتبه‌ی اول بر حسب $\delta\phi$ به دست می‌آوریم:

$$\psi(r, \theta, \phi - \delta\phi) \simeq \psi(r, \theta, \phi) - \delta\phi \frac{\delta\psi}{\delta\phi} = \left(1 - \delta\phi \frac{\delta}{\delta\phi}\right) \psi(r, \theta, \phi) \quad (۱۷-۷)$$

با مقایسه‌ی (۱۶-۷) و (۱۷-۷) می‌بینیم که $\hat{R}_z(\delta\phi)$ از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\hat{R}_z(\delta\phi) = 1 - \delta\phi \frac{\delta}{\delta\phi} \quad (۱۸-۷)$$

چون مؤلفه‌ی z تکانه‌ی زاویه‌ای مداری برابر است با

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\delta}{\delta\phi} \quad (۱۹-۷)$$

می‌توانیم (۱۸-۷) را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$\hat{R}_z(\delta\phi) = 1 - \frac{i}{\hbar} \delta\phi \hat{L}_z \quad (۲۰-۷)$$

می‌توانیم این رابطه را به چرخش زاویه‌ی $\delta\phi$ حول محور دلخواهی که جهت آن با بردار یکه‌ی \mathbf{n} مشخص می‌شود، تعمیم دهیم:

$$\hat{R}(\delta\phi) = 1 - \frac{i}{\hbar} \delta\phi \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{L}} \quad (۲۱-۷)$$

این عملگر متناظر با یک چرخش بی‌نهایت کوچک زاویه‌ی $\delta\phi$ حول \mathbf{n} برای یک سیستم بدون اسپین است. بنابراین تکانه‌ی زاویه‌ای مداری مولد چرخش‌های فضایی بی‌نهایت کوچک است.

چرخش‌ها و رابطه‌های جابه‌جایی

می‌توانیم نشان دهیم که رابطه‌ی (۱۰-۷) به رابطه‌های جابه‌جایی تکانه‌ی زاویه‌ای $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z$ می‌انجامد. می‌توان عملگرهای متناظر با چرخش‌های بی‌نهایت کوچک زاویه‌ی δ حول محورهای x و y را از (۲۰-۷) نتیجه گرفت:

$$\hat{R}_x(\delta) = 1 - \frac{i\delta}{\hbar} \hat{L}_x - \frac{\delta^2}{2\hbar^2} \hat{L}_x^2, \quad \hat{R}_y(\delta) = 1 - \frac{i\delta}{\hbar} \hat{L}_y - \frac{\delta^2}{2\hbar^2} \hat{L}_y^2 \quad (۲۲-۷)$$

که در آن بسط‌ها را تا توان دوم برحسب δ گسترش داده‌ایم. از یک سو، می‌توان رابطه‌ی مفید زیر را از (۲۲-۷) به دست آورد:

$$\begin{aligned} \hat{R}_x(\delta)\hat{R}_y(\delta) - \hat{R}_y(\delta)\hat{R}_x(\delta) &= \left(1 - \frac{i\delta}{\hbar}\hat{L}_x - \frac{\delta^2}{2\hbar^2}\hat{L}_x^2\right) \left(1 - \frac{i\delta}{\hbar}\hat{L}_y - \frac{\delta^2}{2\hbar^2}\hat{L}_y^2\right) \\ &\quad - \left(1 - \frac{i\delta}{\hbar}\hat{L}_y - \frac{\delta^2}{2\hbar^2}\hat{L}_y^2\right) \left(1 - \frac{i\delta}{\hbar}\hat{L}_x - \frac{\delta^2}{2\hbar^2}\hat{L}_x^2\right) \\ &= -\frac{\delta^2}{\hbar^2}(\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x) \\ &= -\frac{\delta^2}{\hbar^2}[\hat{L}_x, \hat{L}_y] \end{aligned} \quad (23-7)$$

که در آن تنها جمله‌های تا مرتبه‌ی دوم برحسب δ را نگه داشته‌ایم. جمله‌های برحسب δ به صورت خودکار یکدیگر را حذف می‌کنند.

از سوی دیگر، مطابق با (۱۰-۷) داریم:

$$R_x(\delta)R_y(\delta) - R_y(\delta)R_x(\delta) = R_z(\delta^2) - 1 \quad (24-7)$$

چون $\hat{R}_z(\delta^2) = 1 - (i\delta^2/\hbar)\hat{L}_z$ است، این رابطه به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$R_x(\delta)R_y(\delta) - R_y(\delta)R_x(\delta) = R_z(\delta^2) - 1 = -\frac{i\delta^2}{\hbar}\hat{L}_z \quad (25-7)$$

سرانجام با مساوی قرار دادن (۲۳-۷) و (۲۵-۷) به نتیجه‌ی زیر می‌رسیم:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z \quad (26-7)$$

محاسباتی مشابه برای $R_y(\delta)R_z(\delta) - R_z(\delta)R_y(\delta)$ و $R_z(\delta)R_x(\delta) - R_x(\delta)R_z(\delta)$ به دو رابطه‌ی جابه‌جایی دیگر $[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x$ و $[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y$ می‌انجامند.

۲-۲-۷ چرخش‌های متناهی

عملگر $\hat{R}_z(\phi)$ متناظر با چرخش (مختصات یک ذره‌ی بدون اسپین) تحت زاویه‌ی متناهی ϕ حول محور z را می‌توان به صورتی که در ادامه می‌آید، برحسب عملگر چرخش بی‌نهایت کوچک (۲۰-۷) ساخت. زاویه‌ی ϕ را به N زاویه‌ی بی‌نهایت کوچک $\delta\phi$ تقسیم می‌کنیم: $\phi = N\delta\phi$. بنابراین می‌توان چرخش تحت زاویه‌ی متناهی ϕ را به صورت مجموعه‌ای از N چرخش متوالی بی‌نهایت کوچک در نظر گرفت که یکی پس از دیگری تحت زاویه‌ی $\delta\phi$ حول محور z انجام شده‌اند:

$$\hat{R}_z(\phi) = \hat{R}_z(N\delta\phi) = (R_z(\delta\phi))^N = \left(1 - i\frac{\delta\phi}{\hbar}\hat{L}_z\right)^N \quad (27-7)$$

چون $\delta\phi = \phi/N$ است و اگر $\delta\phi$ بی‌نهایت کوچک باشد آنگاه داریم:

$$\hat{R}_z(\phi) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{k=1}^N \left(1 - \frac{i}{\hbar} \frac{\phi}{N} \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{L}} \right) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \frac{\phi}{N} \hat{L}_z \right)^N \quad (28-7)$$

یا

$$\hat{R}_z(\phi) = e^{-i\phi \hat{L}_z / \hbar} \quad (29-7)$$

می‌توانیم این نتیجه را برای به‌دست آوردن عملگر چرخش $\hat{R}_n(\phi)$ متناظر با چرخش تحت زاویه‌ی متناهی ϕ حول محور \mathbf{n} تعمیم دهیم:

$$\hat{R}_n(\phi) = e^{-i\phi \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{L}} / \hbar} \quad (30-7)$$

که در آن $\hat{\mathbf{L}}$ تکانه‌ی زاویه‌ای مداری است. این عملگر، چرخش مختصات یک ذره‌ی بدون اسپین تحت زاویه‌ی ϕ حول محور \mathbf{n} را نمایش می‌دهد.

بحثی که به (30-7) انجامید، برای یک سیستم بدون اسپین انجام شد. مطالعه‌ی عمومی‌تر برای یک سیستم با اسپین به رابطه‌ی مشابه با (30-7) می‌انجامد:

$$\hat{R}_n(\phi) = e^{-\frac{i}{\hbar} \phi \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}} \quad (31-7)$$

که در آن عملگر $\hat{\mathbf{J}}$ عملگر تکانه‌ی زاویه‌ای کل است. این عملگر به عنوان عملگر چرخش شناخته می‌شود. به عنوان مثال، عملگر چرخش $\mathbf{R}_x(\phi)$ یک چرخش تحت زاویه‌ی ϕ حول محور x از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\hat{R}_x(\phi) = e^{-i\phi \hat{J}_x / \hbar} \quad (32-7)$$

ویژگی‌های $\hat{R}_n(\phi)$ با ویژگی‌های عملگرهای \hat{J}_x ، \hat{J}_y و \hat{J}_z تعیین می‌شود.

ملاحظات

همایلتونی یک ذره در یک پتانسیل مرکزی ($\hat{H} = \hat{P}^2 / (2m) + \hat{V}(r)$) تحت چرخش‌های فضایی ناورداست زیرا همانطور که در فصل ۶ نشان داده شد، با تکانه‌ی زاویه‌ای مداری جابه‌جا می‌شود:

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}] = 0 \quad \implies \quad \left[\hat{H}, e^{-i\phi \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{L}} / \hbar} \right] = 0 \quad (33-7)$$

به دلیل این تقارن همسانگردی فضا یا ناوردایی چرخشی، تکانه‌ی زاویه‌ای مداری پایسته است^۱. بنابراین در مورد ذره‌ی در حال حرکت در پتانسیل‌های مرکزی، تکانه‌ی زاویه‌ای مداری یک ثابت حرکت است.

(۱) در فیزیک کلاسیک هنگامی که یک سیستم تحت چرخش ناورداست، تکانه‌ی زاویه‌ای کل آن نیز پایسته است.

۳-۲-۷ ویژگی‌های عملگر چرخش

عملگرهای چرخش نمایشی از یک گروه چرخش را بنا می‌کنند و در ویژگی‌های زیر صدق می‌کنند:

- ضرب هر دو عملگر چرخش برابر با یک عملگر چرخش دیگر است:

$$\hat{R}_{n_1} \hat{R}_{n_2} = \hat{R}_{n_3} \quad (۳۴-۷)$$

- قانون شرکت‌پذیری برای عملگرهای چرخش برقرار است:

$$\left(\hat{R}_{n_1} \hat{R}_{n_2} \right) \hat{R}_{n_3} = \hat{R}_{n_1} \left(\hat{R}_{n_2} \hat{R}_{n_3} \right) \quad (۳۵-۷)$$

- عملگر همانی (متناظر با حالت بدون چرخش) در رابطه‌ی زیر صدق می‌کند:

$$\hat{I} \hat{R}_n = \hat{R}_n \hat{I} = \hat{R}_n \quad (۳۶-۷)$$

از (۳۱-۷) می‌بینیم که به‌ازای هر عملگر چرخش \hat{R}_n ، عملگر وارون \hat{R}_n^{-1} وجود دارد به طوری که

$$\hat{R}_n \hat{R}_n^{-1} = \hat{R}_n^{-1} \hat{R}_n = \hat{I} \quad (۳۷-۷)$$

عملگر \hat{R}_{-n} که برابر با \hat{R}_n^{-1} است، متناظر با یک چرخش در جهت مخالف \hat{R}_n است. بر خلاف گروه انتقال^۲ در سه بعد، گروه چرخش جابه‌جاپذیر نیست (غیرآبلی است). ضرب دو عملگر چرخش به ترتیبی که این چرخش‌ها انجام می‌شوند، بستگی دارد:

$$\hat{R}_{n_1}(\phi) \hat{R}_{n_2}(\theta) \neq \hat{R}_{n_2}(\theta) \hat{R}_{n_1}(\phi) \quad (۳۸-۷)$$

این به دلیل این واقعیت است که جابه‌جاگر $[\mathbf{n}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}, \mathbf{n}_2 \cdot \hat{\mathbf{J}}]$ صفر نیست. در این صورت، به طور کلی، گروه چرخش غیرآبلی است.

ولی اگر این دو چرخش حول یک محور انجام شوند آنگاه عملگرهای متناظر جابه‌جا می‌شوند:

$$\hat{R}_n(\phi) \hat{R}_n(\theta) = \hat{R}_n(\theta) \hat{R}_n(\phi) = \hat{R}_n(\phi + \theta) \quad (۳۹-۷)$$

توجه کنید که چون عملگر تکانه‌ی زاویه‌ای \hat{J} هرمیتی است، معادله‌ی (۳۱-۷) نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\hat{R}_n^\dagger(\phi) = \hat{R}_n^{-1}(\phi) = \hat{R}_n(-\phi) = e^{i\phi \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}} / \hbar} \quad (۴۰-۷)$$

از این رو عملگر چرخش (۳۱-۷) یکانی است:

$$\hat{R}_n^\dagger(\phi) = \hat{R}_n^{-1}(\phi) \implies \hat{R}_n^\dagger(\phi) \hat{R}_n(\phi) = \hat{I} \quad (۴۱-۷)$$

(۲) تکانه‌های خطی \vec{P}_i و \vec{P}_j که مولدهای انتقال‌اند، حتی اگر $i \neq j$ باشد جابه‌جا می‌شوند از این رو به گروه انتقال، آبلی گفته می‌شود.

بنابراین عملگر $\hat{R}_n(\phi)$ ضرب نرده‌ای کت‌ها (به‌خصوص هنجار بردارها) را حفظ می‌کند. به‌عنوان مثال، با استفاده از

$$|\psi'\rangle = \hat{R}_n(\phi)|\psi\rangle, \quad |\chi'\rangle = \hat{R}_n(\phi)|\chi\rangle \quad (۴۲-۷)$$

همراه با (۴۱-۷)، می‌توانیم نشان دهیم که $\langle\phi|\psi\rangle = \langle\phi|\psi'\rangle$ است زیرا

$$\langle\chi'|\psi'\rangle = \langle\chi|\hat{R}_n^\dagger(\phi)\hat{R}_n(\phi)|\psi\rangle = \langle\chi|\psi\rangle \quad (۴۳-۷)$$

۴-۲-۷ چرخش‌های اویلر

از مکانیک کلاسیک معلوم است که می‌توان چرخش دلخواه یک جسم صلب را برحسب سه چرخش متوالی که چرخش‌های اویلر نامیده می‌شوند، بیان کرد. در مکانیک کوانتومی به جای بیان عملگر چرخش $\hat{R}_n(\phi) = e^{-i\phi\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}}/\hbar}$ برحسب چرخش در زاویه ϕ حول محور دلخواه \mathbf{n} ، مناسب‌تر است که آن را مانند مکانیک کلاسیک برحسب سه زاویه‌ی اویلر (α, β, γ) پارامتر بندی کنیم که در آن $0 \leq \alpha \leq 2\pi$ ، $0 \leq \beta \leq \pi$ و $0 \leq \gamma \leq 2\pi$ است. چرخش‌های اویلر مجموعه‌ی محورهای xyz که در فضا ثابت است را با سه چرخش متوالی پادساعتگرد به مجموعه‌ی جدید $z'y'z'$ که دارای همان مبدا O است، تبدیل می‌کند:

- ابتدا دستگاه $Oxyz$ که در فضا ثابت است را به اندازه‌ی زاویه‌ی α حول محور z بچرخانید. این چرخش دستگاه $Oxyz$ را به $Ouvz$ تبدیل می‌کند: $Oxyz \rightarrow Ouvz$.
- دوم، دستگاه $Ouvz$ را به اندازه‌ی زاویه‌ی β حول محور v بچرخانید. این چرخش، دستگاه $Ouvz$ را به $Owvz'$ تبدیل می‌کند: $Ouvz \rightarrow Owvz'$.
- سوم، دستگاه wvz' را به اندازه‌ی زاویه‌ی γ حول محور z' بچرخانید. این چرخش، دستگاه $Owvz'$ را به $Ox'y'z'$ تبدیل می‌کند: $Owvz' \rightarrow Ox'y'z'$.

عملگرهای نمایش‌دهنده‌ی این سه چرخش به ترتیب از $\hat{R}_z(\alpha)$ ، $\hat{R}_v(\beta)$ و $\hat{R}_{z'}(\gamma)$ به‌دست می‌آیند. با استفاده از (۳۱-۷) می‌توانیم این سه چرخش را با

$$\begin{aligned} \hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) &= \hat{R}_{z'}(\gamma)\hat{R}_v(\beta)\hat{R}_z(\alpha) \\ &= \exp\left[-i\gamma\hat{J}_{z'}/\hbar\right]\exp\left[-i\beta\hat{J}_v/\hbar\right]\exp\left[-i\alpha\hat{J}_z/\hbar\right] \end{aligned} \quad (۴۴-۷)$$

نمایش دهیم. شکل این عملگر نسبتاً نامناسب است زیرا شامل چرخش‌هایی حول محورهای متعلق به دستگاه‌های متفاوت (یعنی z' ، v و z) است. این شکل هنگامی مناسب‌تر می‌شود که (۴۴-۷) را به‌صورت حاصل ضرب سه چرخش حول محورهای x ، y و z که در فضا ثابت‌اند، بیان کنیم. بنابراین اجازه دهید تا $\hat{R}_v(\beta)$ و $\hat{R}_{z'}(\gamma)$ را برحسب چرخش حول محورهای x ، y و z بیان کنیم. چون چرخش اویلر نخست

که در بالا توصیف شد $(\hat{R}_z(\alpha))$ به وسیله‌ی رابطه‌ی (۱۵-۷) عملگر \hat{J}_y را به \hat{J}_v تبدیل می‌کند یعنی

$$\hat{J}_v = \hat{R}_z(\alpha) \hat{J}_y \hat{R}_z(-\alpha) \quad \text{داریم:}$$

$$\hat{R}_v(\beta) = \hat{R}_z(\alpha) \hat{R}_y(\beta) \hat{R}_z(-\alpha) = e^{-i\alpha \hat{J}_z / \hbar} e^{-i\beta \hat{J}_y / \hbar} e^{i\alpha \hat{J}_z / \hbar} \quad (۴۵-۷)$$

در اینجا \hat{J}_z' به وسیله‌ی اعمال متوالی چرخش‌های اوایلر دوم و سوم به دست آمده است

$$(\hat{J}_z' = \hat{R}_v(\beta) \hat{R}_z(\alpha) \hat{J}_z \hat{R}_z(-\alpha) \hat{R}_v(-\beta))$$

$$\hat{R}_{z'}(\gamma) = \hat{R}_v(\beta) \hat{R}_z(\alpha) \hat{R}_z(\gamma) \hat{R}_z(-\alpha) \hat{R}_v(-\beta) \quad (۴۶-۷)$$

چون $\hat{R}_v(-\beta) = \hat{R}_z(\alpha) \hat{R}_y(-\beta) \hat{R}_z(-\alpha)$ است، با جاگذاری (۴۵-۷) در (۴۶-۷) به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} \hat{R}_{z'}(\gamma) &= [\hat{R}_z(\alpha) \hat{R}_y(\beta) \hat{R}_z(-\alpha)] \hat{R}_z(\alpha) \hat{R}_z(\gamma) \hat{R}_z(-\alpha) [\hat{R}_z(\alpha) \hat{R}_y(-\beta) \hat{R}_z(-\alpha)] \\ &= \hat{R}_z(\alpha) \hat{R}_y(\beta) \hat{R}_z(\gamma) \hat{R}_y(-\beta) \hat{R}_z(-\alpha) \\ &= e^{-i\alpha \hat{J}_z / \hbar} e^{-i\beta \hat{J}_y / \hbar} e^{-i\gamma \hat{J}_z / \hbar} e^{i\beta \hat{J}_y / \hbar} e^{i\alpha \hat{J}_z / \hbar} \end{aligned} \quad (۴۷-۷)$$

که در آن از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که $\hat{R}_z(-\alpha) \hat{R}_z(\alpha) = e^{-i\alpha \hat{J}_z / \hbar} e^{i\alpha \hat{J}_z / \hbar} = ۱$ سرانجام با وارد کردن (۴۵-۷) و (۴۷-۷) در (۴۴-۷) و ساده کردن آن (یعنی با استفاده از $\hat{R}_z(-\alpha) \hat{R}_z(\alpha) = ۱$ و $\hat{R}_y(-\beta) \hat{R}_y(\beta) = ۱$) به حاصل ضرب سه چرخش حول محورهای y و z که در فضا ثابت‌اند، می‌رسیم:

$$\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) = \hat{R}_z(\alpha) \hat{R}_y(\beta) \hat{R}_z(\gamma) = e^{-i\alpha \hat{J}_z / \hbar} e^{-i\beta \hat{J}_y / \hbar} e^{-i\gamma \hat{J}_z / \hbar} \quad (۴۸-۷)$$

تبدیل وارون (۴۸-۷) با در نظر گرفتن سه چرخش به اندازه‌ی زاویه‌های $(-\gamma, -\beta, -\alpha)$ به ترتیب وارون به دست می‌آید:

$$\hat{R}^{-1}(\alpha, \beta, \gamma) = \hat{R}_z(-\gamma) \hat{R}_y(-\beta) \hat{R}_z(-\alpha) = \hat{R}^\dagger(\alpha, \beta, \gamma) = e^{i\gamma \hat{J}_z / \hbar} e^{i\beta \hat{J}_y / \hbar} e^{i\alpha \hat{J}_z / \hbar} \quad (۴۹-۷)$$

۵-۲-۷ نمایش عملگر چرخش

عملگر چرخش $\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma)$ از (۴۸-۷) به دست می‌آید، بیان می‌کند که ویژگی‌های آن به وسیله‌ی ویژگی‌های جبری عملگرهای تکانه‌ی زاویه‌ای $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$ تعیین می‌شوند. چون $\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma)$ با $\hat{\mathbf{J}}^2$ جابه‌جا می‌شود، باید به دنبال نمایشی از $\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma)$ در پایه‌ای که با ویژه‌بردارهای $\hat{\mathbf{J}}^2$ و \hat{J}_z پوشش داده می‌شود (یعنی حالت‌های $(|j, m\rangle)$ بگردیم.

از (۷-۴۸) می‌بینیم که \hat{J}^2 با عملگر چرخش جابه‌جا می‌شود ($[\hat{J}^2, \hat{R}(\alpha, \beta, \gamma)] = 0$) بنابراین تکانه‌ی زاویه‌ای کل تحت چرخش‌ها پایسته است:

$$\hat{J}^2 \hat{R}(\alpha, \beta, \gamma)|j, m\rangle = \hat{R}(\alpha, \beta, \gamma)\hat{J}^2|j, m\rangle = j(j+1)\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma)|j, m\rangle \quad (۷-۵۰)$$

به هر حال، مؤلفه‌ی z تکانه‌ی زاویه‌ای تحت چرخش‌ها تغییر می‌کند مگر آن که محور چرخش در امتداد محور z باشد. یعنی هنگامی که $\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma)$ روی حالت $|j, m\rangle$ اثر می‌کند، به حالت جدیدی می‌رسیم که دارای همان j است ولی مقدار m متفاوتی دارد:

$$\begin{aligned} \hat{R}(\alpha, \beta, \gamma)|j, m\rangle &= \sum_{m'=-j}^j |j, m'\rangle \langle j, m' | \hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) | j, m \rangle \\ &= \sum_{m'=-j}^j D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) |j, m'\rangle \end{aligned} \quad (۷-۵۱)$$

که در آن داریم

$$D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) = \langle j, m' | \hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) | j, m \rangle \quad (۷-۵۲)$$

و عنصرهای ماتریسی $\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma)$ برای حالت‌های $|j, m\rangle$ هستند. $D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma)$ دامنه‌ی $|j, m'\rangle$ زمانی که $|j, m\rangle$ می‌چرخد. بنابراین عملگر چرخش با یک ماتریس مربعی $(2j+1) \times (2j+1)$ در پایه‌ی $\{|j, m\rangle\}$ نمایش داده می‌شود. ماتریس $D^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma)$ به عنوان ماتریس D ی ویگنر و عنصرهای $D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma)$ آن به عنوان تابع‌های ویگنر شناخته می‌شوند. از این نمایش ماتریسی اغلب به عنوان نمایش تحویل‌ناپذیر $(2j+1)$ بعدی عملگر چرخش $\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma)$ یاد می‌شود. چون $|j, m\rangle$ یک ویژه‌حالت \hat{J}_z است، یک ویژه‌حالت عملگر چرخش $e^{i\alpha\hat{J}_z/\hbar}$ نیز می‌باشد زیرا

$$e^{i\alpha\hat{J}_z/\hbar}|j, m\rangle = e^{i\alpha m}|j, m\rangle \quad (۷-۵۳)$$

بنابراین می‌توانیم (۷-۵۲) را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-i(m'\alpha+m\gamma)} d_{m'm}^{(j)}(\beta) \quad (۷-۵۴)$$

که در آن

$$d_{m'm}^{(j)}(\beta) = \langle j, m' | e^{-i\beta\hat{J}_y/\hbar} | j, m \rangle \quad (۷-۵۵)$$

است. این نشان می‌دهد که تنها عملگر چرخش میانی ($e^{-i\beta\hat{J}_y/\hbar}$) حالت‌های با مقدارهای متفاوت m را در هم می‌آمیزد. بنابراین تعیین عنصرهای ماتریسی $D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma)$ به محاسبه‌ی کمیت‌های $d_{m'm}^{(j)}(\beta)$ کاهش می‌یابد.

عبارت عمومی $d_{m'm}^{(j)}(\beta)$ که فرمول ویگنر نامیده می‌شود، از عبارت صریح زیر به دست می‌آید:

$$d_{m'm}^{(j)}(\beta) = \sum_k (-1)^{k+m'-m} \frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!}}{(j-m'-k)!(j+m-k)!(k+m'-m)!k!} \times \left(\cos \frac{\beta}{2}\right)^{j+m-m'-2k} \left(\sin \frac{\beta}{2}\right)^{m'-m+2k} \quad (56-7)$$

عمل جمع روی k انجام می‌شود به طوری که هیچ‌یک از آرگومان‌های فاکتوریل‌ها در مخرج کسر منفی نیستند. باید توجه کنیم که چون تابع $D(D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma))$ ویژه‌تابع مشترک \hat{J}^2 و \hat{J}_z است، داریم:

$$\hat{J}^2 D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) = j(j+1)\hbar^2 D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) \quad (57-7)$$

$$\hat{J}_z D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) = \hbar m D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) \quad (58-7)$$

$$\hat{J}_{\pm} D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) = \hbar \sqrt{(j \pm m)(j \mp m + 1)} D_{m'm \pm 1}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) \quad (59-7)$$

ویژگی‌های تابع‌های D

حال برخی از ویژگی‌های مفید ماتریس‌های چرخش را فهرست‌وار بیان می‌کنیم. می‌توان مزدوج مختلط تابع‌های D را به صورت زیر بیان کرد:

$$\begin{aligned} [D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma)]^* &= \langle j, m' | \hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) | j, m \rangle^* = \langle j, m | \hat{R}^\dagger(\alpha, \beta, \gamma) | j, m' \rangle \\ &= \langle j, m | \hat{R}^{-1}(\alpha, \beta, \gamma) | j, m' \rangle \quad (60-7) \\ &= D_{mm'}^{(j)}(-\gamma, -\beta, -\alpha) \end{aligned}$$

می‌توانیم به آسانی نشان دهیم که

$$[D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma)]^* = (-1)^{m'-m} D_{-m'-m}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) = D_{mm'}^{(j)}(-\gamma, -\beta, -\alpha) \quad (61-7)$$

تابع‌های D در رابطه‌های یکانی زیر صدق می‌کنند:

$$\sum_m [D_{km}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma)]^* D_{k'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) = \delta_{k,k'} \quad (62-7)$$

$$\sum_m [D_{mk}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma)]^* D_{mk'}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) = \delta_{k,k'} \quad (63-7)$$

زیرا

$$\sum_m [D_{mk}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma)]^* D_{mk'}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma)$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_m \langle j, k | \hat{R}^{-1}(\alpha, \beta, \gamma) | j, m \rangle \langle j, m | \hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) | j, k' \rangle \\
 &= \langle j, k | \hat{R}^{-1}(\alpha, \beta, \gamma) \hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) | j, k' \rangle \\
 &= \langle j, k | j, k' \rangle \\
 &= \delta_{k, k'} \quad (۶۴-۷)
 \end{aligned}$$

از (۵۵-۷) می‌توانیم نشان دهیم که تابع‌های d در رابطه‌ی زیر صدق می‌کنند:

$$d_{m'm}^{(j)}(\pi) = (-1)^{j-m} \delta_{m', -m}, \quad d_{m'm}^{(j)}(0) = \delta_{m', m} \quad (۶۵-۷)$$

چون $d_{m'm}^{(j)}$ ها عنصرهای یک ماتریس حقیقی یکانی‌اند، ماتریس $d^{(j)}(\beta)$ باید متعامد باشد. بنابراین می‌توانیم بنویسیم:

$$d_{m'm}^{(j)}(\beta) = \left(d_{m'm}^{(j)}(\beta) \right)^{-1} = d_{mm'}^{(j)}(-\beta) \quad (۶۶-۷)$$

و

$$d_{m'm}^{(j)}(\beta) = (-1)^{m'-m} d_{mm'}^{(j)}(\beta) = (-1)^{m'-m} d_{-m', -m}^{(j)}(\beta) \quad (۶۷-۷)$$

ماتریس‌های یکانی $D^{(j)}$ یک نمایش تحویل‌ناپذیر $(2j+1)$ بعدی گروه $SO(3)$ را تشکیل می‌دهند.

۶-۲-۷ ماتریس‌های چرخش و هماهنگ‌های کروی

در حالتی که در آن عملگر تکانه‌ی زاویه‌ای \hat{J} مداری محض است (یعنی مقادیرهای j عدد صحیح‌اند $(j=l)$))، رابطه‌ای بین تابع‌های D و هماهنگ‌های کروی $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ وجود دارد. هنگامی که عملگر $\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma)$ بر بردار $|\mathbf{r}\rangle$ که در جهت (θ, φ) است، اعمال شود آنگاه یک بردار $|\mathbf{r}'\rangle$ در جهت جدید (θ', φ') تولید می‌کند:

$$|\mathbf{r}'\rangle = \hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) |\mathbf{r}\rangle \quad (۶۸-۷)$$

بسط دادن آن برحسب $|l, m'\rangle$ و ضرب کردن آن در $\langle l, m|$ به رابطه‌ی

$$\langle l, m | \mathbf{r}' \rangle = \sum_{m'} \langle l, m | \hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) | l, m' \rangle \langle l, m' | \mathbf{r} \rangle \quad (۶۹-۷)$$

یا به

$$Y_{lm}^*(\theta', \varphi') = \sum_{m'} D_{mm'}^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma) Y_{lm'}^*(\theta, \varphi) \quad (۷۰-۷)$$

می‌انجامد زیرا $\langle l, m | \mathbf{r}' \rangle = Y_{lm}^*(\theta', \varphi')$ و $\langle l, m' | \mathbf{r} \rangle = Y_{lm'}^*(\theta, \varphi)$ است.

در حالتی که در آن بردار \mathbf{r} در امتداد محور z است، داریم: $\theta = 0$ از این رو $m' = 0$ است. از فصل ۵، $Y_{l0}^*(\theta, \varphi)$ از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$Y_{l0}^*(0, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \delta_{m', 0} \quad (۷۱-۷)$$

بنابراین می‌توانیم $(\gamma - \gamma^\circ)$ را به رابطه‌ی

$$Y_{lm}^*(\beta, \alpha) = D_{m^\circ}^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma) Y_{l^\circ}^*(\alpha, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} D_{m^\circ}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) \quad (72-7)$$

یا

$$D_{m^\circ}^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_{lm}^*(\beta, \alpha) \quad (73-7)$$

کاهش دهیم. این به این معنی است که چرخش بردار \mathbf{r} به اندازه‌ی زاویه‌های اویلر (α, β, γ) هنگامی که در امتداد محور z است، بردار \mathbf{r}' را تولید می‌کند که زاویه‌های سمتی و قطبی آن به ترتیب با β و α داده می‌شود. به صورت مشابه، می‌توانیم نشان دهیم که

$$D_{m^\circ}^{(l)}(\gamma, \beta, \alpha) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_{lm}(\beta, \alpha) \quad (74-7)$$

و

$$D_{0^\circ}^{(l)}(\alpha, \theta, \alpha) = P_l(\cos \theta) \quad (75-7)$$

که در آن $P_l(\cos \theta)$ چندجمله‌ای لژاندر است.

اکنون به خوبی آماده‌ایم تا قضیه‌ی مربوط به جمع هماهنگ‌های کروی را به دست آوریم. فرض کنید (θ, φ) مختصات قطبی بردار \mathbf{r} نسبت به دستگاه x, y, z که در فضا ثابت است و (θ', φ') مختصات قطبی آن نسبت به دستگاه چرخیده‌ی x', y', z' باشند. با در نظر گرفتن مزدوج مختلط $(\gamma - \gamma^\circ)$ رابطه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$Y_{lm}(\theta', \varphi') = \sum_{m'} \left[D_{mm'}^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma) \right]^* Y_{lm'}(\theta, \varphi) \quad (76-7)$$

برای حالت $m = 0$ باید گفت که با توجه به (از فصل ۵)

$$Y_{l0}(\theta', \varphi') = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta') \quad (77-7)$$

و هم چنین از (74-7)

$$\left[D_{0m'}^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma) \right]^* = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_{lm'}^*(\beta, \gamma) \quad (78-7)$$

می‌توانیم (76-7) را به

$$\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta') = \sum_{m'} \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_{lm'}^*(\beta, \gamma) Y_{lm'}(\theta, \varphi) \quad (79-7)$$

یا به

$$P_l(\cos \theta') = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m'} Y_{lm'}^*(\beta, \gamma) Y_{lm'}(\theta, \varphi) \quad (80-7)$$

کاهش دهیم.

انتگرال‌های شامل تابع‌های D

فرض کنید ω زاویه‌های اویلر را نشان می‌دهد. از این رو

$$\int d\omega = \int_0^\pi \sin \beta d\beta \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{2\pi} d\gamma \quad (۸۱-۷)$$

با استفاده از رابطه‌ی

$$\begin{aligned} \int D_{m'm}^{(j)}(\omega) d\omega &= \int_0^\pi d_{m'm}^{(j)}(\beta) \sin \beta d\beta \int_0^{2\pi} e^{-im'\alpha} d\alpha \int_0^{2\pi} e^{-im\gamma} d\gamma \\ &= 8\pi^2 \delta_{j,0} \delta_{m',0} \delta_{m,0} \end{aligned} \quad (۸۲-۷)$$

می‌توانیم بنویسیم:

$$\begin{aligned} \int D_{m'k}^{(j)*}(\omega) D_{m'k'}^{(j')}(\omega) d\omega &= (-1)^{m-k} \int D_{-m-k}^{(j)}(\omega) D_{m'k'}^{(j')}(\omega) d\omega \\ &= (-1)^{m-k} \int_0^\pi d_{-m-k}^{(j)}(\beta) d_{m'k'}^{(j')}(\beta) \sin \beta d\beta \\ &\quad \times \int_0^{2\pi} e^{-i(m'-m)\alpha} d\alpha \int_0^{2\pi} e^{-i(k'-k)\gamma} d\gamma \\ &= \frac{8\pi^2}{2j+1} \delta_{j,j'} \delta_{m,m'} \delta_{k,k'} \end{aligned} \quad (۸۳-۷)$$

مثال ۱-۷

ماتریس‌های چرخش $d^{(1/2)}$ و $D^{(1/2)}$ متناظر با $j = \frac{1}{2}$ را بیابید.

حل

از یک سو، چون ماتریس \hat{J}_y به‌ازای $j = \frac{1}{2}$ از رابطه‌ی

$$\hat{J}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_y \quad (۸۴-۷)$$

به‌دست می‌آید (فصل ۵) و با توجه به این که مجذور ماتریس پائولی σ_y برابر با ماتریس یکه است ($\sigma_y^2 = 1$)، توان‌های زوج و فرد σ_y از ماتریس‌های زیر به‌دست می‌آیند:

$$\sigma_y^{2n} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y^{2n+1} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \sigma_y \quad (۸۵-۷)$$

از سوی دیگر، چون می‌توان عملگر چرخش

$$\hat{R}_y(\beta) = e^{-i\beta\hat{J}_y/\hbar} = e^{-i\beta\sigma_y/2} \quad (۸۶-۷)$$

را به صورت زیر نوشت:

$$e^{-i\beta\sigma_y/2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^{2n}}{(2n)!} \left(\frac{\beta}{2}\right)^{2n} \sigma_y^{2n} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^{2n+1}}{(2n+1)!} \left(\frac{\beta}{2}\right)^{2n+1} \sigma_y^{2n+1} \quad (۸۷-۷)$$

جاگذاری (۸۵-۷) در (۸۷-۷) نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\begin{aligned} e^{-i\beta\sigma_y/2} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \left(\frac{\beta}{2}\right)^{2n} - i\sigma_y \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \left(\frac{\beta}{2}\right)^{2n+1} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) + \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \end{aligned} \quad (۸۸-۷)$$

ازاین‌رو

$$d^{(1/2)}(\beta) = e^{-i\beta\hat{J}_y/\hbar} = \begin{pmatrix} d_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^{(1/2)} & d_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{(1/2)} \\ d_{-\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^{(1/2)} & d_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{(1/2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\beta/2) & -\sin(\beta/2) \\ \sin(\beta/2) & \cos(\beta/2) \end{pmatrix} \quad (۸۹-۷)$$

چون همان‌طور که در (۵۴-۷) نشان داده شد، $d_{m'm}^{(j)}(\beta) = e^{-i(m'\alpha+m\gamma)} D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma)$ است، داریم:

$$D^{(1/2)}(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{pmatrix} e^{-i(\alpha+\gamma)/2} \cos(\beta/2) & -e^{-i(\alpha-\gamma)/2} \sin(\beta/2) \\ e^{i(\alpha-\gamma)/2} \sin(\beta/2) & e^{i(\alpha+\gamma)/2} \cos(\beta/2) \end{pmatrix} \quad (۹۰-۷)$$

۳-۷ جمع تکانه‌های زاویه‌ای

در تمام حوزه‌های فیزیک جدید با جمع تکانه‌های زاویه‌ای روبرو می‌شویم. مهارت در تکنیک‌های آن برای درک پدیده‌های زیراتمی گوناگون ضروری است. به‌عنوان مثال، تکانه‌ی زاویه‌ای کل الکترون در اتم هیدروژن از دو قسمت تشکیل شده است: یک بخش مداری \hat{L} که به دلیل حرکت مداری الکترون حول پروتون است و یک بخش اسپینی \hat{S} که به دلیل حرکت اسپینی الکترون حول خودش است. بدون دانستن این که چگونه بخش‌های مداری و اسپینی تکانه‌ی زاویه‌ای کل الکترون با هم جمع می‌شوند، نمی‌توان به درستی به ویژگی‌های اتم هیدروژن پرداخت.

در ادامه قصد داریم تا صورت‌بندی جمع تکانه‌ی زاویه‌ای را ارائه کنیم و سپس برخی از مهم‌ترین کاربردهای آن را در نظر خواهیم گرفت.

۷-۳-۱ جمع دو تکانه‌ی زاویه‌ای: صورت‌بندی عمومی

در این بخش صورت‌بندی عمومی متناظر با مسأله‌ی جمع دو تکانه‌ی زاویه‌ای جابه‌جاپذیر را ارائه می‌کنیم. دو تکانه‌ی زاویه‌ای \hat{J}_1 و \hat{J}_2 را در نظر بگیرید که متعلق به زیرفضاهای متفاوت ۱ و ۲ هستند. \hat{J}_1 و \hat{J}_2 می‌توانند به دو ذره‌ی متمایز یا دو ویژگی متفاوت یک ذره اشاره کنند.^۳ حالت آخر می‌تواند به تکانه‌های زاویه‌ای مداری و اسپینی یک ذره اشاره کند. با فرض آن که جفت‌شدگی اسپین-مدار به اندازه‌ی کافی ضعیف است آنگاه درجه‌های آزادی فضایی و اسپینی الکترون مستقل از یکدیگر تحول می‌یابند.

مؤلفه‌های \hat{J}_1 و \hat{J}_2 در رابطه‌های جابه‌جایی معمول تکانه‌ی زاویه‌ای صدق می‌کنند:

$$[\hat{J}_{1x}, \hat{J}_{1y}] = i\hbar\hat{J}_{1z}, \quad [\hat{J}_{1y}, \hat{J}_{1z}] = i\hbar\hat{J}_{1x}, \quad [\hat{J}_{1z}, \hat{J}_{1x}] = i\hbar\hat{J}_{1y} \quad (۹۱-۷)$$

$$[\hat{J}_{2x}, \hat{J}_{2y}] = i\hbar\hat{J}_{2z}, \quad [\hat{J}_{2y}, \hat{J}_{2z}] = i\hbar\hat{J}_{2x}, \quad [\hat{J}_{2z}, \hat{J}_{2x}] = i\hbar\hat{J}_{2y} \quad (۹۲-۷)$$

چون \hat{J}_1 و \hat{J}_2 متعلق به فضاهای متفاوت‌اند، مؤلفه‌های آنها جابه‌جا می‌شوند:

$$[\hat{J}_{1j}, \hat{J}_{2k}] = 0 \quad (j, k = x, y, z) \quad (۹۳-۷)$$

حال با نمایش ویژه‌ت‌های مشترک \hat{J}_1^2 با \hat{J}_{1z} یا $|j_1, m_1\rangle$ و ویژه‌حالت‌های مشترک \hat{J}_2^2 و \hat{J}_{2z} با $|j_2, m_2\rangle$ داریم:

$$\hat{J}_1^2 |j_1, m_1\rangle = j_1(j_1 + 1)\hbar^2 |j_1, m_1\rangle \quad (۹۴-۷)$$

$$\hat{J}_{1z} |j_1, m_1\rangle = m_1\hbar |j_1, m_1\rangle \quad (۹۵-۷)$$

$$\hat{J}_2^2 |j_2, m_2\rangle = j_2(j_2 + 1)\hbar^2 |j_2, m_2\rangle \quad (۹۶-۷)$$

$$\hat{J}_{2z} |j_2, m_2\rangle = m_2\hbar |j_2, m_2\rangle \quad (۹۷-۷)$$

ابعاد فضاهایی که \hat{J}_1 و \hat{J}_2 به آن تعلق دارند به ترتیب از $(2j_1 + 1)$ و $(2j_2 + 1)$ به دست می‌آیند.^۴ عملگرهای \hat{J}_1^2 و \hat{J}_{1z} در پایه‌ی $\{|j_1, m_1\rangle\}$ با ماتریس‌هایی با بعد $(2j_1 + 1) \times (2j_1 + 1)$ و \hat{J}_2^2 و \hat{J}_{2z} با ماتریس‌هایی مربعی با بعد $(2j_2 + 1) \times (2j_2 + 1)$ در پایه‌ی $\{|j_2, m_2\rangle\}$ نمایش داده می‌شوند. حال دو ذره‌ی (یا دو زیرفضای) ۱ و ۲ را با هم در نظر بگیرید. چهار عملگر \hat{J}_1^2 ، \hat{J}_{1z} ، \hat{J}_2^2 و \hat{J}_{2z} مجموعه‌ی کاملی از عملگرهای جابه‌جاشونده را تشکیل می‌دهند. بنابراین می‌توان آنها را با یک حالت به صورت مشترک قطری کرد. با نمایش ویژه‌حالت‌های مشترک آنها با $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$ می‌توانیم آنها را به صورت ضرب مستقیم $|j_1, m_1\rangle$ و $|j_2, m_2\rangle$ بنویسیم:

$$|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle \quad (۹۸-۷)$$

(۳) در سراسر این بخش از برجسب‌های ۱ و ۲ برای اشاره به کمیت‌های مرتبط با دو ذره یا دو زیرفضا استفاده خواهیم کرد.
 (۴) این ناشی از این واقعیت است که تعداد بردارهای پایه‌ای که فضاهایی که \hat{J}_1 و \hat{J}_2 به آنها تعلق دارند را پوشش می‌دهند به ترتیب برابر با $(2j_1 + 1)$ و $(2j_2 + 1)$ است. این بردارها عبارتند از $|j_1, -j_1\rangle, |j_1, -j_1 + 1\rangle, \dots, |j_1, j_1 - 1\rangle, |j_1, j_1\rangle$ و $|j_2, -j_2\rangle, |j_2, -j_2 + 1\rangle, \dots, |j_2, j_2 - 1\rangle, |j_2, j_2\rangle$.

زیرا مختصات \hat{J}_1 و \hat{J}_2 مستقل از یکدیگرند. بنابراین می‌توانیم (۷-۹۴) تا (۷-۹۷) را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$\hat{J}_1^2 |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = j_1(j_1 + 1)\hbar^2 |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \quad (۷-۹۹)$$

$$\hat{J}_{1z} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = m_1\hbar |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \quad (۷-۱۰۰)$$

$$\hat{J}_2^2 |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = j_2(j_2 + 1)\hbar^2 |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \quad (۷-۱۰۱)$$

$$\hat{J}_{2z} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = m_2\hbar |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \quad (۷-۱۰۲)$$

کت‌های $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$ یک پایه‌ی کامل و متعامد بهنجار را تشکیل می‌دهند. با استفاده از

$$\sum_{m_1, m_2} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2; m_1, m_2| = \left(\sum_{m_1} |j_1, m_1\rangle \langle j_1, m_1| \right) \left(\sum_{m_2} |j_2, m_2\rangle \langle j_2, m_2| \right) \quad (۷-۱۰۳)$$

و با توجه به این که $\{|j_2, m_2\rangle\}$ و $\{|j_1, m_1\rangle\}$ کامل‌اند (یعنی $\sum_{m_1} |j_1, m_1\rangle \langle j_1, m_1| = 1$) و متعامد بهنجار هستند (یعنی $\delta_{j'_1, j_1} \delta_{m'_1, m_1} = \langle j'_1, m'_1 | j_1, m_1 \rangle$) و به صورت مشابه برای $\{|j_2, m_2\rangle\}$ می‌بینیم که پایه‌ی $\{|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\}$ کامل

$$\sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2; m_1, m_2| = 1 \quad (۷-۱۰۴)$$

و متعامد بهنجار است:

$$\begin{aligned} \langle j'_1, j'_2; m'_1, m'_2 | j_1, j_2; m_1, m_2 \rangle &= \langle j'_1, m'_1 | j_1, m_1 \rangle \langle j'_2, m'_2 | j_2, m_2 \rangle \\ &= \delta_{j'_1, j_1} \delta_{j'_2, j_2} \delta_{m'_1, m_1} \delta_{m'_2, m_2} \end{aligned} \quad (۷-۱۰۵)$$

پایه‌ی $\{|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\}$ به وضوح تمام فضایی که از زیرفضاهای ۱ و ۲ ساخته شده است را پوشش می‌دهد. از (۷-۹۸) می‌بینیم که بعد N این فضا برابر با حاصل ضرب ابعاد دو زیرفضای پوشش داده شده با $\{|j_1, m_1\rangle\}$ و $\{|j_2, m_2\rangle\}$ است:

$$N = (2j_1 + 1) \times (2j_2 + 1) \quad (۷-۱۰۶)$$

حال می‌توانیم عملگرهای پله‌ای $\hat{J}_{1\pm} = \hat{J}_{1x} \pm i\hat{J}_{1y}$ و $\hat{J}_{2\pm} = \hat{J}_{2x} \pm i\hat{J}_{2y}$ را معرفی کنیم. اثر این عملگرها روی $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$ از رابطه‌های زیر به دست می‌آید:

$$\hat{J}_{1\pm} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = \hbar \sqrt{(j_1 \mp m_1)(j_1 \pm m_1 + 1)} |j_1, j_2; m_1 \pm 1, m_2\rangle \quad (۷-۱۰۷)$$

$$\hat{J}_{2\pm} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = \hbar \sqrt{(j_2 \mp m_2)(j_2 \pm m_2 + 1)} |j_1, j_2; m_1, m_2 \pm 1\rangle \quad (۷-۱۰۸)$$

مسئله‌ی جمع دو تکانه‌ی زاویه‌ای \hat{J}_1 و \hat{J}_2

$$\hat{J} = \hat{J}_1 + \hat{J}_2 \quad (۷-۱۰۹)$$

از یافتن ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای \hat{J}_z^2 و \hat{J}_z برحسب ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای \hat{J}_x^2 ، \hat{J}_y^2 ، \hat{J}_x و \hat{J}_y تشکیل شده است. چون ماتریس‌های \hat{J}_x و \hat{J}_y عموماً ابعاد متفاوتی دارند، جمع مشخص شده با (۷-۱۰۹) جمع ماتریس‌ها نیست بلکه یک جمع نمادین است.

با جمع (۷-۹۱) و (۷-۹۲) به آسانی می‌توانیم تحقیق کنیم که مؤلفه‌های \hat{J} در رابطه‌های جابه‌جایی تکانه‌ی زاویه‌ای صدق می‌کنند:

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z, \quad [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar\hat{J}_x, \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar\hat{J}_y \quad (۷-۱۱۰)$$

توجه کنید که \hat{J}_x^2 ، \hat{J}_y^2 و \hat{J}_z^2 به صورت مشترک با هم جابه‌جا می‌شوند. می‌توان این مطلب را از رابطه‌ی زیر تحقیق کرد:

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + 2\hat{J}_x\hat{J}_y + \hat{J}_y\hat{J}_x + \hat{J}_x\hat{J}_z + \hat{J}_z\hat{J}_x \quad (۷-۱۱۱)$$

که به

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_x] = [\hat{J}^2, \hat{J}_y] = 0 \quad (۷-۱۱۲)$$

و

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_z] = [\hat{J}_x^2, \hat{J}_z] = [\hat{J}_y^2, \hat{J}_z] = 0 \quad (۷-۱۱۳)$$

می‌انجامد. ولی با وجود این واقعیت که $[\hat{J}^2, \hat{J}_z] = 0$ است، عملگرهای \hat{J}_x و \hat{J}_y جداگانه با \hat{J}^2 جابه‌جا نمی‌شوند:

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_x] \neq 0, \quad [\hat{J}^2, \hat{J}_y] \neq 0 \quad (۷-۱۱۴)$$

حال چون \hat{J}_x^2 ، \hat{J}_y^2 و \hat{J}_z^2 مجموعه‌ی کاملی از عملگرهای جابه‌جا شونده را تشکیل می‌دهند، می‌توان با یک ویژه‌تک آنها را به صورت همزمان قطری کرد. با نمایش این ویژه‌تک‌ها با $|j_1, j_2; j, m\rangle$ داریم:

$$\hat{J}_x^2 |j_1, j_2; j, m\rangle = j_1(j_1 + 1)\hbar^2 |j_1, j_2; j, m\rangle \quad (۷-۱۱۵)$$

$$\hat{J}_y^2 |j_1, j_2; j, m\rangle = j_2(j_2 + 1)\hbar^2 |j_1, j_2; j, m\rangle \quad (۷-۱۱۶)$$

$$\hat{J}_z^2 |j_1, j_2; j, m\rangle = j(j + 1)\hbar^2 |j_1, j_2; j, m\rangle \quad (۷-۱۱۷)$$

$$\hat{J}_z |j_1, j_2; j, m\rangle = m\hbar |j_1, j_2; j, m\rangle \quad (۷-۱۱۸)$$

بنازی هر j ، عدد m دارای $(2j + 1)$ مقدار مجاز است: $j, j - 1, \dots, -j + 1, -j, m$.

چون j_1 و j_2 معمولاً ثابت‌اند، در ادامه‌ی این فصل از نمادگذاری $|j, m\rangle$ که خلاصه شده‌ی $|j_1, j_2; j, m\rangle$ است، استفاده خواهیم کرد. مجموعه‌ی بردارهای $\{|j, m\rangle\}$ یک پایه‌ی کامل و متعامد بهنجار را تشکیل می‌دهند:

$$\sum_j \sum_{m=-j}^j |j, m\rangle \langle j, m| = 1 \quad (۷-۱۱۹)$$

$$\langle j', m' | j, m \rangle = \delta_{j,j'} \delta_{m',m} \quad (۱۲۰-۷)$$

فضایی که در آن تکانه‌ی زاویه‌ای کل \hat{J} عمل می‌کند با پایه‌ی $\{|j, m\rangle\}$ پوشش داده می‌شود. این فضا به عنوان فضای حاصل ضرب شناخته می‌شود. دانستن این مطلب مهم است که این فضا همان فضای است که به وسیله‌ی $\{|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\}$ پوشش داده می‌شود یعنی فضایی که شامل هر دو زیرفضای ۱ و ۲ است. بنابراین بعد فضایی که با پایه‌ی $\{|j, m\rangle\}$ پوشش داده می‌شود نیز همانطور که با (۷-۱۰۶) مشخص شد، برابر با $N = (2j_1 + 1) \times (2j_2 + 1)$ است.

اکنون مسأله یافتن تبدیلی است که پایه‌های $\{|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\}$ و $\{|j, m\rangle\}$ را به هم مرتبط می‌کند.

۷-۳-۱-۱ تبدیل بین پایه‌ها: ضریب‌های کلیش-گوردن

اکنون بیاید جمع \hat{J}_1 و \hat{J}_2 برگردیم. اساساً این مسأله از به دست آوردن ویژه‌مقدارهای \hat{J}^2 و \hat{J}_z و بیان کردن حالت‌های $|j, m\rangle$ برحسب $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$ تشکیل شده است. باید یادآوری کنیم که $|j, m\rangle$ حالتی است که در آن \hat{J}^2 و \hat{J}_z دارای مقدارهای ثابت $j(j+1)$ و m هستند ولی به طور کلی حالتی نیست که در آن مقدارهای \hat{J}_z و \hat{J}_1^2 ثابت باشند. در رابطه با $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$ باید گفت که حالتی است که در آن \hat{J}_1^2 ، \hat{J}_2^2 ، \hat{J}_z و \hat{J}_1^2 دارای مقدارهای ثابتی‌اند.

می‌توان پایه‌های $\{|j, m\rangle\}$ و $\{|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\}$ را به وسیله‌ی تبدیلی که در ادامه می‌آید، به هم مرتبط ساخت. با وارد کردن عملگر همانی به صورت جمع روی پایه‌ی کامل $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$ می‌توانیم بنویسیم:

$$\begin{aligned} |j, m\rangle &= \left(\sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2; m_1, m_2| \right) |j, m\rangle \\ &= \sum_{m_1, m_2} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \end{aligned} \quad (۱۲۱-۷)$$

که در آن از شرط بهنجارش (۷-۱۰۴) استفاده کرده‌ایم. چون پایه‌های $\{|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\}$ و $\{|j, m\rangle\}$ هر دو بهنجارند، این تبدیل باید یکانی باشد. ضریب‌های $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle$ که تنها به کمیت‌های j_1, j_2, j, m, m_1, m_2 بستگی دارند، عنصرهای ماتریسی تبدیل یکانی هستند که پایه‌های $\{|j, m\rangle\}$ و $\{|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\}$ را به هم مرتبط می‌کنند. این ضریب‌ها، ضریب‌های کلیش-گوردن^۵ نامیده می‌شوند. آنگاه مسأله‌ی جمع تکانه‌ی زاویه‌ای به یافتن ضریب‌های کلیش-گوردن $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle$ منجر می‌شود. این ضریب‌ها به صورت قراردادی، حقیقی در نظر گرفته می‌شوند از این رو

$$\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle = \langle j, m | j_1, j_2; m_1, m_2 \rangle \quad (۱۲۲-۷)$$

با استفاده از (۷-۱۰۴) و (۷-۱۲۰) می‌توانیم رابطه‌ی متعامد بهنجار بودن را برای ضریب‌های کلبش-گوردن نتیجه بگیریم:

$$\sum_{m_1, m_2} \langle j', m' | j_1, j_2; m_1, m_2 \rangle \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle = \delta_{j', j} \delta_{m', m} \quad (7-123)$$

و چون ضریب‌های کلبش-گوردن حقیقی‌اند، می‌توان این رابطه را به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$\sum_{m_1, m_2} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j', m' \rangle \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle = \delta_{j', j} \delta_{m', m} \quad (7-124)$$

که به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\sum_{m_1, m_2} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle^2 = 1 \quad (7-125)$$

به صورت مشابه،

$$\sum_j \sum_{m=-j}^j \langle j_1, j_2; m'_1, m'_2 | j, m \rangle \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle = \delta_{m'_1, m_1} \delta_{m'_2, m_2} \quad (7-126)$$

و به خصوص داریم:

$$\sum_j \sum_m \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle^2 = 1 \quad (7-127)$$

۷-۳-۱- ویژه‌مقدارهای \hat{J}^2 و \hat{J}_z

بباید به مطالعه‌ی چگونگی یافتن ویژه‌مقدارهای \hat{J}^2 و \hat{J}_z برحسب ویژه‌مقدارهای \hat{J}_1^2 ، \hat{J}_2^2 ، \hat{J}_{1z} و \hat{J}_{2z} بپردازیم. یعنی j و m را برحسب j_1 ، j_2 ، m_1 و m_2 به دست آوریم. ابتدا با توجه به این که $\hat{J}_z = \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}$ داریم: $m = m_1 + m_2$. حال برای یافتن j برحسب j_1 و j_2 به صورتی که در ادامه می‌آید، اقدام می‌کنیم. چون مقدارهای بیشینه‌ی m_1 و m_2 عبارتند از $m_{1\max} = j_1$ و $m_{2\max} = j_2$ داریم: $m_{\max} = m_{1\max} + m_{2\max} = j_1 + j_2$ و $|m| \leq j$ است آنگاه داریم $j_{\max} = j_1 + j_2$. سپس برای یافتن مقدار کمینه‌ی j (j_{\min}) باید از این واقعیت استفاده کنیم که $(2j_1 + 1) \times (2j_2 + 1)$ ویژه‌تک $|j, m\rangle$ وجود دارد. برای هر مقدار j به تعداد $(2j + 1)$ ویژه‌تک $|j, m\rangle$ وجود دارد بنابراین داریم:

$$\sum_{j=j_{\min}}^{j_{\max}} (2j + 1) = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \quad (7-128)$$

که به رابطه‌ی زیر می‌انجامد (برای اثبات، مثال ۷-۲ را ببینید):

$$j_{\min}^2 = (j_1 - j_2)^2 \implies j_{\min} = |j_1 - j_2| \quad (7-129)$$

از این رو مقدارهای مجاز j در محدوده‌ی زیر واقع شده‌اند:

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \quad (۱۳۰-۷)$$

می‌توان این عبارت را از رابطه‌ی مشهور مثلثی نیز نتیجه گرفت^۶. بنابراین مطابق با رابطه‌ی زیر، مقدارهای مجاز j برحسب پله‌های صحیح تغییر می‌کنند:

$$j = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 \quad (۱۳۱-۷)$$

بنابراین به‌ازای هر j ، مقدارهای مجاز m در محدوده‌ی $j - m \leq z \leq m$ واقع می‌شوند.

توجه کنید که ضریب $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle$ صفر می‌شود مگر آن که $m_1 + m_2 = m$ شود.

این مطلب را به صورتی که در ادامه می‌آید، می‌توان دید: چون $\hat{J}_z = \hat{J}_{z_1} + \hat{J}_{z_2}$ است، داریم:

$$\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | \hat{J}_z - \hat{J}_{z_1} - \hat{J}_{z_2} | j, m \rangle = 0 \quad (۱۳۲-۷)$$

و با توجه به این که $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | \hat{J}_{z_1} | j, m \rangle = m_1 \hbar \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle$ و

$$\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | \hat{J}_{z_2} | j, m \rangle = m_2 \hbar \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle$$

$$(m - m_1 - m_2) \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle = 0 \quad (۱۳۳-۷)$$

که نشان می‌دهد تنها هنگامی که $m - m_1 - m_2 = 0$ باشد، $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle$ صفر نیست:

$$\text{اگر } m_1 + m_2 \neq m \implies \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle = 0 \quad (۱۳۴-۷)$$

بنابراین برای این که ضریب کلبش-گوردن $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle$ صفر نشود، باید به‌صورت همزمان داشته باشیم:

$$m_1 + m_2 = m \quad \text{و} \quad |j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \quad (۱۳۵-۷)$$

این رابطه‌ها به‌عنوان قاعده‌های گزینش برای ضریب‌های کلبش-گوردن شناخته می‌شوند.

مثال ۲-۷

با شروع از $\sum_{j=j_{\min}}^{j_{\max}} (2j+1) = (2j_1+1)(2j_2+1)$ ، رابطه‌ی (۱۲۹-۷) را ثابت کنید.

حل

ابتدا بیایید تا روی طرف چپ رابطه‌ی زیر کار کنیم:

$$\sum_{j=j_{\min}}^{j_{\max}} (2j+1) = (2j_1+1)(2j_2+1) \quad (۱۳۶-۷)$$

۶ طول جمع دو بردار کلاسیکی، $\mathbf{A} + \mathbf{B}$ ، باید بین مجموع و تفاضل طول‌های دو بردار، $A + B$ و $|A - B|$ ، واقع شود یعنی $|A - B| \leq |\mathbf{A} + \mathbf{B}| \leq A + B$.

می‌توانیم طرف چپ این معادله را به صورت جمع ارشمیدسی که دارای $j_{\max} = j_1 + j_2$ است، بنویسیم:

$$\sum_{j=j_{\min}}^{j_{\max}} (2j+1) = (2j_{\min}+1) + (2j_{\min}+3) + (2j_{\min}+5) + \dots + [2(j_1+j_2)+1] \quad (137-7)$$

برای محاسبه‌ی این جمع، کافیس آن را به دو صورت معادل زیر بنویسیم:

$$S = (2j_{\min}+1) + (2j_{\min}+3) + (2j_{\min}+5) + \dots + [2(j_1+j_2)+1] \quad (138-7)$$

$$S = [2(j_1+j_2)+1] + [2(j_1+j_2)-1] + [2(j_1+j_2)-3] + \dots + (2j_{\min}+1) \quad (139-7)$$

با جمع جمله به جمله‌ی این دو سری، رابطه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$2S = 2[(j_1+j_2+1) + j_{\min}] + 2[(j_1+j_2+1) + j_{\min}] + \dots + 2[(j_1+j_2+1) + j_{\min}] \quad (140-7)$$

چون این عبارت دارای $(j_{\max} - j_{\min} + 1) = [(j_1 + j_2 + 1) - j_{\min}]$ جمله است، داریم:

$$2S = 2[(j_1 + j_2 + 1) + j_{\min}][(j_1 + j_2 + 1) - j_{\min}] \quad (141-7)$$

ازاین رو

$$S = [(j_1 + j_2 + 1) + j_{\min}][(j_1 + j_2 + 1) - j_{\min}] = (j_1 + j_2 + 1)^2 - j_{\min}^2 \quad (142-7)$$

حال با مساوی قرار دادن این عبارت با طرف راست (۱۳۶-۷) رابطه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$(j_1 + j_2 + 1)^2 - j_{\min}^2 = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \quad (143-7)$$

که به نوبه‌ی خود به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$j_{\min}^2 = (j_1 - j_2)^2 \quad (144-7)$$

۷-۳-۲ محاسبه‌ی ضریب‌های کلبش-گوردن

ابتدا باید اشاره کنیم که ضریب‌های کلبش-گوردن متناظر با دو حالت حدی که در آنها $m_1 = j_1$ ، $m_2 = j_2$ ، $m = j_1 + j_2$ ، $j = j_1 + j_2$ و $m = -j_1$ ، $m_1 = -j_1$ ، $m_2 = -j_2$ ، $j = j_1 + j_2$ ، $m = -(j_1 + j_2)$ برابر با یک هستند:

$$\langle j_1, j_2; j_1, j_2 | (j_1 + j_2), (j_1 + j_2) \rangle = 1, \quad \langle j_1, j_2; -j_1, -j_2 | (j_1 + j_2), -(j_1 + j_2) \rangle = 1 \quad (145-7)$$

می‌توان این نتیجه‌ها را از (۷-۱۲۱) نیز به‌دست آورد زیرا $\langle j_1 + j_2, (j_1 + j_2) \rangle$ و $\langle j_1 + j_2, -(j_1 + j_2) \rangle$ هر یک دارای یک عنصر به‌صورت زیر هستند:

$$\langle j_1 + j_2, (j_1 + j_2) \rangle = \langle j_1, j_2; j_1, j_2 | (j_1 + j_2), (j_1 + j_2) \rangle | j_1, j_2; j_1, j_2 \rangle \quad (۷-۱۴۶)$$

$$\langle j_1 + j_2, -(j_1 + j_2) \rangle = \langle j_1, j_2; -j_1, -j_2 | (j_1 + j_2), -(j_1 + j_2) \rangle | j_1, j_2; -j_1, -j_2 \rangle \quad (۷-۱۴۷)$$

که در آنها $\langle j_1 + j_2, (j_1 + j_2) \rangle$ ، $\langle j_1 + j_2, -(j_1 + j_2) \rangle$ ، $| j_1, j_2; j_1, j_2 \rangle$ و $| j_1, j_2; -j_1, -j_2 \rangle$ همگی بهنجارند.

محاسبه‌ی سایر ضریب‌ها مفصل‌تر است از دو حالت حدی‌ای که در بالا به آنها اشاره شد. برای این کار باید رابطه‌های بازگشتی بین عنصرهای ماتریس تبدیل یکانی بین پایه‌های $\{|j, m\rangle\}$ و $\{|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\}$ را به‌دست آوریم زیرا هنگامی که j_1 ، j_2 و j ثابت‌اند، ضریب‌های مختلف کلبش-گوردن به‌وسیله‌ی رابطه‌های بازگشتی به یکدیگر مرتبط می‌شوند. برای یافتن رابطه‌های بازگشتی باید عنصرهای ماتریسی $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | \hat{J}_\pm | j, m \rangle$ را به دو روش متفاوت محاسبه کنیم: ابتدا اثر \hat{J}_\pm روی کت سمت راست یعنی روی کت $| j, m \rangle$ را در نظر می‌گیریم:

$$\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | \hat{J}_\pm | j, m \rangle = \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \pm 1 \rangle \quad (۷-۱۴۸)$$

سپس $\hat{J}_\pm = \hat{J}_{1\pm} + \hat{J}_{2\pm}$ را برای سمت چپ^۷ یعنی روی $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 |$ اثر می‌دهیم:

$$\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | \hat{J}_\pm | j, m \rangle = \hbar \sqrt{(j_1 \pm m_1)(j_1 \mp m_1 + 1)} \langle j_1, j_2; m_1 \mp 1, m_2 | j, m \rangle + \hbar \sqrt{(j_2 \pm m_2)(j_2 \mp m_2 + 1)} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 \mp 1 | j, m \rangle \quad (۷-۱۴۹)$$

با مساوی قرار دادن (۷-۱۴۸) و (۷-۱۴۹) رابطه‌ی بازگشتی مورد نظر را برای ضریب‌های کلبش-گوردن به‌دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} & \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \pm 1 \rangle \\ &= \sqrt{(j_1 \pm m_1)(j_1 \mp m_1 + 1)} \langle j_1, j_2; m_1 \mp 1, m_2 | j, m \rangle \\ &+ \sqrt{(j_2 \pm m_2)(j_2 \mp m_2 + 1)} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 \mp 1 | j, m \rangle \quad (۷-۱۵۰) \end{aligned}$$

این رابطه‌ها همراه با رابطه‌ی راست بهنجارش (۷-۱۲۵)، تمام ضریب‌های کلبش-گوردن را به‌ازای مقدارهای معلوم j_1 ، j_2 و j تعیین می‌کنند. برای دیدن این موضوع، بیاید تا جاگذاری‌های

(۷) به یاد بیاورید که $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | \hat{J}_\pm = \hbar \sqrt{(j_1 \pm m_1)(j_1 \mp m_1 + 1)} \langle j_1, j_2; m_1 \mp 1, m_2 |$ است.

$m = j$ و $m_1 = j_1$ را در حالت علامت پایین ($۷-۱۵^\circ$) انجام دهیم. چون m_2 تنها می‌تواند برابر با $۱ - j_1 - j_2 = m_2$ باشد، به دست می‌آوریم:

$$\sqrt{2j} \langle j_1, j_2; j_1, (j - j_1 - 1) | j, j - 1 \rangle = \sqrt{(j_2 - j + j_1 + 1)(j_2 + j - j_1)} \\ \times \langle j_1, j_2; j_1, (j - j_1) | j, j \rangle \quad (۱۵۱-۷)$$

بنابراین با دانستن $\langle j_1, j_2; j_1, (j - j_1) | j, j \rangle$ ، می‌توانیم $\langle j_1, j_2; j_1, (j - j_1 - 1) | j, j - 1 \rangle$ را تعیین کنیم. علاوه بر این با جاگذاری $m_1 = j_1$ ، $m = j - 1$ و $m_2 = j - j_1$ در حالت علامت بالای ($۷-۱۵^\circ$) به نتیجه‌ی زیر می‌رسیم:

$$\sqrt{2j} \langle j_1, j_2; j_1, (j - j_1) | j, j \rangle = \sqrt{2j_1} \langle j_1, j_2; (j_1 - 1), (j - j_1) | j, j - 1 \rangle \\ + \sqrt{(j_2 + j - j_1)(j_2 - j + j_1 + 1)} \langle j_1, j_2; j_1, (j - j_1 - 1) | j, j - 1 \rangle \quad (۱۵۲-۷)$$

بنابراین با دانستن $\langle j_1, j_2; j_1, (j - j_1) | j, j \rangle$ و $\langle j_1, j_2; j_1, (j - j_1 - 1) | j, j - 1 \rangle$ می‌توانیم $\langle j_1, j_2; j_1, (j - j_1 - 1) | j, j - 1 \rangle$ را تعیین کنیم. اعمال دوباره‌ی رابطه‌ی بازگشتی ($۷-۱۵^\circ$) تمام ضریب‌های کلبش-گوردن دیگر را تعیین خواهد کرد. البته به شرط آن که تنها یکی از آنها را بدانیم: $\langle j_1, j_2; j_1, (j - j_1) | j, j \rangle$. در رابطه با مقدار مطلق این ضریب باید گفت که می‌توان آن را از شرط بهنجارش ($۷-۱۲۴$) تعیین نمود. بنابراین رابطه‌ی بازگشتی ($۷-۱۵^\circ$) همراه با شرط بهنجارش ($۷-۱۲۴$) تمام ضریب‌های کلبش-گوردن را به استثنای علامت آنها تعیین می‌کند. ولی چگونه می‌توان این علامت را تعیین کرد؟ طبق قرارداد (که به عنوان قرارداد فاز شناخته می‌شود)، $\langle j_1, j_2; j_1, (j - j_1) | j, j \rangle$ حقیقی و مثبت در نظر گرفته می‌شود. این قرارداد بیان می‌کند که

$$\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle = (-1)^{j-j_1-j_2} \langle j_2, j_1; m_2, m_1 | j, m \rangle \quad (۱۵۳-۷)$$

از این رو

$$\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle = (-1)^{j-j_1-j_2} \langle j_1, j_2; -m_1, -m_2 | j, -m \rangle \\ = \langle j_2, j_1; -m_2, -m_1 | j, -m \rangle \quad (۱۵۴-۷)$$

توجه کنید که چون تمام ضریب‌های کلبش-گوردن از ضریب $\langle j_1, j_2; j_1, (j - j_1) | j, j \rangle$ به دست می‌آیند و با توجه به این که این ضریب حقیقی است، تمام ضریب‌های کلبش-گوردن دیگر نیز باید عددهای حقیقی باشند. با پیروی از همان روشی که از $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | \hat{J}_\pm | j, m \rangle$ به ($۷-۱۵^\circ$) انجامید، می‌توانیم نشان دهیم که محاسبه‌ی $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | \hat{J}_\pm | j, m \mp 1 \rangle$ به رابطه‌ی بازگشتی زیر می‌انجامد:

$$\sqrt{(j \mp m + 1)(j \pm m)} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle$$

$$= \sqrt{(j_1 \pm m_1)(j_1 \mp m_1 + 1)} \langle j_1, j_2; m_1 \mp 1, m_2 | j, m \mp 1 \rangle + \sqrt{(j_2 \pm m_2)(j_2 \mp m_2 + 1)} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 \mp 1 | j, m \mp 1 \rangle \quad (155-7)$$

می‌توانیم از رابطه‌های بازگشتی (۷-۱۵۵) و (۷-۱۵۵) برای به‌دست آوردن مقادیر مختلف ضریب‌های کلیش-گوردن استفاده کنیم. به‌عنوان مثال، اگر $m_1 = j_1 - 1$ ، $m_2 = j_2 - 1$ ، $m = j_1 + j_2 - 1$ و $j = j_1 + j_2$ را در حالت علامت پایین (۷-۱۵۵) وارد کنیم آنگاه به‌دست می‌آوریم:

$$\langle j_1, j_2; j_1, (j_2 - 1) | (j_1 + j_2), (j_1 + j_2 - 1) \rangle = \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} \quad (156-7)$$

به‌صورت مشابه، جاگذاری $m_1 = j_1 - 1$ ، $m_2 = j_2$ ، $m = j_1 + j_2 - 1$ و $j = j_1 + j_2$ در حالت علامت پایین (۷-۱۵۵) به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\langle j_1, j_2; (j_1 - 1), j_2 | (j_1 + j_2), (j_1 + j_2 - 1) \rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} \quad (157-7)$$

همچنین می‌توانیم نشان دهیم که

$$\langle j, 1; m, 0 | j, m \rangle = \frac{m}{\sqrt{j(j+1)}}, \quad \langle j, 0; m, 0 | j, m \rangle = 1 \quad (158-7)$$

مثال ۳-۷

(الف) ضریب‌های کلیش-گوردن وابسته به جفت‌شدگی اسپین‌های الکترون و پروتون اتم هیدروژن در حالت پایه‌ی آن را بیابید.

(ب) ماتریس تبدیلی را بیابید که با ضریب‌های کلیش-گوردن تشکیل می‌شود. ثابت کنید که این ماتریس یکانی است.

حل

الکترون و پروتون در حالت پایه‌ی خود دارای تکانه‌های زاویه‌ای مداری نیستند. بنابراین تکانه‌ی زاویه‌ای کل اتم به سادگی با جمع کردن اسپین‌های پروتون و الکترون به‌دست می‌آید.

این مثال ساده‌ای برای نشان دادن صورت‌بندی عمومی ارائه شده در این بخش است. چون $j_1 = \frac{1}{2}$ و $j_2 = \frac{1}{2}$ است، j دارای دو مقدار ممکن 1 ، 0 است. هنگامی که $j = 0$ است، تنها یک حالت $|j, m\rangle = |0, 0\rangle$ وجود دارد که تک‌تایی اسپینی نامیده می‌شود. از سوی دیگر، سه مقدار ممکن 1 ، 0 ، -1 برای حالت $j = 1$ وجود دارند که متناسب با حالت سه‌تایی اسپینی $|1, 1\rangle$ ، $|1, 0\rangle$ و $|1, -1\rangle$ هستند.

از (۷-۱۲۱) به صورت زیر می‌توانیم حالت‌های $|j, m\rangle$ را بر حسب $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; m_1, m_2\rangle$ بیان کنیم:

$$|j, m\rangle = \sum_{m_1=-1/2}^{1/2} \sum_{m_2=-1/2}^{1/2} \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; m_1, m_2 \middle| j, m \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; m_1, m_2 \right\rangle \quad (7-159)$$

که زمانی که بر دو حالت $j = 1$ و $j = 0$ اعمال شود، به معادله‌های زیر می‌انجامد:

$$|0, 0\rangle = \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| 0, 0 \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| 0, 0 \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (7-160)$$

$$|1, 1\rangle = \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| 1, 1 \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (7-161)$$

$$|1, 0\rangle = \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| 1, 0 \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| 1, 0 \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (7-162)$$

$$|1, -1\rangle = \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| 1, -1 \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (7-163)$$

برای محاسبه‌ی ضرایب کلیش-گوردن مربوط به (۷-۱۶۰) تا (۷-۱۶۳) قصد داریم تا از دو رهیافت جداگانه بهره ببریم: در رهیافت نخست، از رابطه‌های بازگشتی (۷-۱۵۰) و (۷-۱۵۵) استفاده می‌شود در حالی که در رهیافت دوم، از جبر تکانه‌ی زاویه‌ای استفاده می‌شود.

رهیافت نخست: استفاده از رابطه‌های بازگشتی

ابتدا برای محاسبه‌ی دو ضریب $\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \pm \frac{1}{2}, \mp \frac{1}{2} | 0, 0 \rangle$ مربوط به (۷-۱۶۰) از یک سو باید جاگذاری‌های $j = 0$ ، $m = 0$ و $m_1 = m_2 = \frac{1}{2}$ را در حالت علامت بالای (۷-۱۵۰) انجام دهیم:

$$\left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| 0, 0 \right\rangle = - \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| 0, 0 \right\rangle \quad (7-164)$$

از سوی دیگر، جاگذاری $j = 0$ و $m = 0$ در (۷-۱۲۵) نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| 0, 0 \right\rangle^2 + \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| 0, 0 \right\rangle^2 = 1 \quad (7-165)$$

با ترکیب (۷-۱۶۴) و (۷-۱۶۵) به نتیجه‌ی زیر می‌رسیم:

$$\left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| 0, 0 \right\rangle = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (7-166)$$

علامت $\langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} | 0, 0 \rangle$ باید مثبت باشد زیرا مطابق با قرارداد فاز، ضریب $\langle j_1, j_2; j_1, (j-j_1) | j, j \rangle$ مثبت است از این رو

$$\langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} | 0, 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (۱۶۷-۷)$$

در رابطه با $\langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} | 0, 0 \rangle$ باید گفت که می‌توان مقدار آن را از (۱۶۴-۷) و (۱۶۷-۷) نتیجه گرفت:

$$\langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} | 0, 0 \rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} \quad (۱۶۸-۷)$$

در مرحله‌ی بعد، محاسبه‌ی ضریب‌های مربوط به (۱۶۱-۷) تا (۱۶۳-۷) به صورتی که در ادامه می‌آید، انجام می‌شود. شرط متعامد بهنجار بودن (۱۲۵-۷) به رابطه‌های زیر می‌انجامد:

$$\langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} | 1, 1 \rangle^2 = 1, \quad \langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; -\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} | 1, -1 \rangle^2 = 1 \quad (۱۶۹-۷)$$

و چون $\langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} | 1, 1 \rangle$ و $\langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; -\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} | 1, -1 \rangle$ هر دو حقیقی و مثبتند، داریم:

$$\langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} | 1, 1 \rangle = 1, \quad \langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; -\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} | 1, -1 \rangle = 1 \quad (۱۷۰-۷)$$

در رابطه با ضریب‌های $\langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} | 1, 0 \rangle$ و $\langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} | 1, 0 \rangle$ باید گفت که می‌توان آنها را به ترتیب با قرار دادن $j = 1, m = 0, m_1 = \frac{1}{2}, m_2 = -\frac{1}{2}$ و $j = 1, m = 0, m_1 = -\frac{1}{2}, m_2 = \frac{1}{2}$ در حالت علامت پایین (۱۵۵-۷) به دست آورد:

$$\sqrt{2} \langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} | 1, 0 \rangle = \langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} | 1, 1 \rangle \quad (۱۷۱-۷)$$

$$\sqrt{2} \langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} | 1, 0 \rangle = \langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} | 1, 1 \rangle \quad (۱۷۲-۷)$$

با ترکیب (۱۷۰-۷) با (۱۷۱-۷) و (۱۷۲-۷) رابطه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$\langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} | 1, 0 \rangle = \langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} | 1, 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (۱۷۳-۷)$$

سرانجام با جاگذاری ضریب‌های کلبش-گوردن (۱۶۷-۷) و (۱۶۸-۷) در (۱۶۰-۷) و (۱۷۰-۷) و جاگذاری (۱۷۳-۷) در (۱۶۱-۷) تا (۱۶۳-۷) به نتایج زیر می‌رسیم:

$$| 0, 0 \rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle \quad (۱۷۴-۷)$$

$$|1, 1\rangle = \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle \quad (175-7)$$

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle \quad (176-7)$$

$$|1, -1\rangle = \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; -\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle \quad (177-7)$$

توجه کنید که حالت تک‌تابی $|0, 0\rangle$ پادمتقارن است در حالی که حالت‌های سه‌تابی $|1, -1\rangle$ ، $|1, 0\rangle$ و $|1, 1\rangle$ متقارن‌اند.

رهیافت دوم: استفاده از جبر تکانه‌ی زاویه‌ای

با شروع از $z = 1$ و با توجه به این که $|1, 1\rangle$ و $\left| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle$ هر دو بهنجارند، معادله‌ی (۱۶۱-۷) به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\left\langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \left| 1, 1 \right\rangle^2 = 1 \quad (178-7)$$

از قرارداد فاز که بیان می‌کند که $\langle j, j | j, j \rangle = 1$ باید مثبت باشد، می‌بینیم که $\langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} | 1, 1 \rangle = 1$ است و از این رو

$$|1, 1\rangle = \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle \quad (179-7)$$

حال برای یافتن ضریب‌های کلیش‌گوردن کت $|1, 0\rangle$ به سادگی \hat{J}_- را روی $|1, 1\rangle$ اثر می‌دهیم:

$$\hat{J}_- |1, 1\rangle = (\hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-}) \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle \quad (180-7)$$

که به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle \quad (181-7)$$

از این رو داریم: $\langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} | 1, 0 \rangle = 1/\sqrt{2}$ و $\langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} | 1, 0 \rangle = 1/\sqrt{2}$. سپس با اعمال \hat{J}_- روی (۱۸۱-۷) نتیجه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$|1, -1\rangle = \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; -\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle \quad (182-7)$$

سرانجام برای یافتن $|0, 0\rangle$ در دو مرحله کار را انجام می‌دهیم: ابتدا با توجه به این که

$$|0, 0\rangle = a \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle + b \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle \quad (183-7)$$

که در آن $a = \langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} | \circ, \circ \rangle$ و $b = \langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} | \circ, \circ \rangle$ ترکیب (۷-۱۸۱) با (۷-۱۸۳) به نتیجه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\langle \circ, \circ | 1, \circ \rangle = \frac{a}{\sqrt{2}} + \frac{b}{\sqrt{2}} = \circ \quad (۷-۱۸۴)$$

سپس با توجه به این که $|\circ, \circ\rangle$ بهنجار است، داریم:

$$\langle \circ, \circ | \circ, \circ \rangle = a^2 + b^2 = 1 \quad (۷-۱۸۵)$$

با ترکیب (۷-۱۸۴) و (۷-۱۸۵) و چون $\langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} | \circ, \circ \rangle$ باید مثبت باشد، به‌دست می‌آوریم: $a = \langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} | \circ, \circ \rangle = -1/\sqrt{2}$ و $b = \langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} | \circ, \circ \rangle = 1/\sqrt{2}$. با وارد کردن این مقادیر در (۷-۱۸۳) نتیجه‌ی زیر را به‌دست می‌آوریم:

$$|\circ, \circ\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle \quad (۷-۱۸۶)$$

(ب) با نوشتن (۷-۱۷۴) تا (۷-۱۷۷) به شکل ماتریسی

$$\begin{pmatrix} |\circ, \circ\rangle \\ |1, 1\rangle \\ |1, \circ\rangle \\ |1, -1\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \circ & 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} & \circ \\ 1 & \circ & \circ & \circ \\ \circ & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & \circ \\ \circ & \circ & \circ & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; -\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle \end{pmatrix} \quad (۷-۱۸۷)$$

می‌بینیم که عنصرهای ماتریس تبدیل

$$U = \begin{pmatrix} \circ & 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} & \circ \\ 1 & \circ & \circ & \circ \\ \circ & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & \circ \\ \circ & \circ & \circ & 1 \end{pmatrix} \quad (۷-۱۸۸)$$

که بردارهای $\{|j, m\rangle\}$ را به همتهای $\{|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\}$ آنها تبدیل می‌کند، از ضرب‌های کلبش-گوردن به‌دست آمده در بالا به‌دست می‌آید. با وارون کردن (۷-۱۸۷) به‌دست می‌آوریم:

$$\begin{pmatrix} \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}; -\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \circ & 1 & \circ & \circ \\ 1/\sqrt{2} & \circ & 1/\sqrt{2} & \circ \\ -1/\sqrt{2} & \circ & 1/\sqrt{2} & \circ \\ \circ & \circ & \circ & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\circ, \circ\rangle \\ |1, 1\rangle \\ |1, \circ\rangle \\ |1, -1\rangle \end{pmatrix} \quad (۷-۱۸۹)$$

از (۷-۱۸۷) و (۷-۱۸۹) می‌بینیم که ماتریس تبدیل U یکانی است که انتظار آن می‌رفت زیرا $U^{-1} = U^\dagger$ است.

۳-۳-۷ جفت‌شدگی تکانه‌های زاویه‌ای مداری و اسپینی

در اینجا به‌عنوان یک کاربرد مهم برای فرمول‌بندی، جمع تکانه‌های زاویه‌ای را در جفت‌شدگی تکانه‌ی زاویه‌ای مداری و اسپینی در نظر می‌گیریم: $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$. به‌خصوص می‌خواهیم ضریب‌های کلبش-گوردن وابسته به این جفت‌شدگی را برای ذره‌ای با اسپین $\frac{1}{2}$ بیابیم. در این حالت داریم: (صحیح) $l = j_1$ ، $m_1 = m_l$ ، $m_2 = m_s = \pm \frac{1}{2}$ و $j_2 = s = \frac{1}{2}$. مقدارهای مجاز j که از $(l, \frac{1}{2})$ به‌دست می‌آیند در بازه‌ی $|l - \frac{1}{2}| \leq j \leq |l + \frac{1}{2}|$ واقع‌اند. اگر $l = 0$ باشد مسأله روشن است: ذره تنها دارای اسپین است و تکانه‌ی زاویه‌ای مداری ندارد. اما اگر $l > 0$ باشد آنگاه j می‌تواند تنها دو مقدار ممکن $j = l \pm \frac{1}{2}$ را بگیرد. $2(l+1)$ حالت $\{|l + \frac{1}{2}, m\rangle\}$ متناظر با حالت $j = l + 1/2$ و $2l$ حالت $\{|l - \frac{1}{2}, m\rangle\}$ متناظر با $j = l - \frac{1}{2}$ وجود دارد. در اینجا به‌صورت مفصل‌تر هر یک از این دو حالت را بررسی می‌کنیم.

حالت $j = l + 1/2$

با اعمال رابطه‌ی (۱۲۱-۷) بر حالتی که در آن $j = l + \frac{1}{2}$ است، داریم:

$$\begin{aligned} \left| l + \frac{1}{2}, m \right\rangle &= \sum_{m_l = -l}^l \sum_{m_s = -1/2}^{1/2} \left\langle l, \frac{1}{2}; m_l, m_s \left| l + \frac{1}{2}, m \right\rangle \left| l, \frac{1}{2}; m_l, m_s \right\rangle \right. \\ &= \sum_{m_l} \left\langle l, \frac{1}{2}; m_l, -\frac{1}{2} \left| l + \frac{1}{2}, m \right\rangle \left| l, \frac{1}{2}; m_l, -\frac{1}{2} \right\rangle \right. \\ &\quad \left. + \sum_{m_l} \left\langle l, \frac{1}{2}; m_l, \frac{1}{2} \left| l + \frac{1}{2}, m \right\rangle \left| l, \frac{1}{2}; m_l, \frac{1}{2} \right\rangle \right. \end{aligned} \quad (190-7)$$

با استفاده از قاعده‌ی گزینش $m_l + m_s = m$ یا $m_l = m - m_s$ می‌توانیم (۱۹۰-۷) را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$\begin{aligned} \left| l + \frac{1}{2}, m \right\rangle &= \left\langle l, \frac{1}{2}; m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| l + \frac{1}{2}, m \right\rangle \left| l, \frac{1}{2}; m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right. \\ &\quad \left. + \left\langle l, \frac{1}{2}; m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| l + \frac{1}{2}, m \right\rangle \left| l, \frac{1}{2}; m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right. \end{aligned} \quad (191-7)$$

حال باید $\left\langle l, \frac{1}{2}; m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| l + \frac{1}{2}, m \right\rangle$ و $\left\langle l, \frac{1}{2}; m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| l + \frac{1}{2}, m \right\rangle$ را محاسبه نماییم. از محاسبه‌ی $\left\langle l, \frac{1}{2}; m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| l + \frac{1}{2}, m \right\rangle$ شروع می‌کنیم. با جاگذاری $j_1 = l$ ، $j_2 = \frac{1}{2}$ ، $m_1 + m_2 = m$ و $m_2 = -\frac{1}{2}$ در حالت علامت بالای (۱۵۵-۷) به‌دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} &\sqrt{\left(l - m + \frac{3}{2}\right) \left(l + m + \frac{1}{2}\right)} \left\langle l, \frac{1}{2}; m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| l + \frac{1}{2}, m \right\rangle \right. \\ &= \sqrt{\left(l + m + \frac{1}{2}\right) \left(l - m + \frac{1}{2}\right)} \left\langle l, \frac{1}{2}; m - \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| l + \frac{1}{2}, m - 1 \right\rangle \right. \end{aligned} \quad (192-7)$$

یا

$$\left\langle l, \frac{1}{q}; m + \frac{1}{q}, -\frac{1}{q} \middle| l + \frac{1}{q}, m \right\rangle = \sqrt{\frac{l-m+1/2}{l-m+3/2}} \left\langle l, \frac{1}{q}; m - \frac{1}{q}, -\frac{1}{q} \middle| l + \frac{1}{q}, m - 1 \right\rangle \quad (۱۹۳-۷)$$

در تشابه با $\langle l, \frac{1}{q}; m + \frac{1}{q}, -\frac{1}{q} \middle| l + \frac{1}{q}, m \rangle$ می‌توانیم ضریب کلیش-گوردن $\langle l, \frac{1}{q}; m + \frac{1}{q}, -\frac{1}{q} \middle| l + \frac{1}{q}, m - 1 \rangle$ را برحسب $\langle l, \frac{1}{q}; m - \frac{1}{q}, -\frac{1}{q} \middle| l + \frac{1}{q}, m - 2 \rangle$ بیان کنیم:

$$\begin{aligned} \left\langle l, \frac{1}{q}; m + \frac{1}{q}, -\frac{1}{q} \middle| l + \frac{1}{q}, m \right\rangle &= \sqrt{\frac{l-m+1/2}{l-m+3/2}} \sqrt{\frac{l-m+3/2}{l-m+5/2}} \\ &\times \left\langle l, \frac{1}{q}; m - \frac{1}{q}, -\frac{1}{q} \middle| l + \frac{1}{q}, m - 2 \right\rangle \quad (۱۹۴-۷) \end{aligned}$$

می‌توانیم این روند را تا زمانی که m به پایین‌ترین مقدار $(-l - \frac{1}{q})$ می‌رسد، ادامه دهیم:

$$\begin{aligned} \left\langle l, \frac{1}{q}; m + \frac{1}{q}, -\frac{1}{q} \middle| l + \frac{1}{q}, m \right\rangle &= \sqrt{\frac{l-m+1/2}{l-m+3/2}} \sqrt{\frac{l-m+3/2}{l-m+5/2}} \\ &\times \dots \times \sqrt{\frac{2l}{2l+1}} \left\langle l, \frac{1}{q}; -l, -\frac{1}{q} \middle| l + \frac{1}{q}, -l - \frac{1}{q} \right\rangle \quad (۱۹۵-۷) \end{aligned}$$

یا

$$\left\langle l, \frac{1}{q}; m + \frac{1}{q}, -\frac{1}{q} \middle| l + \frac{1}{q}, m \right\rangle = \sqrt{\frac{l-m+1/2}{2l+1}} \left\langle l, \frac{1}{q}; -l, -\frac{1}{q} \middle| l + \frac{1}{q}, -l - \frac{1}{q} \right\rangle \quad (۱۹۶-۷)$$

از (۱۲۵-۷) به آسانی می‌توانیم $1 = \langle l, -\frac{1}{q}; -l, -\frac{1}{q} \middle| l + \frac{1}{q}, -l - \frac{1}{q} \rangle^2$ را به دست آوریم و با توجه به این که این ضریب حقیقی است، داریم: $1 = \langle l, -\frac{1}{q}; -l, -\frac{1}{q} \middle| l + \frac{1}{q}, -l - \frac{1}{q} \rangle$. با وارد کردن این مقدار در (۱۹۶-۷) به نتیجه‌ی زیر می‌رسیم:

$$\left\langle l, \frac{1}{q}; m + \frac{1}{q}, -\frac{1}{q} \middle| l + \frac{1}{q}, m \right\rangle = \sqrt{\frac{l-m+1/2}{2l+1}} \quad (۱۹۷-۷)$$

حال به محاسبه‌ی ضریب دوم مربوط به (۱۹۱-۷) $\langle l, \frac{1}{q}; m - \frac{1}{q}, \frac{1}{q} \middle| l + \frac{1}{q}, m \rangle$ باز می‌گردیم. می‌توانیم این محاسبه را به دو روش متفاوت انجام دهیم. روش نخست از پیروی از همان روندی که در بالا برای یافتن $\langle l, \frac{1}{q}; m + \frac{1}{q}, -\frac{1}{q} \middle| l + \frac{1}{q}, m \rangle$ به کار گرفته شد، تشکیل شده است. بدین منظور، تنها باید جاگذاری‌های $j = l + \frac{1}{q}, j_1 = l, j_2 = \frac{1}{q}, m_1 = m - \frac{1}{q}$ و $m_2 = \frac{1}{q}$ را در حالت علامت پایین

(۱۵۵-۷) انجام دهیم و از آنجا کار را ادامه دهیم. روش دوم که روش ساده‌تری است، شامل جاگذاری (۱۹۷-۷) در (۱۹۱-۷) و سپس محاسبه‌ی هنجار معادله‌ی حاصل است:

$$1 = \frac{l-m+1/2}{2l+1} + \left\langle l, \frac{1}{2}; m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2}, m \right\rangle^2 \quad (198-7)$$

که در آن از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که سه کت $\langle l + \frac{1}{2}, m \rangle$ و $\langle l, \frac{1}{2}; m \pm \frac{1}{2}, \mp \frac{1}{2} \rangle$ بهنجارند. دوباره با توجه به این که $\langle l, \frac{1}{2}; m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2}, m \rangle$ حقیقی است، (۱۹۸-۷) به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\left\langle l, \frac{1}{2}; m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2}, m \right\rangle = \sqrt{\frac{l+m+1/2}{2l+1}} \quad (199-7)$$

ترکیب (۱۹۱-۷)، (۱۹۷-۷) و (۱۹۹-۷) نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\left| l + \frac{1}{2}, m \right\rangle = \sqrt{\frac{l-m+1/2}{2l+1}} \left| l, \frac{1}{2}; m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{l+m+1/2}{2l+1}} \left| l, \frac{1}{2}; m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (200-7)$$

که در آن مقدارهای ممکن m به صورت زیر هستند:

$$m = -l - \frac{1}{2}, -l + \frac{1}{2}, -l + \frac{3}{2}, \dots, l - \frac{3}{2}, l - \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2} \quad (201-7)$$

حالت $j = l - 1/2$

۲۱ حالت $\{ |l - \frac{1}{2}, m\rangle \}$ متناظر با $j = l - \frac{1}{2}$ وجود دارند. این حالت‌ها عبارتند از $|l - \frac{1}{2}, -l + \frac{1}{2}\rangle$ ، $|l - \frac{1}{2}, -l + \frac{3}{2}\rangle$ ، ...، $|l - \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2}\rangle$. با استفاده از (۱۲۱-۷) هر حالت $|l - \frac{1}{2}, m\rangle$ را به صورت زیر می‌نویسیم:

$$\begin{aligned} \left| l - \frac{1}{2}, m \right\rangle &= \left\langle l, \frac{1}{2}; m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| l - \frac{1}{2}, m \right\rangle \left| l, \frac{1}{2}; m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ &+ \left\langle l, \frac{1}{2}; m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| l - \frac{1}{2}, m \right\rangle \left| l, \frac{1}{2}; m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \end{aligned} \quad (202-7)$$

می‌توان دو ضریب کلبش‌گوردن این معادله را با پیروی از روشی که در بالا برای حالت $j = l + \frac{1}{2}$ به کار بردیم، محاسبه کرد. بنابراین می‌توانیم تحقیق کنیم که $|l - \frac{1}{2}, m\rangle$ از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\left| l - \frac{1}{2}, m \right\rangle = \sqrt{\frac{l+m+1/2}{2l+1}} \left| l, \frac{1}{2}; m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \sqrt{\frac{l-m+1/2}{2l+1}} \left| l, \frac{1}{2}; m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (203-7)$$

که در آن

$$m = -l + \frac{1}{2}, -l + \frac{3}{2}, \dots, l - \frac{3}{2}, l - \frac{1}{2} \quad (204-7)$$

می‌توانیم (۲۰۰-۷) و (۲۰۳-۷) را به صورت زیر ترکیب کنیم:

$$\left| l \pm \frac{1}{2}, m \right\rangle = \sqrt{\frac{l \mp m + \frac{1}{2}}{2l+1}} \left| l, \frac{1}{2}; m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \pm \sqrt{\frac{l \pm m + \frac{1}{2}}{2l+1}} \left| l, \frac{1}{2}; m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (205-7)$$

مثالی از یک ذره با $l = 1$

به عنوان مثالی از فرمول بندی‌ای که در بالا روی آن کار شد، حالت خاص $l = 1$ را در نظر می‌گیریم. با وارد کردن $l = 1$ و $m = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$ در حالت علامت بالای (۲۰۵-۷)، به دست می‌آوریم:

$$\left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = \left| 1, \frac{1}{2}; 1, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (206-7)$$

$$\left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} \left| 1, \frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2} \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} \left| 1, \frac{1}{2}; 1, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (207-7)$$

$$\left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left| 1, \frac{1}{2}; -1, \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} \left| 1, \frac{1}{2}; 0, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (208-7)$$

$$\left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle = \left| 1, \frac{1}{2}; -1, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (209-7)$$

به صورت مشابه، وارد کردن $l = 1$ و $m = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$ در حالت علامت پایین (۲۰۵-۷) نتیجه‌های زیر را می‌دهد:

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} \left| 1, \frac{1}{2}; 1, -\frac{1}{2} \right\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} \left| 1, \frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (210-7)$$

$$\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left| 1, \frac{1}{2}; 0, -\frac{1}{2} \right\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} \left| 1, \frac{1}{2}; -1, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (211-7)$$

تابع‌های اسپین - مدار

می‌توان ویژه تابع‌های تکانه‌ی زاویه‌ای کل $\hat{J} + \hat{L} + \hat{S}$ ذره را با ضرب مستقیم ویژه حالت‌های تکانه‌ی زاویه‌ای مداری و اسپینی $\left| l, m - \frac{1}{2} \right\rangle$ و $\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$ نمایش داد. از (۲۰۵-۷) داریم:

$$\left| l \pm \frac{1}{2}, m \right\rangle = \sqrt{\frac{l \mp m + \frac{1}{2}}{2l+1}} \left| l, m + \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \pm \sqrt{\frac{l \pm m + \frac{1}{2}}{2l+1}} \left| l, m - \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (212-7)$$

اگر این ذره در یک پتانسیل مرکزی حرکت کند آنگاه تابع موج کامل آن از یک بخش فضایی $\langle r, \theta, \varphi | n, l, m \pm \frac{1}{2} \rangle = R_{nl}(r) Y_{l, m \pm \frac{1}{2}}$ و یک بخش اسپینی $|\frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2}\rangle$ تشکیل شده است:

$$\Psi_{n, l, j = l \pm \frac{1}{2}, m} = R_{nl}(r) \left[\sqrt{\frac{l \mp m + \frac{1}{2}}{2l + 1}} Y_{l, m + \frac{1}{2}} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \pm \sqrt{\frac{l \pm m + \frac{1}{2}}{2l + 1}} Y_{l, m - \frac{1}{2}} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right] \quad (213-7)$$

با استفاده از نمایش اسپینور برای بخش اسپینی $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ و $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ می‌توانیم (۲۱۳-۷) را به صورت زیر بنویسیم:

$$\Psi_{n, l, j = l \pm \frac{1}{2}, m}(r, \theta, \varphi) = \frac{R_{nl}(r)}{\sqrt{2l + 1}} \begin{pmatrix} \pm \sqrt{l \pm m + \frac{1}{2}} Y_{l, m - \frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \\ \sqrt{l \mp m + \frac{1}{2}} Y_{l, m + \frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \end{pmatrix} \quad (214-7)$$

که در آن m نیمه صحیح است. حالت‌های (۲۱۳-۷) و (۲۱۴-۷) ویژه تابع‌های همزمان $\hat{J}^2, \hat{L}^2, \hat{S}^2$ و \hat{J}_z به ترتیب با ویژه مقدارهای $\hbar^2 j(j + 1), \hbar^2 l(l + 1), \hbar^2 s(s + 1)$ و $\hbar m$ هستند. تابع‌های موج $\Psi_{n, l, j = l \pm \frac{1}{2}, m}(r, \theta, \varphi)$ ویژه حالت‌های $\hat{L} \cdot \hat{S}$ نیز هستند زیرا

$$\begin{aligned} \hat{L} \cdot \hat{S} |nljm\rangle &= \frac{1}{2} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2) |nljm\rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2} [j(j + 1) - l(l + 1) - s(s + 1)] |nljm\rangle \end{aligned} \quad (215-7)$$

در اینجا j تنها دو مقدار $j = l \pm \frac{1}{2}$ را می‌گیرد بنابراین داریم:

$$\langle nljm | \hat{L} \cdot \hat{S} |nljm\rangle = \frac{\hbar^2}{2} \left[j(j + 1) - l(l + 1) - \frac{3}{4} \right] = \begin{cases} \frac{1}{2} l \hbar^2 & j = l + \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} (l + 1) \hbar^2 & j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \quad (216-7)$$

۷-۳-۴ جمع بیش از دو تکانه‌ی زاویه‌ای

می‌توانیم صورت‌بندی مربوط به جمع دو تکانه‌ی زاویه‌ای را به حالت‌هایی که در آنها سه تکانه‌ی زاویه‌ای یا بیشتر را با هم جمع می‌کنیم، تعمیم دهیم. به‌عنوان مثال، برای جمع سه تکانه‌ی زاویه‌ای دو به دو جابه‌جاشونده‌ی $\hat{J} = \hat{J}_1 + \hat{J}_2 + \hat{J}_3$ می‌توانیم هر یک از سه روشی که در ادامه می‌آیند را دنبال کنیم. (الف) \hat{J}_1 و \hat{J}_2 را با هم جمع می‌کنیم تا $\hat{J}_{12} = \hat{J}_1 + \hat{J}_2$ را به دست آوریم و سپس \hat{J}_{12} را با \hat{J}_3 جمع می‌کنیم: $\hat{J} = \hat{J}_{12} + \hat{J}_3$. (ب) \hat{J}_2 و \hat{J}_3 را با هم جمع می‌کنیم تا $\hat{J}_{23} = \hat{J}_2 + \hat{J}_3$ را تشکیل دهیم و سپس \hat{J}_{23} را با \hat{J}_1 جمع می‌کنیم: $\hat{J} = \hat{J}_1 + \hat{J}_{23}$. (پ) \hat{J}_1 و \hat{J}_3 را با هم جمع می‌کنیم تا $\hat{J}_{13} = \hat{J}_1 + \hat{J}_3$ را تشکیل دهیم و سپس \hat{J}_{13} را با \hat{J}_2 جمع می‌کنیم: $\hat{J} = \hat{J}_2 + \hat{J}_{13}$.

با در نظر گرفتن روش نخست و نمایش دادن ویژه حالت‌های \hat{J}_z^1 و \hat{J}_z^2 با $|j_1, m_1\rangle$ و ویژه حالت‌های \hat{J}_z^3 و \hat{J}_z^2 با $|j_2, m_2\rangle$ و ویژه حالت‌های \hat{J}_z^1 و \hat{J}_z^3 با $|j_3, m_3\rangle$ می‌توانیم ویژه حالت‌های مشترک $|j_{12}, j, m\rangle$ مربوط به $\hat{J}_z^1, \hat{J}_z^2, \hat{J}_z^3, \hat{J}_z^4, \hat{J}_z^5, \hat{J}_z^6, \hat{J}_z^7$ را به صورتی که در ادامه می‌آید، برحسب حالت‌های زیر بیان کنیم:

$$|j_1, j_2, j_3; m_1, m_2, m_3\rangle = |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle |j_3, m_3\rangle \quad (217-7)$$

ابتدا، جفت‌شدگی \hat{J}_1 و \hat{J}_2 به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$|j_{12}, m_{12}\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_{12}, m_{12}\rangle |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \quad (218-7)$$

که در آن $m_{12} = m_1 + m_2$ و $|j_1 + j_2| \leq j_{12} \leq |j_1 - j_2|$. سپس با جمع \hat{J}_{12} و \hat{J}_3 حالت $|j_{12}, j, m\rangle$ از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\sum_{m_{12}=-j_{12}}^{j_{12}} \sum_{m_3=-j_3}^{j_3} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_{12}, m_{12}\rangle \langle j_{12}, j_3; m_{12}, m_3 | j_{12}, j, m\rangle |j_1, j_2, j_3; m_1, m_2, m_3\rangle \quad (219-7)$$

همراه با $m = m_{12} + m_3$ و $|j_{12} + j_3| \leq j \leq |j_{12} - j_3|$. ضریب‌های کلیش-گوردن $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_{12}, j, m\rangle$ و $\langle j_{12}, j_3; m_{12}, m_3 | j_{12}, j, m\rangle$ به ترتیب متناظر با جفت‌شدگی \hat{J}_1 و \hat{J}_2 و \hat{J}_{12} و \hat{J}_3 هستند. محاسبه‌ی این ضریب‌ها مشابه با محاسبه‌ی دو تکانه‌ی زاویه‌ای است. به عنوان مثال، در مسأله‌ی حل شده‌ی ۷-۴ خواهیم دید که چگونه سه اسپین را با هم جمع کنیم و چگونه ضریب‌های کلیش-گوردن متناظر را محاسبه کنیم.

باید توجه کنیم که جمع \hat{J}_1, \hat{J}_2 و \hat{J}_3 اساساً از ساختن ویژه بردارهای $|j_{12}, j, m\rangle$ برحسب $(1)(2j_3 + 1)(2j_2 + 1)(2j_1 + 1)$ حالت $|j_1, j_2, j_3; m_1, m_2, m_3\rangle$ تشکیل شده است. سپس می‌توانیم بنویسیم:

$$\hat{J}_{\pm} |j_{12}, j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j_{12}, j, m \pm 1\rangle \quad (220-7)$$

$$\hat{J}_{1\pm} |j_1, j_2, j_3; m_1, m_2, m_3\rangle = \hbar \sqrt{j_1(j_1 + 1) - m_1(m_1 \pm 1)} |j_1, j_2, j_3; (m_1 \pm 1), m_2, m_3\rangle \quad (221-7)$$

$$\hat{J}_{2\pm} |j_1, j_2, j_3; m_1, m_2, m_3\rangle = \hbar \sqrt{j_2(j_2 + 1) - m_2(m_2 \pm 1)} |j_1, j_2, j_3; m_1, (m_2 \pm 1), m_3\rangle \quad (222-7)$$

$$\hat{J}_{3\pm} |j_1, j_2, j_3; m_1, m_2, m_3\rangle = \hbar \sqrt{j_3(j_3 + 1) - m_3(m_3 \pm 1)} |j_1, j_2, j_3; m_1, m_2, (m_3 \pm 1)\rangle \quad (223-7)$$

می‌توان روش قبلی را به جفت‌شدگی بیش از سه تکانه‌ی زاویه‌ای نیز تعمیم داد: $\hat{J} = \hat{J}_1 + \hat{J}_2 + \hat{J}_3 + \dots + \hat{J}_N$. هر بار که دو تکانه‌ی زاویه‌ای را با هم جفت می‌کنیم، مسأله را به جفت‌شدگی $(N - 1)$ تکانه‌ی زاویه‌ای کاهش می‌دهیم. به‌عنوان مثال، می‌توانیم با جمع \hat{J}_1 و \hat{J}_2 برای تولید \hat{J}_{12} شروع کنیم آنگاه $(N - 1)$ تکانه‌ی زاویه‌ای دیگر باقی می‌ماند. سپس با جمع کردن \hat{J}_{12} و \hat{J}_3 برای تشکیل \hat{J}_{123} ، $(N - 2)$ تکانه‌ی زاویه‌ای باقی می‌ماند. در مرحله‌ی بعد با جمع کردن \hat{J}_{123} و \hat{J}_4 ، $(N - 3)$ تکانه‌ی زاویه‌ای باقی می‌ماند و به همین ترتیب. می‌توانیم این روش را تا زمانی که تمام تکانه‌های زاویه‌ای داده شده را با هم جمع کنیم، ادامه دهیم.

۷-۳-۵- ماتریس‌های چرخش برای جفت‌شدگی دو تکانه‌ی زاویه‌ای

می‌خواهیم بفهمیم که چگونه ماتریس چرخش وابسته به تکانه‌ی زاویه‌ای \hat{J} را برحسب ماتریس‌های چرخش متناظر با \hat{J}_1 و \hat{J}_2 (طوری که $\hat{J} = \hat{J}_1 + \hat{J}_2$) بیان کنیم. یعنی با دانستن ماتریس‌های چرخش $d^{(j_1)}(\beta)$ و $d^{(j_2)}(\beta)$ چگونه $d^{(j)}_{mm'}(\beta)$ محاسبه می‌شود؟

با توجه به

$$d^{(j)}_{m'm}(\beta) = \langle j, m' | \hat{R}_y(\beta) | j, m \rangle \quad (۲۲۴-۷)$$

که در آن داریم

$$|j, m\rangle = \sum_{m_1 m_2} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \quad (۲۲۵-۷)$$

$$|j, m'\rangle = \sum_{m'_1 m'_2} \langle j_1, j_2; m'_1, m'_2 | j, m' \rangle |j_1, j_2; m'_1, m'_2\rangle \quad (۲۲۶-۷)$$

و چون ضریب‌های کلبش-گوردن حقیقی‌اند،

$$\langle j, m' | \sum_{m'_1 m'_2} \langle j_1, j_2; m'_1, m'_2 | j, m' \rangle \langle j_1, j_2; m'_1, m'_2 | \quad (۲۲۷-۷)$$

می‌توانیم (۲۲۴-۷) را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$d^{(j)}_{m'm}(\beta) = \sum_{m_1 m_2} \sum_{m'_1 m'_2} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle \langle j_1, j_2; m'_1, m'_2 | j, m' \rangle \times \langle j_1, j_2; m'_1, m'_2 | \hat{R}_y(\beta) | j_1, j_2; m_1, m_2 \rangle \quad (۲۲۸-۷)$$

با توجه به این که $\hat{R}_y(\beta) = \exp[-i\beta\hat{J}_y/\hbar] = \exp[-i\beta\hat{J}_{1y}/\hbar] \exp[-i\beta\hat{J}_{2y}/\hbar]$ است (زیرا $\hat{J}_y = \hat{J}_{1y} + \hat{J}_{2y}$ است).

از طرفی $\langle j_1, j_2; m'_1, m'_2 | = \langle j_1, m'_1 | \langle j_2, m'_2 |$ و $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle$ داریم:

$$d^{(j)}_{m'm}(\beta) = \sum_{m_1 m_2} \sum_{m'_1 m'_2} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle \langle j_1, j_2; m'_1, m'_2 | j, m' \rangle \times \langle j_1, m'_1 | \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\beta\hat{J}_{1y}\right] |j_1, m_1\rangle \langle j_2, m'_2 | \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\beta\hat{J}_{2y}\right] |j_2, m_2\rangle \quad (۲۲۹-۷)$$

یا

$$d_{m'm}^{(j)}(\beta) = \sum_{m_1 m_2} \sum_{m'_1 m'_2} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle \langle j_1, j_2; m'_1, m'_2 | j, m' \rangle d_{m'_1 m_1}^{(j_1)}(\beta) d_{m'_2 m_2}^{(j_2)}(\beta) \quad (230-7)$$

با

$$d_{m'_1 m_1}^{(j_1)}(\beta) = \langle j_1, m'_1 | \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \beta \hat{J}_{1y} \right] | j_1, m_1 \rangle \quad (231-7)$$

$$d_{m'_2 m_2}^{(j_2)}(\beta) = \langle j_2, m'_2 | \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \beta \hat{J}_{2y} \right] | j_2, m_2 \rangle \quad (232-7)$$

از (۵۴-۷) داریم:

$$d_{m'm}^{(j)}(\beta) = e^{i(m'\alpha + m\gamma)} D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) \quad (233-7)$$

از این رو می‌توانیم (۲۳۰-۷) را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) = \sum_{m_1 m_2} \sum_{m'_1 m'_2} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle \langle j_1, j_2; m'_1, m'_2 | j, m' \rangle \quad (234-7)$$

$$D_{m'_1 m_1}^{(j_1)}(\alpha, \beta, \gamma) D_{m'_2 m_2}^{(j_2)}(\alpha, \beta, \gamma)$$

زیرا $m' = m'_1 + m'_2$ و $m = m_1 + m_2$.

حال بیا باید ببینیم چگونه حاصل ضرب ماتریس‌های چرخش $d^{(j_1)}(\beta)$ و $d^{(j_2)}(\beta)$ را برحسب $d_{mm'}^{(j)}(\beta)$ بیان کنیم. با ساندریج کردن هر دو طرف

$$\exp \left[-\frac{i}{\hbar} \beta \hat{J}_{1y} \right] \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \beta \hat{J}_{2y} \right] = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \beta \hat{J}_y \right] \quad (235-7)$$

بین

$$|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = \sum_{jm} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle |j, m\rangle \quad (236-7)$$

و

$$\langle j_1, j_2; m'_1, m'_2 | \sum_{jm'} \langle j_1, j_2; m'_1, m'_2 | j, m' \rangle \langle j, m' | \quad (237-7)$$

و با توجه به این که $\langle j_1, m'_1 | j_2, m'_2 \rangle = \langle j_1, j_2; m'_1, m'_2 |$ و $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 \rangle = |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle$ است، داریم:

$$\begin{aligned} & \langle j_1, m'_1 | \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \beta \hat{J}_{1y} \right] | j_1, m_1 \rangle \langle j_2, m'_2 | \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \beta \hat{J}_{2y} \right] | j_2, m_2 \rangle \\ & = \sum_{jmm'} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle \langle j_1, j_2; m'_1, m'_2 | j, m' \rangle \langle j, m' | \hat{R}_y(\beta) | j, m \rangle \end{aligned} \quad (238-7)$$

یا

$$d_{m'_1 m_1}^{(j_1)}(\beta) d_{m'_2 m_2}^{(j_2)}(\beta) = \sum_{|j_1 - j_2|}^{|j_1 + j_2|} \sum_{mm'} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle \langle j_1, j_2; m'_1, m'_2 | j, m' \rangle d_{m' m}^{(j)}(\beta) \quad (239-7)$$

با پیروی از همان روندی که به (۲۳۴-۷) انجامید، می‌توانیم (۲۳۹-۷) را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$D_{m'_1 m_1}^{(j_1)}(\alpha, \beta, \gamma) D_{m'_2 m_2}^{(j_2)}(\alpha, \beta, \gamma) = \sum_{jmm'} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle \langle j_1, j_2; m'_1, m'_2 | j, m' \rangle D_{m' m}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) \quad (240-7)$$

این رابطه به عنوان سری کلبش-گوردن شناخته می‌شود.

رابطه‌ی (۲۴۰-۷) دارای کاربرد مهمی است: به دست آوردن انتگرال شامل سه هماهنگ‌گروی. هنگامی که هم j_1 و هم j_2 عدد صحیح باشند (یعنی $j_1 = l_1$ و $j_2 = l_2$) و m_1 و m_2 هر دو صفر باشند (از این رو $m = 0$)، معادله‌ی (۲۴۰-۷) کاربرد مفیدی پیدا می‌کند:

$$D_{m'_1 0}^{(l_1)}(\alpha, \beta, \gamma) D_{m'_2 0}^{(l_2)}(\alpha, \beta, \gamma) = \sum_{lm} \langle l_1, l_2; 0, 0 | l, 0 \rangle \langle l_1, l_2; m'_1, m'_2 | l, m \rangle D_{m' 0}^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma) \quad (241-7)$$

چون می‌توان عبارت‌های مربوط به $D_{m'_1 0}^{(l_1)}$ ، $D_{m'_2 0}^{(l_2)}$ و $D_{m' 0}^{(l)}$ را از (۷۳-۷) نتیجه گرفت، به خصوص

$$D_{m' 0}^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_{lm}^*(\beta, \alpha) \quad (242-7)$$

می‌توانیم (۲۴۱-۷) را به رابطه‌ی زیر کاهش دهیم:

$$Y_{l_1 m_1}(\beta, \alpha) Y_{l_2 m_2}(\beta, \alpha) = \sum_{lm} \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l+1)}} \langle l_1, l_2; 0, 0 | l, 0 \rangle \langle l_1, l_2; m_1, m_2 | l, m \rangle Y_{lm}(\beta, \alpha) \quad (243-7)$$

که در آن پریم‌ها را برداشته و مزدوج مختلط را در نظر گرفته‌ایم. با ضرب هر دو طرف در $Y_{lm}^*(\beta, \alpha)$ و انتگرال‌گیری روی α و β ، انتگرال زیر را که به دفعات از آن استفاده می‌شود را به دست می‌آوریم:

$$\int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^\pi Y_{lm}^*(\beta, \alpha) Y_{l_1 m_1}(\beta, \alpha) Y_{l_2 m_2}(\beta, \alpha) \sin \beta d\beta = \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l+1)}} \langle l_1, l_2; 0, 0 | l, 0 \rangle \times \langle l_1, l_2; m_1, m_2 | l, m \rangle \quad (244-7)$$

۶-۳-۷ ایزواسپین

ایده‌هایی که در بالا ارائه شد (اسپین و جمع تکانه‌های زاویه‌ای)، تعدادی کاربرد جالب در کمیت‌های فیزیکی دیگر پیدا می‌کنند. به‌عنوان مثال، در حوزه‌ی فیزیک هسته‌ای می‌توان کمیتی که به‌عنوان اسپین ایزوتوپی شناخته می‌شود را با مجموعه‌ای از عملگرهایی نمایش داد که نه تنها از همان جبر مؤلفه‌های تکانه‌ی زاویه‌ای پیروی می‌کنند بلکه همانند تکانه‌های زاویه‌ای معمولی با هم جفت می‌شوند.

چون نیروی هسته‌ای به بار الکتریکی بستگی ندارد، می‌توانیم پروتون و نوترون را جلوه‌های (حالت‌های) جداگانه‌ای از یک ذره (نوکلئون) در نظر بگیریم. بنابراین می‌توان نوکلئون را در دو حالت متفاوت یافت: یک پروتون و یک نوترون. در این صورت، چون پروتون‌ها و نوترون‌ها ذره‌های یکسانی نسبت به نیروی هسته‌ای‌اند، به یک عدد (یا برچسب) کوانتومی اضافی نیاز خواهیم داشت تا نشان دهیم که آیا نوکلئون یک پروتون است یا یک نوترون. به دلیل تشابه صوری آن با اسپین معمولی، این برچسب اسپین ایزوتوپی یا به‌صورت خلاصه، ایزواسپین نامیده می‌شود. اگر عدد کوانتومی ایزواسپین را $\frac{1}{2}$ در نظر بگیریم آنگاه مؤلفه‌ی z آن با یک عدد کوانتومی نمایش داده می‌شود که دارای مقادیرهای $\frac{1}{2}$ و $-\frac{1}{2}$ است. آنگاه اختلاف بین یک پروتون و یک نوترون شبیه به اختلاف بین ذره‌های با اسپین بالا و پایین می‌شود.

اختلاف اساسی بین اسپین معمولی و ایزواسپین در این است که برخلاف اسپین، ایزواسپین هیچ ارتباطی با چرخش‌ها یا گردش در فضای مختصه ندارد از این رو نمی‌تواند با تکانه‌های زاویه‌ای نوکلئون‌ها جفت شود. بنابراین می‌توان نوکلئون‌ها را با $\hat{t}_3 = \pm \frac{1}{2}$ متمایز کرد که در آن \hat{t}_3 مؤلفه‌ی سوم یا مؤلفه‌ی z عملگر برداری ایزواسپین \hat{t} است.

۱-۶-۳-۷ جبر ایزواسپین

به‌دلیل تشابه صوری بین ایزواسپین و اسپین، صورت‌بندی‌های آنها از دیدگاه ریاضی دارای ساختارهایی مشابه‌اند. در این صورت می‌توان جبری که مؤلفه‌های \hat{t}_1 ، \hat{t}_2 و \hat{t}_3 عملگر ایزواسپین \hat{t} از آنها پیروی می‌کنند را از ویژگی‌ها و رابطه‌های جابه‌جایی عملگر اسپین نتیجه گرفت. به‌عنوان مثال، می‌توانیم مؤلفه‌های عملگر ایزواسپین را از ماتریس‌های پائولی τ به‌همان روشی که برای عملگرهای تکانه‌ی زاویه‌ای ذره‌های با اسپین $\frac{1}{2}$ انجام دادیم، بسازیم:

$$\hat{t} = \frac{1}{2} \tau \quad (245-7)$$

با

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (246-7)$$

مؤلفه‌های \hat{t}_1 ، \hat{t}_2 و \hat{t}_3 از همان رابطه‌های جابه‌جایی تکانه‌ی زاویه‌ای پیروی می‌کنند:

$$[\hat{t}_1, \hat{t}_2] = i\hat{t}_3 \quad [\hat{t}_2, \hat{t}_3] = i\hat{t}_1 \quad [\hat{t}_3, \hat{t}_1] = i\hat{t}_2 \quad (247-7)$$

بنابراین می‌توان نوکلئون را در دو حالت متفاوت یافت: هنگامی که \hat{t}_3 روی یک حالت نوکلئون اثر می‌گذارد، ویژه‌مقدارهای $\pm \frac{1}{2}$ را می‌دهد. به صورت قراردادی، \hat{t}_3 یک پروتون برابر با $+\frac{1}{2}$ فرض می‌شود و در مورد یک نوترون، $\hat{t}_3 = -\frac{1}{2}$ است. با نمایش حالت‌های یک پروتون و یک نوترون به ترتیب با $|p\rangle$ و $|n\rangle$:

$$|p\rangle = \left| t = \frac{1}{2}, t_3 = \frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |n\rangle = \left| t = \frac{1}{2}, t_3 = -\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (248-7)$$

داریم:

$$\hat{t}_3 |p\rangle = \hat{t}_3 \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{2} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (249-7)$$

$$\hat{t}_3 |n\rangle = \hat{t}_3 \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = -\frac{1}{2} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (250-7)$$

می‌توانیم (۲۴۹-۷) و (۲۵۰-۷) را به ترتیب به صورت‌های زیر بنویسیم:

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (251-7)$$

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (252-7)$$

در تشابه با تکانه‌ی زاویه‌ای، با نمایش ویژه‌حالت‌های مشترک \hat{t}^2 و \hat{t}_3 با $|t, t_3\rangle$ ، داریم:

$$\hat{t}^2 |t, t_3\rangle = t(t+1) |t, t_3\rangle, \quad \hat{t}_3 |t, t_3\rangle = t_3 |t, t_3\rangle \quad (253-7)$$

همچنین می‌توانیم عملگرهای ایزواسپین بالابرنده و پایین آورنده را معرفی نماییم:

$$\hat{t}_+ = \hat{t}_1 + i\hat{t}_2 = \frac{1}{2}(\tau_1 + i\tau_2) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (254-7)$$

$$\hat{t}_- = \hat{t}_1 - i\hat{t}_2 = \frac{1}{2}(\tau_1 - i\tau_2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (255-7)$$

ازاین رو

$$\hat{t}_\pm |t, t_3\rangle = \sqrt{t(t+1) - t_3(t_3 \pm 1)} |t, t_3 \pm 1\rangle \quad (256-7)$$

توجه کنید که \hat{t}_+ و \hat{t}_- عملگرهایی هستند که زمانی که روی یک حالت نوکلئون اثر می‌گذارند، به ترتیب حالت‌های نوترون را به حالت‌های پروتون و حالت‌های پروتون را به حالت‌های نوترون تبدیل می‌کنند:

$$\hat{t}_+ |n\rangle = |p\rangle, \quad \hat{t}_- |p\rangle = |n\rangle \quad (257-7)$$

همچنین می‌توانیم عملگر بار را به صورت زیر تعریف کنیم:

$$\hat{Q} = e \left(\hat{t}_3 + \frac{1}{\rho} \right) \quad (258-7)$$

که در آن e بار پروتون است با

$$\hat{Q}|p\rangle = e|p\rangle, \quad \hat{Q}|n\rangle = 0 \quad (259-7)$$

باید یادآوری کنیم که برهمکنش‌های قوی، ایزواسپین را پایسته نگه می‌دارند. به عنوان مثال، واکنشی مانند

$$d + d \longrightarrow \alpha + \pi^0 \quad (260-7)$$

ممنوع است زیرا ایزواسپین پایسته نیست چون ایزواسپین‌های d و α هر دو صفرند و ایزواسپین پیون برابر با یک است (یعنی $T(d) = T(\alpha) = 0$ ولی $T(\pi) = 1$ است) که برای $(d + d)$ به ایزواسپین صفر و برای $(\alpha + \pi^0)$ به ایزواسپین یک می‌انجامد. ممنوع بودن این واکنش به صورت تجربی تأیید شده است زیرا سطح مقطع آن بسیار کوچک است. به هر حال، واکنش‌هایی مانند

$$p + p \longrightarrow d + \pi^+, \quad p + n \longrightarrow d + \pi^0 \quad (261-7)$$

مجازند زیرا ایزواسپین را پایسته نگه می‌دارند.

۲-۶-۳-۷ جمع دو ایزواسپین

باید یادآوری کنیم که می‌توان ایزواسپین‌های نوکلئون‌های متفاوت را به همان روش جمع تکانه‌های زاویه‌ای با هم جمع کرد. برای هسته‌ای متشکل از چندین نوکلئون، ایزواسپین کل از جمع برداری ایزواسپین‌های تمام نوکلئون‌های منفرد به دست می‌آید: $\hat{T} = \sum_i^A \hat{t}_i$. به عنوان مثال، می‌توان ایزواسپین کل سیستمی از دو نوکلئون را با جفت کردن ایزواسپین‌های \hat{t}_1 و \hat{t}_2 آنها به دست آورد:

$$\hat{T} = \hat{t}_1 + \hat{t}_2 \quad (262-7)$$

با نمایش ویژه حالت‌های مشترک \hat{t}_1^2, \hat{t}_2^2 و \hat{T}^2 با $|T, N\rangle$ داریم:

$$\hat{T}^2 |T, N\rangle = T(T+1) |T, N\rangle, \quad \hat{T}_3 |T, N\rangle = N |T, N\rangle \quad (263-7)$$

به صورت مشابه، اگر ویژه حالت‌های مشترک $\hat{t}_1^2, \hat{t}_2^2, \hat{t}_1^3, \hat{t}_2^3$ را با $|t_1, t_2; n_1, n_2\rangle$ نمایش دهیم آنگاه داریم:

$$\hat{t}_1^2 |t_1, t_2; n_1, n_2\rangle = t_1(t_1+1) |t_1, t_2; n_1, n_2\rangle \quad (264-7)$$

$$\hat{t}_2^2 |t_1, t_2; n_1, n_2\rangle = t_2(t_2+1) |t_1, t_2; n_1, n_2\rangle \quad (265-7)$$

$$\hat{t}_{1z}|t_1, t_2; n_1, n_2\rangle = n_1|t_1, t_2; n_1, n_2\rangle \quad (۲۶۶-۷)$$

$$\hat{t}_{2z}|t_1, t_2; n_1, n_2\rangle = n_2|t_1, t_2; n_1, n_2\rangle \quad (۲۶۷-۷)$$

عناصرهای ماتریسی تبدیل یکانی که پایه‌های $\{|T, N\rangle\}$ و $\{|t_1, t_2; n_1, n_2\rangle\}$ را به هم مرتبط می‌کند:

$$|T, N\rangle = \sum_{n_1, n_2} \langle t_1, t_2; n_1, n_2 | T, N \rangle |t_1, t_2; n_1, n_2\rangle \quad (۲۶۸-۷)$$

از ضریب‌های $\langle t_1, t_2; n_1, n_2 | T, N \rangle$ به دست می‌آیند. می‌توان این ضریب‌ها را به همان روشی که ضریب‌های کلبش‌گوردن به دست می‌آیند، محاسبه نمود. مثال بعدی را ببینید.

مثال ۷-۴

حالت‌های مختلف متناظر با یک سیستم دو نوکلئونی را بیابید.

حل

فرض کنید که \hat{T} عملگر برداری ایزواسپین کل سیستم دو نوکلئونی باشد:

$$\hat{T} = \hat{t}_1 + \hat{t}_2 \quad (۲۶۹-۷)$$

این مثال مشابه با جمع دو تکانه‌ی زاویه‌ای با اسپین $\frac{1}{2}$ است. بنابراین مقادیرهای T عبارتند از 0 و 1 . حالت $T = 0$ متناظر با یک حالت تک‌تایی است:

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|p\rangle_1 |n\rangle_2 - |n\rangle_1 |p\rangle_2] \quad (۲۷۰-۷)$$

که در آن $|p\rangle_1$ به این معنی است که نوکلئون ۱ پروتون است و $|n\rangle_2$ به این معنی است که نوکلئون ۲ نوترون است و به همین ترتیب. این حالت (که یک حالت ایزواسپین بادمستاران است) یک سیستم $(p-n)$ مقید مانند حالت پایه‌ی دوتریوم ($T = 0$) را توصیف می‌کند.

حالت $T = 1$ متناظر با حالت‌های سه‌تایی $|1, N\rangle$ با $N = 1, 0, -1$ است:

$$|1, 1\rangle = |p\rangle_1 |p\rangle_2 \quad (۲۷۱-۷)$$

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|p\rangle_1 |n\rangle_2 + |n\rangle_1 |p\rangle_2] \quad (۲۷۲-۷)$$

$$|1, -1\rangle = |n\rangle_1 |n\rangle_2 \quad (۲۷۳-۷)$$

حالت $|1, 1\rangle$ متناظر با حالتی است که در آن هر دو نوکلئون پروتون‌اند ($p-p$) و $|1, -1\rangle$ متناظر با حالتی است که در آن هر دو نوکلئون، نوترون‌اند ($n-n$).

۴-۷ عملگرهای نرده‌ای، برداری و تانسوری

در این بخش این مطلب که چگونه عملگرها تحت چرخش تبدیل می‌شوند را مطالعه می‌کنیم. می‌توان عملگرهای متناظر با کمیت‌های فیزیکی مختلف را در نتیجه‌ی رفتارشان تحت چرخش‌ها، به‌صورت نرده، بردار و تانسور دسته‌بندی کرد.

عملگر \hat{A} که می‌تواند نرده، بردار یا یک تانسور باشد را در نظر بگیرید. تبدیل \hat{A} تحت یک چرخش زاویه‌ی بی‌نهایت کوچک $\delta\theta$ حول محور \mathbf{n} برابر است با^۱

$$\hat{A}' = \hat{R}_n^\dagger(\delta\theta)\hat{A}\hat{R}_n(\delta\theta) \quad (274-7)$$

که در آن می‌توان $\hat{R}_n(\delta\theta)$ را از (۲۰-۷) نتیجه گرفت:

$$\hat{R}_n(\delta\theta) = 1 - \frac{i}{\hbar}\delta\theta\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}} \quad (275-7)$$

با جاگذاری (۲۷۵-۷) در (۲۷۴-۷) و نگه داشتن جمله‌های مرتبه‌ی اول برحسب $\delta\theta$ ، به‌دست می‌آوریم:

$$\hat{A}' = \hat{A} - \frac{i}{\hbar}\delta\theta[\hat{A}, \mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}}] \quad (276-7)$$

در ادامه‌ی این بخش، بر روی کاربرد این رابطه برای عملگرهای نرده‌ای، برداری و تانسوری متمرکز می‌شویم.

۱-۴-۷ عملگرهای نرده‌ای

با توجه به این که عملگرهای نرده‌ای تحت چرخش ناوردا هستند (یعنی $\hat{A}' = \hat{A}$)، معادله‌ی (۲۷۶-۷) بیان می‌کند که این عملگرها با تکانه‌ی زاویه‌ای جابه‌جا می‌شوند:

$$[\hat{A}, \hat{J}_k] = 0 \quad (k = x, y, z) \quad (277-7)$$

این مطلب در مورد شبه‌نرده‌ای‌ها نیز درست است. یک شبه‌نرده‌ای به‌صورت حاصل ضرب بردار \mathbf{A} و یک شبه‌بردار یا بردار محوری $\mathbf{B} \times \mathbf{C}$ تعریف می‌شود: $\mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{C})$.

۲-۴-۷ عملگرهای برداری

از یک سو، عملگر برداری $\hat{\mathbf{A}}$ مطابق با (۲۷۶-۷) تبدیل می‌شود:

$$\hat{\mathbf{A}}' = \hat{\mathbf{A}} - \frac{i}{\hbar}\delta\theta[\hat{\mathbf{A}}, \mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}}] \quad (278-7)$$

(۸) مقدار چشمداشتی عملگر \hat{A} نسبت به حالت چرخیده‌ی $|\psi'\rangle = \hat{R}_n(\delta\theta)|\psi\rangle$ از

$$\langle\psi'|\hat{A}|\psi'\rangle = \langle\psi|\hat{R}_n^\dagger(\delta\theta)\hat{A}\hat{R}_n(\delta\theta)|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}'|\psi\rangle$$

از سوی دیگر، از نظریه‌ی کلاسیک چرخش، می‌دانیم هنگامی که بردار $\hat{\mathbf{A}}$ به اندازه‌ی زاویه‌ی $\delta\theta$ حول محور \mathbf{n} می‌چرخد، از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\hat{\mathbf{A}}' = \hat{\mathbf{A}} + \delta\theta \mathbf{n} \times \hat{\mathbf{A}} \quad (279-7)$$

با مقایسه‌ی (۲۷۸-۷) و (۲۷۹-۷) به دست می‌آوریم:

$$[\hat{\mathbf{A}}, \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}] = i\hbar \mathbf{n} \times \hat{\mathbf{A}} \quad (280-7)$$

مؤلفه‌ی j ام این معادله از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$[\hat{\mathbf{A}}, \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}]_j = i\hbar (\mathbf{n} \times \hat{\mathbf{A}})_j \quad (j = x, y, z) \quad (281-7)$$

که در حالت $j = x, y, z$ به رابطه‌های زیر می‌انجامد:

$$[\hat{A}_x, \hat{J}_x] = [\hat{A}_y, \hat{J}_y] = [\hat{A}_z, \hat{J}_z] = 0 \quad (282-7)$$

$$[\hat{A}_x, \hat{J}_y] = i\hbar \hat{A}_z, \quad [\hat{A}_y, \hat{J}_z] = i\hbar \hat{A}_x, \quad [\hat{A}_z, \hat{J}_x] = i\hbar \hat{A}_y \quad (283-7)$$

$$[\hat{A}_x, \hat{J}_z] = -i\hbar \hat{A}_y, \quad [\hat{A}_y, \hat{J}_x] = -i\hbar \hat{A}_z, \quad [\hat{A}_z, \hat{J}_y] = -i\hbar \hat{A}_x \quad (284-7)$$

برخی از کاربردهای جالب (۲۸۰-۷) متناظر با حالت‌هایی است که در آنها عملگر برداری $\hat{\mathbf{A}}$ عملگر تکانه‌ی زاویه‌ای، عملگر مکان یا عملگر تکانه‌ی خطی باشد. این سه حالت را جداگانه بررسی می‌کنیم. ابتدا با جاگذاری $\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{J}}$ در (۲۸۰-۷)، به رابطه‌های جابه‌جایی معمول تکانه‌ی زاویه‌ای می‌رسیم:

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar \hat{J}_z, \quad [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar \hat{J}_x, \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar \hat{J}_y \quad (285-7)$$

دوم این که در حالت یک ذره‌ی بدون اسپین (یعنی $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}}$) و هرگاه $\hat{\mathbf{A}}$ برابر با عملگر مکان ($\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{R}}$) باشد آنگاه (۲۸۰-۷) رابطه‌های زیر را نتیجه می‌دهد:

$$[\hat{x}, \hat{L}_x] = 0, \quad [\hat{x}, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{z}, \quad [\hat{x}, \hat{L}_z] = -i\hbar \hat{y} \quad (286-7)$$

$$[\hat{y}, \hat{L}_y] = 0, \quad [\hat{y}, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{x}, \quad [\hat{y}, \hat{L}_x] = -i\hbar \hat{z} \quad (287-7)$$

$$[\hat{z}, \hat{L}_z] = 0, \quad [\hat{z}, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{y}, \quad [\hat{z}, \hat{L}_y] = -i\hbar \hat{x} \quad (288-7)$$

سوم این که هرگاه $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}}$ و $\hat{\mathbf{A}}$ عملگر تکانه باشد ($\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{P}}$) آنگاه (۲۸۰-۷) به رابطه‌های زیر خواهد انجامید:

$$[\hat{P}_x, \hat{L}_x] = 0, \quad [\hat{P}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{P}_z, \quad [\hat{P}_x, \hat{L}_z] = -i\hbar \hat{P}_y \quad (289-7)$$

$$[\hat{P}_y, \hat{L}_y] = 0, \quad [\hat{P}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{P}_x, \quad [\hat{P}_y, \hat{L}_x] = -i\hbar\hat{P}_z \quad (290-7)$$

$$[\hat{P}_z, \hat{L}_z] = 0, \quad [\hat{P}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{P}_y, \quad [\hat{P}_z, \hat{L}_y] = -i\hbar\hat{P}_x \quad (291-7)$$

حال با معرفی عملگرهای

$$\hat{A}_{\pm} = \hat{A}_z \pm i\hat{A}_y \quad (292-7)$$

و با استفاده از رابطه‌های (۲۸۲-۷) تا (۲۸۴-۷) می‌توانیم نشان دهیم که

$$[\hat{J}_x, \hat{A}_{\pm}] = \mp\hbar\hat{A}_z, \quad [\hat{J}_y, \hat{A}_{\pm}] = -i\hbar\hat{A}_z, \quad [\hat{J}_z, \hat{A}_{\pm}] = \pm\hbar\hat{A}_{\pm} \quad (293-7)$$

می‌توان نشان داد که این رابطه‌ها به نوبه‌ی خود به رابطه‌های زیر می‌انجامند:

$$[\hat{J}_{\pm}, \hat{A}_{\pm}] = 0, \quad [\hat{J}_{\pm}, \hat{A}_{\mp}] = \pm 2\hbar\hat{A}_z \quad (294-7)$$

حال بیاید مؤلفه‌های کروی \hat{A}_0, \hat{A}_{-1} و \hat{A}_1 عملگر برداری \hat{A} را معرفی کنیم که به صورت زیر برحسب مختصات دکارتی \hat{A}_x, \hat{A}_y و \hat{A}_z تعریف می‌شوند:

$$\hat{A}_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{A}_x \pm i\hat{A}_y), \quad \hat{A}_0 = \hat{A}_z \quad (295-7)$$

در حالت خاصی که در آن \hat{A} برابر بردار مکان \hat{R} است، می‌توانیم مؤلفه‌های \hat{R}_q یعنی (که در آن $q = -1, 0, 1$ است)

$$\hat{R}_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} \pm i\hat{y}) \quad \hat{R}_0 = \hat{z} \quad (296-7)$$

را به صورت زیر برحسب مختصات کروی بیان کنیم (به یاد بیاورید که $\hat{R}_1 = \hat{x} = r \sin \theta \cos \phi$ و $\hat{R}_2 = \hat{y} = r \sin \theta \sin \phi$ و $\hat{R}_3 = \hat{z} = r \cos \theta$ است):

$$\hat{R}_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} r e^{\pm i\phi} \sin \theta, \quad \hat{R}_0 = r \cos \theta \quad (297-7)$$

با استفاده از رابطه‌های (۲۸۲-۷) تا (۲۸۴-۷) و (۲۹۲-۷) تا (۲۹۴-۷) می‌توانیم تحقیق کنیم که

$$[\hat{J}_z, \hat{A}_q] = \hbar q \hat{A}_q \quad (q = -1, 0, 1) \quad (298-7)$$

$$[\hat{J}_{\pm}, \hat{A}_q] = \hbar \sqrt{2 - q(q \pm 1)} \hat{A}_{q \pm 1} \quad (q = -1, 0, 1) \quad (299-7)$$

۷-۴-۳ عملگرهای تانسوری: تانسورهای تحویل‌پذیر و تانسورهای تحویل‌ناپذیر

به صورت کلی، یک تانسور مرتبه‌ی k دارای 3^k مؤلفه است که در آن عدد ۳ بعد فضا را نمایش می‌دهد. به عنوان مثال، تانسوری مانند

$$\hat{T}_{ij} = A_i B_j \quad (i, j = x, y, z) \quad (300-7)$$

که برابر با حاصل ضرب مؤلفه‌های دو بردار \hat{A} و \hat{B} است، یک تانسور مرتبه‌ی دوم است. این تانسور دارای ۳ مؤلفه است.

۷-۴-۳-۱ تانسورهای تحویل‌پذیر

می‌توان تانسور دکارتی \hat{T}_{ij} را به سه قسمت تجزیه کرد:

$$\hat{T}_{ij} = \hat{T}_{ij}^{(0)} + \hat{T}_{ij}^{(1)} + \hat{T}_{ij}^{(2)} \quad (301-7)$$

با

$$\hat{T}_{ij}^{(0)} = \frac{1}{3} \delta_{ij} \sum_{i=1}^3 \hat{T}_{ii} \quad (302-7)$$

$$\hat{T}_{ij}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{T}_{ij} - \hat{T}_{ji}) \quad (j \neq i) \quad (303-7)$$

$$\hat{T}_{ij}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{T}_{ij} + \hat{T}_{ji}) - \hat{T}_{ij}^{(0)} \quad (304-7)$$

توجه داشته باشید که هرگاه معادله‌های (۳۰۲-۷)، (۳۰۳-۷) و (۳۰۴-۷) را با هم جمع کنیم آنگاه به رابطه‌ی همانی می‌رسیم: $\hat{T}_{ij} = \hat{T}_{ij}$.

جمله‌ی $\hat{T}_{ij}^{(0)}$ تنها یک مؤلفه دارد و تحت چرخش‌ها مانند یک نرده تبدیل می‌شود. جمله‌ی دوم $\hat{T}_{ij}^{(1)}$ یک تانسور پادمتقارن مرتبه‌ی ۱ است که سه مؤلفه‌ی مستقل دارد و مانند یک بردار تبدیل می‌شود. جمله‌ی سوم $\hat{T}_{ij}^{(2)}$ یک تانسور متقارن مرتبه‌ی دوم با رد صفر است و از این رو پنج مؤلفه‌ی مستقل دارد. دیگر نمی‌توان $\hat{T}_{ij}^{(2)}$ را به تانسورهای مرتبه‌ی پایین‌تر کاهش داد. این پنج مؤلفه یک تانسور تحویل‌ناپذیر مرتبه‌ی دوم را تعریف می‌کنند. به صورت کلی، می‌توان هر تانسور مرتبه‌ی k را به تانسورهای مرتبه‌ی پایین‌تر تجزیه کرده که بر حسب ترکیب‌های خطی 3^k مؤلفه‌ی آن بیان می‌شوند. به هر حال، همواره $(2k+1)$ مؤلفه باقی می‌مانند که مانند یک تانسور مرتبه‌ی k نمی‌توان آن را بیشتر کاهش داد، رفتار می‌کنند. این $(2k+1)$ مؤلفه متقارن‌اند و نسبت به هر یک از دو شاخص بدون رد هستند. این مؤلفه‌ها، مؤلفه‌های یک تانسور تحویل‌ناپذیر مرتبه‌ی k را تشکیل می‌دهند. معادله‌های (۳۰۱-۷) تا (۳۰۴-۷)، چگونگی تجزیه‌ی عملگر تانسوری دکارتی \hat{T}_{ij} را به مجموع عملگرهای تانسوری کروی تحویل‌ناپذیر $\hat{T}_{ij}^{(0)}$ ، $\hat{T}_{ij}^{(1)}$ و $\hat{T}_{ij}^{(2)}$ نشان می‌دهند. تانسورهای دکارتی چندان

برای مطالعه‌ی تبدیلات تحت چرخش مناسب نیستند زیرا هرگاه مرتبه‌ی آنها از ۱ تجاوز کند، تحویل پذیرند. در مسأله‌هایی که تقارن کروی را نشان می‌دهند (مانند مسأله‌هایی که در فیزیک زیراتمی با آنها روبرو می‌شویم)، تانسورهای کروی ابزارهای ساده‌کننده‌ی بسیار مفیدی هستند. بنابراین در نظر گرفتن عملگرهای تانسوری کروی تحویل‌ناپذیر جالب به نظر می‌رسد.

۲-۳-۴-۷ تانسورهای کروی تحویل‌ناپذیر

حال بیابید بر روی نمایش عملگرهای تانسوری تحویل‌ناپذیر در مختصات کروی متمرکز شویم. یک عملگر تانسوری کروی تحویل‌ناپذیر مرتبه‌ی k (k یک عدد صحیح است) مجموعه‌ای از $(2k+1)$ عملگر $T_q^{(k)}$ با $q = -k, \dots, k$ است که تحت چرخش محورها به همان روش تکانه‌ی زاویه‌ای تبدیل می‌شوند. به عنوان مثال، حالت $k=1$ متناظر با یک بردار است. کمیت‌های $T_q^{(1)}$ به صورت زیر به مؤلفه‌های بردار \hat{A} مربوطند ((۲۹۵-۷) را ببینید):

$$\hat{T}_{\pm 1}^{(1)} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{A}_x \pm \hat{A}_y), \quad \hat{T}_0^{(1)} = \hat{A}_z \quad (305-7)$$

در ادامه قصد داریم به مطالعه‌ی برخی از ویژگی‌های عملگرهای تانسوری کروی بپردازیم و سپس تعیین کنیم که چگونه تحت چرخش تبدیل می‌شوند. ابتدا بیابید نگاهی به رابطه‌های جابه‌جایی مختلف تانسورهای کروی با عملگر تکانه‌ی زاویه‌ای بیندازیم. چون یک عملگر برداری یک تانسور مرتبه‌ی ۱ است، می‌توانیم معادله‌های (۲۹۸-۷) تا (۲۹۹-۷) را به ترتیب به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$[\hat{J}_z, \hat{T}_q^{(1)}] = \hbar q \hat{T}_q^{(1)} \quad (q = -1, 0, 1) \quad (306-7)$$

$$[\hat{J}_{\pm}, \hat{T}_q^{(1)}] = \hbar \sqrt{1(1+1) - q(q \pm 1)} \hat{T}_{q \pm 1}^{(1)} \quad (307-7)$$

که در آنها از نمادگذاری $\hat{A}_q = \hat{T}_q^{(1)}$ استفاده کرده‌ایم. به آسانی می‌توانیم این دو رابطه را به هر تانسور کروی مرتبه‌ی k ($\hat{T}_q^{(k)}$) تعمیم دهیم و جابه‌جاگرهای زیر را به دست آوریم:

$$[\hat{J}_z, \hat{T}_q^{(k)}] = \hbar q \hat{T}_q^{(k)} \quad (q = -k, -k+1, \dots, k-1, k) \quad (308-7)$$

$$[\hat{J}_{\pm}, \hat{T}_q^{(k)}] = \hbar \sqrt{k(k+1) - q(q \pm 1)} \hat{T}_{q \pm 1}^{(k)} \quad (309-7)$$

با استفاده از رابطه‌های

$$\langle k, q' | \hat{J}_z | k, q \rangle = \hbar q \langle k, q' | k, q \rangle = \hbar q \delta_{q', q} \quad (310-7)$$

$$\langle k, q' | \hat{J}_{\pm} | k, q \rangle = \hbar \sqrt{k(k+1) - q(q \pm 1)} \delta_{q', q \pm 1} \quad (311-7)$$

همراه با $(308-7)$ و $(309-7)$ می‌توانیم بنویسیم:

$$\sum_{q'=-k}^k \hat{T}_{q'}^{(k)} \langle k, q' | \hat{J}_z | k, q \rangle = \hbar q \hat{T}_q^{(k)} = [\hat{J}_z, \hat{T}_q^{(k)}] \quad (312-7)$$

$$\sum_{q'=-k}^k \hat{T}_{q'}^{(k)} \langle k, q' | \hat{J}_{\pm} | k, q \rangle = \hbar \sqrt{k(k+1) - q(q \pm 1)} \hat{T}_{q \pm 1}^{(k)} = [\hat{J}_{\pm}, \hat{T}_q^{(k)}] \quad (313-7)$$

می‌توان دو رابطه‌ی قبل را به صورت زیر ترکیب کرد:

$$[\hat{\mathbf{J}}, \hat{T}_q^{(k)}] = \sum_{q'=-k}^k \hat{T}_{q'}^{(k)} \langle k, q' | \hat{\mathbf{J}} | k, q \rangle \quad (314-7)$$

یا

$$[\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}, \hat{T}_q^{(k)}] = \sum_{q'=-k}^k \hat{T}_{q'}^{(k)} \langle k, q' | \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}} | k, q \rangle \quad (315-7)$$

پس از تعیین رابطه‌های جابه‌جایی عملگرهای تانسوری با تکانه‌ی زاویه‌ای $(315-7)$ اکنون آماده‌ایم تا به مطالعه‌ی تبدیل عملگرهای تانسوری کروی تحویل‌ناپذیر، تحت چرخش بپردازیم. با استفاده از $(276-7)$ می‌توانیم رابطه‌ی تبدیل تانسور کروی $T_q^{(k)}$ را تحت یک چرخش بی‌نهایت کوچک به صورت زیر بنویسیم:

$$\hat{R}_n^\dagger(\delta\theta) \hat{T}_q^{(k)} \hat{R}_n(\delta\theta) = T_q^{(k)} + \frac{i}{\hbar} \delta\theta [\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}, \hat{T}_q^{(k)}] \quad (316-7)$$

با وارد کردن $(315-7)$ در $(316-7)$ ، به دست می‌آوریم:

$$\hat{R}_n^\dagger(\delta\theta) \hat{T}_q^{(k)} \hat{R}_n(\delta\theta) = \sum_{q'=-k}^k \hat{T}_{q'}^{(k)} \langle k, q' | 1 + \frac{i}{\hbar} \delta\theta \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}} | k, q \rangle = \sum_{q'} \hat{T}_{q'}^{(k)} \langle k, q' | e^{i\delta\theta \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}} / \hbar} | k, q \rangle \quad (317-7)$$

این نتیجه برای چرخش‌های متناهی نیز برقرار است:

$$\begin{aligned} \hat{R}^\dagger(\alpha, \beta, \gamma) \hat{T}_q^{(k)} \hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) &= \sum_{q'=-k}^k \hat{T}_{q'}^{(k)} \langle k, q' | \hat{R}^\dagger(\alpha, \beta, \gamma) | k, q \rangle \\ &= \sum_{q'} \hat{T}_{q'}^{(k)} D_{q'q}^{(k)}(\alpha, \beta, \gamma) \end{aligned} \quad (318-7)$$

۴-۴-۷ قضیه‌ی ویگنر-اکارت برای عملگرهای تانسوری کروی

با قرار دادن عنصرهای ماتریسی $(308-7)$ بین ویژه‌حالت‌های $\hat{\mathbf{J}}^2$ و \hat{J}_z به دست می‌آوریم:

$$\langle j', m' | [\hat{J}_z, \hat{T}_q^{(k)}] | j, m \rangle = 0 \quad (319-7)$$

یا

$$(m' - m - q) \langle j', m' | \hat{T}_q^{(k)} | j, m \rangle = 0 \quad (۳۲۰-۷)$$

این معادله بیان می‌کند که $\langle j', m' | \hat{T}_q^{(k)} | j, m \rangle$ صفر می‌شود مگر آن که $m' = m + q$ باشد. این ویژگی پیشنهاد می‌کند که کمیت $\langle j', m' | \hat{T}_q^{(k)} | j, m \rangle$ باید متناسب با ضریب کلبش-گوردن $\langle j', m' | j, k; m, q \rangle$ باشد. از این رو (۳۲۰-۷) به معادله‌ی زیر می‌انجامد:

$$(m' - m - q) \langle j', m' | j, k; m, q \rangle = 0 \quad (۳۲۱-۷)$$

حال با قرار دادن عنصرهای ماتریسی (۳۰۹-۷) بین $|j, m\rangle$ و $\langle j', m'|$ ، به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} \sqrt{(j' \pm m')(j' \mp m' + 1)} \langle j', m' \mp 1 | \hat{T}_q^{(k)} | j, m \rangle &= \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \\ \langle j', m' | \hat{T}_q^{(k)} | j, m \pm 1 \rangle + \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} \langle j', m' | \hat{T}_{q \pm 1}^{(k)} | j, m \rangle & \quad (۳۲۲-۷) \end{aligned}$$

این معادله دارای ساختاری است که با رابطه‌ی بازگشتی (۱۵۰-۷) یکسان است. به عنوان مثال، با جاگذاری $j = j', m = m', j_1 = j, m_1 = m, j_2 = k, m_2 = q$ در (۱۵۰-۷) به نتیجه‌ی زیر می‌رسیم:

$$\begin{aligned} \sqrt{(j' \pm m')(j' \mp m' + 1)} \langle j', m' \mp 1 | j, k; m, q \rangle &= \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \\ \langle j', m' | j, k; m \pm 1, q \rangle + \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} \langle j', m' | j, k; m, q \pm 1 \rangle & \quad (۳۲۳-۷) \end{aligned}$$

مقایسه‌ی (۳۲۰-۷) با (۳۲۱-۷) و (۳۲۲-۷) با (۳۲۳-۷) پیشنهاد می‌کند که وابستگی $\langle j', m' | \hat{T}_q^{(k)} | j, m \rangle$ به m, m', q به واسطه‌ی ضریب کلبش-گوردن است. به هر حال، هنوز وابستگی $\langle j', m' | \hat{T}_q^{(k)} | j, m \rangle$ به j, j', k باید تعیین شود.

اکنون می‌توانیم قضیه‌ی ویگنر-اکارت^۹ را بیان کنیم: عنصرهای ماتریسی عملگرهای تانسوری گروه $\hat{T}_q^{(k)}$ نسبت به ویژه‌حالت‌های تکانه‌ی زاویه‌ای $|j, m\rangle$ از رابطه‌ی زیر به دست می‌آیند:

$$\langle j', m' | \hat{T}_q^{(k)} | j, m \rangle = \langle j, k; m, q | j', m' \rangle \langle j' || \hat{T}^{(k)} || j \rangle \quad (۳۲۴-۷)$$

عامل $\langle j' || \hat{T}^{(k)} || j \rangle$ که تنها به j, j', k بستگی دارد، عنصر ماتریسی تحویل‌یافته‌ی تانسور $\hat{T}_q^{(k)}$ نامیده می‌شود (توجه کنید که نمادگذاری دو خط موازی برای تمایز دادن عنصرهای ماتریسی تحویل‌یافته‌ی $\langle j' || \hat{T}^{(k)} || j \rangle$ از عنصرهای ماتریسی $\langle j', m' | \hat{T}_q^{(k)} | j, m \rangle$ است). این قضیه بیان می‌کند که عنصرهای ماتریسی $\langle j', m' | \hat{T}_q^{(k)} | j, m \rangle$ به صورت حاصل ضرب دو جمله نوشته می‌شوند: یک ضریب کلبش-گوردن $\langle j, k; m, q | j', m' \rangle$ که تنها به هندسه‌ی سیستم (یعنی به جهت‌گیری سیستم نسبت به محور z) بستگی

دارد ولی به دینامیک آن (یعنی j' ، z و k) بستگی ندارد و یک عامل دینامیکی (عنصر ماتریسی تحویل‌یافته) که به جهت‌گیری سیستم در فضا (m و q ، m') بستگی ندارد. عددهای کوانتومی m ، m' و q که تصویرهای عملگرهای زاویه‌ای \hat{J}' و \hat{J} و \hat{K} را روی محور z مشخص می‌کنند، جهت‌گیری سیستم را در فضا به دست می‌دهند زیرا جهت‌گیری سیستم نسبت به محور z را مشخص می‌کنند. در رابطه با j' ، z و k باید گفت که به دینامیک سیستم (و نه به جهت‌گیری آن در فضا) مربوطند.

قضیه‌ی ویگنر-اکارت برای یک عملگر نرده‌ای

ساده‌ترین کاربرد قضیه‌ی ویگنر-اکارت هنگامی است که با عملگر نرده‌ای \hat{B} سروکار داریم. همانطور که در بالا مشاهده شد، یک نرده یک تانسور مرتبه‌ی $k = 0$ است از این رو $q = 0$ است. بنابراین معادله‌ی (۳۲۴-۷) نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\langle j', m' | \hat{B} | j, m \rangle = \langle j, 0; m, 0 | j', m' \rangle \langle j' | \hat{B} | j \rangle = \langle j' | \hat{B} | j \rangle \delta_{j',j} \delta_{m',m} \quad (325-7)$$

$$\text{زیرا } \langle j, 0; m, 0 | j', m' \rangle = \delta_{j',j} \delta_{m',m}$$

قضیه‌ی ویگنر-اکارت برای یک عملگر برداری

همانطور که در (۳۰۵-۷) نشان داده شد، یک بردار یک تانسور مرتبه‌ی ۱ است: $T^{(1)} = A^{(1)} = \hat{A}$ با $A_0^{(1)} = A_x = A_y$ و $A_{\pm 1}^{(1)} = A_{\pm 1} = \mp (\hat{A}_x \pm i \hat{A}_y) / \sqrt{2}$ به کار بردن (۳۲۴-۷) برای مؤلفه‌ی q ی عملگر برداری \hat{A} به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\langle j', m' | \hat{A}_q | j, m \rangle = \langle j, 1; m, q | j', m' \rangle \langle j' | \hat{A} | j \rangle \quad (326-7)$$

به‌عنوان مثال، در مورد تکانه‌ی زاویه‌ای \hat{J} داریم:

$$\langle j', m' | \hat{J}_q | j, m \rangle = \langle j, 1; m, q | j', m' \rangle \langle j' | \hat{J} | j \rangle \quad (327-7)$$

با اعمال این رابطه بر مؤلفه‌ی \hat{J}_0 :

$$\langle j', m' | \hat{J}_0 | j, m \rangle = \langle j, 1; m, 0 | j', m' \rangle \langle j' | \hat{J} | j \rangle \quad (328-7)$$

با توجه به این که $\langle j', m' | \hat{J}_0 | j, m \rangle = \hbar m \delta_{j',j} \delta_{m',m}$ و ضریب $\langle j, 1; m, 0 | j', m' \rangle$ برابر است با $\langle j, 1; m, 0 | j, m \rangle = m / \sqrt{j(j+1)}$ داریم:

$$\hbar m \delta_{j',j} \delta_{m',m} = \frac{m}{\sqrt{j(j+1)}} \langle j' | \hat{J} | j \rangle \implies \langle j' | \hat{J} | j \rangle = \hbar \sqrt{j(j+1)} \delta_{j',j} \quad (329-7)$$

به دلیل قاعده‌های گزینشی که توسط ضریب‌های کلبش-گوردن تحمیل می‌شوند، از (۳۲۶-۷) می‌بینیم که یک ذره با اسپین صفر نمی‌تواند یک گشتاور دوقطبی داشته باشد. چون $\langle \circ, \uparrow; \circ, q | \circ, \circ \rangle = \circ$ است، داریم: $\langle \circ, \uparrow; \circ, q | \circ, \circ \rangle \langle \circ | \hat{\mathbf{L}} | \circ \rangle = \circ$ و گشتاور دوقطبی برابر است با $\mu = -q\hat{\mathbf{L}}/(2mc)$. به صورت مشابه، یک ذره با اسپین $\frac{1}{2}$ نمی‌تواند یک گشتاور چهار قطبی داشته باشد زیرا با توجه به این که $\langle \frac{1}{2}, \uparrow; m, q | \frac{1}{2}, m' \rangle = \circ$ است، داریم: $\langle \frac{1}{2}, m' | \hat{T}_q^{(2)} | \frac{1}{2}, m \rangle = \circ$.

قضیه‌ی ویگنر-اکارت برای ضرب نرده‌ای $\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{A}}$

از یک سو، با توجه به این که داریم $\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{A}} = \hat{J}_0 \hat{A}_0 - \hat{J}_{+1} \hat{A}_{-1} - \hat{J}_{-1} \hat{A}_{+1}$ و $\hat{J}_0 |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle$ و $\hat{J}_{\pm 1} |j, m\rangle = (\hbar/2) \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle$ در نتیجه:

$$\begin{aligned} \langle j, m | \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{A}} | j, m \rangle &= \hbar m \langle j, m | \hat{A}_0 | j, m \rangle - \frac{\hbar}{2} \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \langle j, m+1 | \hat{A}_{+1} | j, m \rangle \\ &+ \frac{\hbar}{2} \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \langle j, m-1 | \hat{A}_{+1} | j, m \rangle \end{aligned} \quad (330-7)$$

از سوی دیگر، از قضیه‌ی ویگنر-اکارت (۳۲۴-۷) داریم:

$$\begin{aligned} \langle j, m | \hat{A}_0 | j, m \rangle &= \langle j, \uparrow; m, \circ | j, m \rangle \langle j | \hat{\mathbf{A}} | j \rangle \\ \langle j, m+1 | \hat{A}_{+1} | j, m \rangle &= \langle j, \uparrow; m, \uparrow | j, m+1 \rangle \langle j | \hat{\mathbf{A}} | j \rangle \\ \langle j, m-1 | \hat{A}_{-1} | j, m \rangle &= \langle j, \uparrow; m, -\uparrow | j, m-1 \rangle \langle j | \hat{\mathbf{A}} | j \rangle \end{aligned}$$

با جاگذاری این جمله‌ها در (۳۳۰-۷)، به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} \langle j, m | \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{A}} | j, m \rangle &= \left[\hbar m \langle j, \uparrow; m, \circ | j, m \rangle - \frac{\hbar}{2} \langle j, \uparrow; m, \uparrow | j, m+1 \rangle \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \right. \\ &\left. + \frac{\hbar}{2} \langle j, \uparrow; m, -\uparrow | j, m-1 \rangle \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \right] \langle j | \hat{\mathbf{A}} | j \rangle \end{aligned} \quad (331-7)$$

هنگامی که $\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{J}}$ باشد، این رابطه به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\begin{aligned} \langle j, m | \hat{\mathbf{J}}^2 | j, m \rangle &= \left[\hbar m \langle j, \uparrow; m, \circ | j, m \rangle - \frac{\hbar}{2} \langle j, \uparrow; m, \uparrow | j, m+1 \rangle \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \right. \\ &\left. + \frac{\hbar}{2} \langle j, \uparrow; m, -\uparrow | j, m-1 \rangle \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \right] \langle j | \hat{\mathbf{J}}^2 | j \rangle \end{aligned} \quad (332-7)$$

اکنون آماده‌ایم تا رابطه‌ای بین عنصرهای ماتریسی عملگر برداری $\hat{\mathbf{A}}$ و عنصرهای ماتریسی عملگر نرده‌ای $\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{A}}$ به دست آوریم. این رابطه در محاسبه‌ی تصحیح‌های انرژی هیدروژن ناشی از اثر زیمان مفید است (فصل

۹ را ببینید). بدین منظور، باید دو نسبت را محاسبه کنیم: نسبت نخست بین $(۳۲۶-۷)$ و $(۳۲۷-۷)$ است:

$$\frac{\langle j, m' | \hat{A}_q | j, m \rangle}{\langle j, m' | \hat{J}_q | j, m \rangle} = \frac{\langle j | \hat{\mathbf{A}} | j \rangle}{\langle j | \hat{\mathbf{J}} | j \rangle} \quad (۳۳۳-۷)$$

و نسبت دوم بین $(۳۳۱-۷)$ و $(۳۳۲-۷)$:

$$\frac{\langle j, m | \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{A}} | j, m \rangle}{\langle j, m | \hat{\mathbf{J}}^2 | j, m \rangle} = \frac{\langle j | \hat{\mathbf{A}} | j \rangle}{\langle j | \hat{\mathbf{J}} | j \rangle} \implies \frac{\langle j, m | \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{A}} | j, m \rangle}{\hbar^2 j(j+1)^2} = \frac{\langle j | \hat{\mathbf{A}} | j \rangle}{\langle j | \hat{\mathbf{J}} | j \rangle} \quad (۳۳۴-۷)$$

زیرا $\langle j, m | \hat{\mathbf{J}}^2 | j, m \rangle = \hbar^2 j(j+1)$. با مساوی قرار دادن $(۳۳۳-۷)$ و $(۳۳۴-۷)$ به دست می‌آوریم:

$$\langle j, m' | \hat{A}_q | j, m \rangle = \frac{\langle j, m | \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{A}} | j, m \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle j, m' | \hat{J}_q | j, m \rangle \quad (۳۳۵-۷)$$

یک کاربرد مهم این رابطه به حالتی مربوط می‌شود که در آن عملگر برداری $\hat{\mathbf{A}}$ تکانه‌ی زاویه‌ای اسپینی $\hat{\mathbf{S}}$ است. با توجه به این که

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{S}} &= (\hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}) \cdot \hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} + \hat{\mathbf{S}}^2 = \frac{(\hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}})^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2}{2} + \hat{\mathbf{S}}^2 \\ &= \frac{\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2}{2} + \hat{\mathbf{S}}^2 = \frac{\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 + \hat{\mathbf{S}}^2}{2} \end{aligned} \quad (۳۳۶-۷)$$

و نیز $|j, m\rangle$ یک ویژه‌حالت مشترک $\hat{\mathbf{J}}^2$ ، $\hat{\mathbf{L}}^2$ و $\hat{\mathbf{S}}^2$ و \hat{J}_z با به ترتیب ویژه‌مقدارهای $\hbar^2 j(j+1)$ ، $\hbar^2 l(l+1)$ و $\hbar^2 s(s+1)$ است محاسبه‌ی عنصر ماتریسی \hat{S}_z از $(۳۳۵-۷)$ ساده می‌شود:

$$\begin{aligned} \langle j, m | \hat{S}_z | j, m \rangle &= \frac{\langle j, m | \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{S}} | j, m \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle j, m | \hat{J}_z | j, m \rangle \\ &= \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \hbar m \end{aligned} \quad (۳۳۷-۷)$$

۵-۷ مسأله‌های حل شده

مسأله‌ی ۱-۷

(الف) نشان دهید که چگونه \hat{J}_y و \hat{J}_x تحت یک چرخش (متناهی) به اندازه‌ی زاویه‌ی α حول محور z ، تبدیل می‌شوند. با استفاده از این نتیجه‌ها، تعیین کنید که چگونه عملگر تکانه‌ی زاویه‌ای $\hat{\mathbf{J}}$ تحت چرخش تبدیل می‌شود.

(ب) نشان دهید که چگونه عملگر برداری $\hat{\mathbf{A}}$ تحت یک چرخش به اندازه‌ی زاویه‌ی α حول محور y ، تبدیل می‌شود.

(پ) نشان دهید که $e^{i\pi\hat{J}_z/\hbar} e^{i\alpha\hat{J}_y/\hbar} e^{-i\pi\hat{J}_z/\hbar} = e^{-i\alpha\hat{J}_y/\hbar}$

حل

(الف) عملگر متناظر با چرخش به اندازه‌ی زاویه‌ی α حول محور z با رابطه‌ی $\hat{R}_z(\alpha) = e^{-i\alpha\hat{J}_z/\hbar}$ مشخص می‌شود. تحت این چرخش، عملگر \hat{B} همانند $\hat{B}' = \hat{R}_z^\dagger \hat{B} \hat{R}_z = e^{i\alpha\hat{J}_z/\hbar} \hat{B} e^{-i\alpha\hat{J}_z/\hbar}$ تبدیل می‌شود. با استفاده از رابطه‌ی

$$e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{1}{3!} [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots \quad (۳۳۸-۷)$$

همراه با رابطه‌های جابه‌جایی $[\hat{J}_z, \hat{J}_y] = -i\hbar\hat{J}_x$ و $[\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar\hat{J}_y$ ، داریم:

$$\begin{aligned} e^{i\alpha\hat{J}_z/\hbar} \hat{J}_x e^{-i\alpha\hat{J}_z/\hbar} &= \hat{J}_x + \frac{i\alpha}{\hbar} [\hat{J}_z, \hat{J}_x] - \frac{\alpha^2}{2!\hbar^2} [\hat{J}_z, [\hat{J}_z, \hat{J}_x]] \\ &\quad - \frac{i\alpha^3}{3!\hbar^3} [\hat{J}_z, [\hat{J}_z, [\hat{J}_z, \hat{J}_x]]] + \dots \\ &= \hat{J}_x - \alpha\hat{J}_y - \frac{\alpha^2}{2!}\hat{J}_x + \frac{\alpha^3}{3!}\hat{J}_y + \frac{\alpha^4}{4!}\hat{J}_x - \frac{\alpha^5}{5!}\hat{J}_y + \dots \\ &= \hat{J}_x \left(1 - \frac{\alpha^2}{2!} + \frac{\alpha^4}{4!} + \dots \right) - \hat{J}_y \left(\alpha - \frac{\alpha^3}{3!} + \frac{\alpha^5}{5!} - \dots \right) \\ &= \hat{J}_x \cos \alpha - \hat{J}_y \sin \alpha \end{aligned} \quad (۳۳۹-۷)$$

به صورت مشابه، می‌توانیم نشان دهیم که

$$e^{i\alpha\hat{J}_z/\hbar} \hat{J}_y e^{-i\alpha\hat{J}_z/\hbar} = \hat{J}_y \cos \alpha + \hat{J}_x \sin \alpha \quad (۳۴۰-۷)$$

چون \hat{J}_z تحت یک چرخش دلخواه حول محور z ناورد است ($e^{i\alpha\hat{J}_z/\hbar} \hat{J}_z e^{-i\alpha\hat{J}_z/\hbar} = \hat{J}_z$)، می‌توانیم معادله‌های (۳۳۹-۷) و (۳۴۰-۷) را به صورت یک رابطه‌ی ماتریسی فشرده کنیم:

$$e^{i\alpha\hat{J}_z/\hbar} \hat{\mathbf{J}} e^{-i\alpha\hat{J}_z/\hbar} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{J}_x \\ \hat{J}_y \\ \hat{J}_z \end{pmatrix} \quad (۳۴۱-۷)$$

(ب) با استفاده از رابطه‌های جابه‌جایی $[\hat{J}_y, \hat{A}_x] = -i\hbar\hat{A}_z$ و $[\hat{J}_y, \hat{A}_z] = i\hbar\hat{A}_x$ (۲۸۲-۷) تا (۲۸۴-۷) همراه با (۳۳۸-۷) را ببینید، داریم:

$$\begin{aligned} e^{i\alpha\hat{J}_y/\hbar} \hat{A}_x e^{-i\alpha\hat{J}_y/\hbar} &= \hat{A}_x + \frac{i\alpha}{\hbar} [\hat{J}_y, \hat{A}_x] - \frac{\alpha^2}{2!\hbar^2} [\hat{J}_y, [\hat{J}_y, \hat{A}_x]] \\ &\quad - \frac{i\alpha^3}{3!\hbar^3} [\hat{J}_y, [\hat{J}_y, [\hat{J}_y, \hat{A}_x]]] + \dots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \hat{A}_x + \alpha \hat{A}_z - \frac{\alpha^2}{2!} \hat{A}_x - \frac{\alpha^3}{3!} \hat{A}_z + \frac{\alpha^4}{4!} \hat{A}_x + \frac{\alpha^5}{5!} \hat{A}_z + \dots \\
 &= \hat{A}_x \left(1 - \frac{\alpha^2}{2!} + \frac{\alpha^4}{4!} + \dots \right) + \hat{A}_z \left(\alpha - \frac{\alpha^3}{3!} + \frac{\alpha^5}{5!} + \dots \right) \\
 &= \hat{A}_x \cos \alpha + \hat{A}_z \sin \alpha \quad (۳۴۲-۷)
 \end{aligned}$$

به صورت مشابه، می‌توانیم نشان دهیم که

$$\hat{A}'_z = e^{i\alpha \hat{J}_y / \hbar} \hat{A}_z e^{-i\alpha \hat{J}_y / \hbar} = -\hat{A}_x \sin \alpha + \hat{A}_z \cos \alpha \quad (۳۴۳-۷)$$

همچنین چون \hat{A}_y تحت یک چرخش دلخواه حول محور y ناوردا است، می‌توانیم معادله‌های (۳۴۲-۷) و (۳۴۳-۷) را برای یافتن عملگر برداری $\hat{\mathbf{A}}'$ حاصل از چرخش $\hat{\mathbf{A}}$ به اندازه‌ی زاویه‌ی α حول محور y ، ترکیب کنیم:

$$\hat{\mathbf{A}}' = e^{i\alpha \hat{J}_y / \hbar} \hat{\mathbf{A}} e^{-i\alpha \hat{J}_y / \hbar} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & 0 & \sin \alpha \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \alpha & 0 & \cos \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{A}_x \\ \hat{A}_y \\ \hat{A}_z \end{pmatrix} \quad (۳۴۴-۷)$$

(پ) با بسط $e^{i\alpha \hat{J}_y / \hbar}$ و سپس استفاده از (۳۴۰-۷)، به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned}
 e^{i\pi \hat{J}_z / \hbar} e^{i\alpha \hat{J}_y / \hbar} e^{-i\pi \hat{J}_z / \hbar} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\alpha/\hbar)^n}{n!} e^{i\pi \hat{J}_z / \hbar} (\hat{J}_y)^n e^{-i\pi \hat{J}_z / \hbar} \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\alpha/\hbar)^n}{n!} (\hat{J}_y \cos \pi + \hat{J}_x \sin \pi)^n \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\alpha/\hbar)^n}{n!} (\hat{J}_y)^n \\
 &= e^{-i\alpha \hat{J}_y / \hbar} \quad (۳۴۵-۷)
 \end{aligned}$$

مسئله‌ی ۲-۷

از ماتریس‌های پائولی $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ ، $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ و $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ استفاده کنید و

نشان دهید:

(الف) $e^{-i\alpha \sigma_x} = I \cos \alpha - i \sigma_x \sin \alpha$ که در آن I ماتریس یکه است.

(ب) $e^{i\alpha \sigma_x} \sigma_z e^{-i\alpha \sigma_x} = \sigma_z \cos(2\alpha) + \sigma_y \sin(2\alpha)$

حل

(الف) با استفاده از بسط

$$e^{-i\alpha\sigma_x} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^{2n}}{(2n)!} (\alpha)^{2n} \sigma_x^{2n} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^{2n+1}}{(2n+1)!} (\alpha)^{2n+1} \sigma_x^{2n+1} \quad (۳۴۶-۷)$$

و با توجه به $\sigma_x^2 = I$, $\sigma_x^{2n} = I$, $\sigma_x^{2n+1} = \sigma_x$ که در آن I ماتریس یکه است، داریم:

$$e^{-i\alpha\sigma_x} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} (\alpha)^{2n} - i\sigma_x \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} (\alpha)^{2n+1}$$

$$= I \cos \alpha - i\sigma_x \sin \alpha \quad (۳۴۷-۷)$$

(ب) از (۳۴۷-۷) می‌توانیم بنویسیم:

$$e^{i\alpha\sigma_x} \sigma_z e^{-i\alpha\sigma_x} = (\cos \alpha + i\sigma_x \sin \alpha) \sigma_z (\cos \alpha - i\sigma_x \sin \alpha)$$

$$= \sigma_z \cos^2 \alpha + \sigma_x \sigma_z \sigma_x \sin^2 \alpha + i[\sigma_x, \sigma_z] \sin \alpha \cos \alpha \quad (۳۴۸-۷)$$

وزمانی که از روابط $\sigma_x \sigma_z = -\sigma_z \sigma_x$ و $\sigma_x^2 = I$, $[\sigma_x, \sigma_z] = -2i\sigma_y$ استفاده کنیم، به رابطه‌ی زیر می‌رسیم:

$$e^{i\alpha\sigma_x} \sigma_z e^{-i\alpha\sigma_x} = \sigma_z \cos^2 \alpha - \sigma_z \sigma_x^2 \sin^2 \alpha + 2\sigma_y \sin \alpha \cos \alpha$$

$$= \sigma_z (\cos^2 \alpha - \sin^2 \alpha) + \sigma_y \sin(2\alpha) \quad (۳۴۹-۷)$$

$$= \sigma_z \cos(2\alpha) + \sigma_y \sin(2\alpha)$$

مسأله‌ی ۳-۷

ضریب‌های کلبش-گوردن وابسته به جمع دو تکانه‌ی زاویه‌ای $j_1 = 1$ و $j_2 = 1$ را بیابید.

حل

با جمع $j_1 = 1$ و $j_2 = 1$ به‌عنوان مثال، در یک سیستم دو ذره‌ای که در آن تکانه زاویه‌ای هر دو ذره مداری‌اند، مواجه هستیم.

مقدارهای مجاز تکانه‌ی زاویه‌ای کل بین $j_1 + j_2 \geq j \geq |j_1 - j_2|$ قرار دارند از این رو $j = 0, 1, 2$ است. برای محاسبه‌ی ضریب‌های کلبش-گوردن مربوطه باید بردارهای پایه‌ی $\{|j, m\rangle\}$ را که ویژه‌بردارهای مشترک \hat{J}_z^2 , \hat{J}_x^2 و \hat{J}_y^2 برحسب $\{|1, 1; m_1, m_2\rangle\}$ هستند، بیابیم.

ویژه‌بردارهای $|j, m\rangle$ وابسته به $j = 2$

حالت $|2, 2\rangle$ به سادگی با رابطه‌ی زیر داده می‌شود:

$$|2, 2\rangle = |1, 1; 1, 1\rangle \quad (350-7)$$

بنابراین ضریب کلبش-گوردن متناظر از $\langle 1, 1; 1, 1 | 2, 2\rangle = 1$ به دست می‌آید.

در رابطه با $|2, 1\rangle$ باید گفت که می‌توان آن را با اعمال \hat{J}_- بر $|2, 2\rangle$ و $(\hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-})$ بر $|1, 1; 1, 1\rangle$ و سپس مساوی قرار دادن دو نتیجه‌ی به دست آمده، یافت:

$$\hat{J}_- |2, 2\rangle = (\hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-}) |1, 1; 1, 1\rangle \quad (351-7)$$

این معادله به

$$2\hbar |2, 1\rangle = \sqrt{2}\hbar (|1, 1; 1, 0\rangle + |1, 1; 0, 1\rangle) \quad (352-7)$$

یا به

$$|2, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 1; 1, 0\rangle + |1, 1; 0, 1\rangle) \quad (353-7)$$

می‌انجامد. از این رو $\langle 1, 1; 0, 1 | 2, 1\rangle = \langle 1, 1; 1, 0 | 2, 1\rangle = 1/\sqrt{2}$ با استفاده از (353-7) می‌توانیم $|2, 0\rangle$ را با اعمال \hat{J}_- بر $|2, 1\rangle$ و $(\hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-})$ بر $[|1, 1; 1, 0\rangle + |1, 1; 0, 1\rangle]$ بیابیم:

$$\hat{J}_- |2, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \hbar (\hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-}) [|1, 1; 1, 0\rangle + |1, 1; 0, 1\rangle] \quad (354-7)$$

که به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$|2, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} (|1, 1; 1, -1\rangle + 2|1, 1; 0, 0\rangle + |1, 1; -1, 1\rangle) \quad (355-7)$$

از این رو $\langle 1, 1; -1, 1 | 2, 0\rangle = \langle 1, 1; 1, -1 | 2, 0\rangle = 1/\sqrt{6}$ و $\langle 1, 1; 0, 0 | 2, 0\rangle = 2/\sqrt{6}$ می‌توانیم نشان دهیم که به صورت مشابه، با تکرار اعمال \hat{J}_- و $(\hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-})$ ، می‌توانیم نشان دهیم که

$$|2, -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}} (|1, 1; 0, -1\rangle + |1, 1; -1, 0\rangle) \quad (356-7)$$

$$|2, -2\rangle = |1, 1; -1, -1\rangle \quad (357-7)$$

با $\langle 1, 1; -1, 0 | 2, -1\rangle = \langle 1, 1; 0, -1 | 2, -1\rangle = 1/\sqrt{2}$ و $\langle 1, 1; -1, -1 | 2, -2\rangle = 1$

ویژه‌بردارهای $|j, m\rangle$ وابسته به $j = 1$

رابطه‌ی

$$|1, m\rangle = \sum_{m_1=-1}^1 \sum_{m_2=-1}^1 \langle 1, 1; m_1, m_2 | 1, m\rangle |1, 1; m_1, m_2\rangle \quad (358-7)$$

به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$|1, 1\rangle = a|1, 1; 1, 0\rangle + b|1, 1; 0, 1\rangle \quad (359-7)$$

که در آن $a = \langle 1, 1; 1, 0 | 1, 1\rangle$ و $b = \langle 1, 1; 0, 1 | 1, 1\rangle$ است. با توجه به این‌که $\langle 1, 1; 1, 0 | 1, 1; 1, 0\rangle = 1$ و $\langle 1, 1; 0, 1 | 1, 1; 0, 1\rangle = 1$ همگی بهنجارند و چون $|1, 1; 1, 0\rangle$ بر $|1, 1; 0, 1\rangle$ عمود است و a و b حقیقی‌اند، داریم:

$$\langle 1, 1 | 1, 1\rangle = a^2 + b^2 = 1 \quad (360-7)$$

حال چون $\langle 2, 1 | 1, 1\rangle = 0$ است، معادله‌های (۳۵۳-۷) و (۳۵۹-۷) نتیجه‌ی زیر را می‌دهند:

$$\langle 2, 1 | 1, 1\rangle = \frac{a}{\sqrt{2}} + \frac{b}{\sqrt{2}} = 0 \quad (361-7)$$

ترکیب (۳۶۰-۷) و (۳۶۱-۷) به $a = -b = \pm 1/\sqrt{2}$ می‌انجامد. اما هنوز یافتن علامت‌های a و b باقی مانده است. قرارداد فاز ایجاب می‌کند که ضریب‌هایی مانند $\langle j_1, j_2; j_1, j_2 | j, j\rangle$ باید مثبت باشند. بنابراین داریم: $a = 1/\sqrt{2}$ و $b = -1/\sqrt{2}$ که زمانی که در (۳۵۹-۷) وارد شوند، رابطه‌ی زیر را به دست می‌دهند:

$$|1, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 1; 1, 0\rangle - |1, 1; 0, 1\rangle) \quad (362-7)$$

که $\langle 1, 1; 1, 0 | 1, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}$ و $\langle 1, 1; 0, 1 | 1, 1\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}$ را نتیجه می‌دهد.

برای یافتن $|1, 0\rangle$ به همان صورتی که در بالا هنگام به دست آوردن حالت‌های $|2, 1\rangle$ ، $|2, 0\rangle$ ، ... و $|2, -2\rangle$ اقدام کردیم یعنی با تکرار اعمال \hat{J}_- روی $|2, 2\rangle$ ، عمل می‌کنیم. در این صورت، اعمال \hat{J}_- روی $|1, 1\rangle$ و $(\hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-})$ روی $[|1, 1; 1, 0\rangle - |1, 1; 0, 1\rangle]$ خواهیم داشت

$$\hat{J}_- |1, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-})[|1, 1; 1, 0\rangle - |1, 1; 0, 1\rangle] \quad (363-7)$$

رابطه‌ی

$$\sqrt{2\hbar}|1, 0\rangle = \frac{\sqrt{2\hbar}}{\sqrt{2}}[|1, 1; 1, -1\rangle - |1, 1; -1, 1\rangle] \quad (364-7)$$

یا

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 1; 1, -1\rangle - |1, 1; -1, 1\rangle) \quad (365-7)$$

همراه با $\langle 1, 1; 1, -1 | 1, 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}$ و $\langle 1, 1; -1, 1 | 1, 0 \rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}$. به‌طور مشابه، می‌توانیم نشان دهیم که

$$\langle 1, -1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle 1, 1; 0, -1 \rangle - \langle 1, 1; -1, 0 \rangle) \quad (366-7)$$

بدین ترتیب داریم $\langle 1, 1; 0, -1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}$ و $\langle 1, 1; -1, -1 \rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}$ است.

ویژه‌بردار $|\circ, \circ\rangle$ وابسته به $j = 0$

با توجه به این که

$$|\circ, \circ\rangle = a|1, 1; 1, -1\rangle + b|1, 1; 0, 0\rangle + c|1, 1; -1, 1\rangle \quad (367-7)$$

که در آن $a = \langle 1, 1; 1, -1 | \circ, \circ \rangle$ ، $b = \langle 1, 1; 0, 0 | \circ, \circ \rangle$ و $c = \langle 1, 1; -1, 1 | \circ, \circ \rangle$ حقیقی و حالت‌های $|\circ, \circ\rangle$ ، $|1, 1; 1, -1\rangle$ ، $|1, 1; 0, 0\rangle$ و $|1, 1; -1, 1\rangle$ متعامدند، داریم:

$$\langle \circ, \circ | \circ, \circ \rangle = a^2 + b^2 + c^2 = 1 \quad (368-7)$$

حال با ترکیب (355-7)، (365-7) و (367-7) به‌دست می‌آوریم:

$$\langle 2, 0 | \circ, \circ \rangle = \frac{a}{\sqrt{6}} + \frac{2b}{\sqrt{6}} + \frac{c}{\sqrt{6}} = 0 \quad (369-7)$$

$$\langle 1, 0 | \circ, \circ \rangle = \frac{a}{\sqrt{2}} - \frac{c}{\sqrt{2}} = 0 \quad (370-7)$$

با توجه به این که a به‌صورت قراردادی مثبت است، می‌توانیم نشان دهیم که جواب‌های (368-7)، (369-7) و (370-7) به‌صورت $a = 1/\sqrt{3}$ ، $b = -1/\sqrt{3}$ و $c = 1/\sqrt{3}$ هستند و در نتیجه

$$|\circ, \circ\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|1, 1; 1, -1\rangle - |1, 1; 0, 0\rangle + |1, 1; -1, 1\rangle) \quad (371-7)$$

همراه با $\langle 1, 1; -1, 1 | \circ, \circ \rangle = \langle 1, 1; 1, -1 | \circ, \circ \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}$ و $\langle 1, 1; 0, 0 | \circ, \circ \rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}}$. توجه کنید که حالت‌های پنج‌تایی $|2, m\rangle$ (با $m = \pm 2, \pm 1, 0$) و حالت تک‌تایی $|\circ, \circ\rangle$ تحت وارونی فضا متقارن‌اند ولی حالت‌های سه‌تایی $|1, m\rangle$ (با $m = \pm 1, 0$) پادمتقارن.

مسئله‌ی ۴-۷

(الف) اسپین کل سیستمی مشکل از سه ذره با اسپین $\frac{1}{2}$ را بیابید و ضریب‌های کلیش-گوردن متناظر را به‌دست آورید.

(ب) سیستمی مشکل از سه ذره‌ی غیریکسان با اسپین $\frac{1}{2}$ را در نظر بگیرید که هامیلتونی آن به‌صورت $\hat{H} = -\epsilon_0 (S_1 \cdot S_2 + S_2 \cdot S_3) / \hbar^2$ است. ترازهای انرژی سیستم و واگنی آنها را بیابید.

حل

(الف) برای جمع $\frac{1}{\sqrt{2}}$ و $j_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ و $j_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ با جفت کردن j_1 و j_2 برای تشکیل $j_{12} = j_1 + j_2$ شروع می‌کنیم که در آن $|j_1 + j_2| \leq j_{12} \leq |j_1 - j_2|$ است از این رو $1, 0, -1$ است. سپس j_{12} و j_3 را با هم جمع می‌کنیم که به $|j_{12} + j_3| \leq j \leq |j_{12} - j_3|$ یا $\frac{3}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}$ می‌انجامد.

ویژه‌حالت‌های مشترک $\hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2, \hat{J}_3^2, \hat{J}_{12}^2, \hat{J}_z$ و \hat{J}_z را با $|j_1, j_2, j_3; m_1, m_2, m_3\rangle$ نمایش می‌دهیم. با توجه به این که $j_1 = j_2 = j_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ است، در ادامه‌ی این مسأله از نمادگذاری کوتاه شده‌ی (\pm, \pm, \pm) برای خلاصه کردن $(\pm, \pm, \pm; \pm, \pm, \pm)$ استفاده خواهیم کرد. در مجموع، هشت حالت $|j_{12}, j, m\rangle$ وجود دارند زیرا $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)(2j_3 + 1) = 8$ که چهارتای آنها متناظر با زیرفضای $\frac{3}{\sqrt{2}} = j$ هستند: $(\frac{3}{\sqrt{2}}, \frac{3}{\sqrt{2}}, \frac{3}{\sqrt{2}})$ و $(\frac{3}{\sqrt{2}}, \frac{3}{\sqrt{2}}, -\frac{3}{\sqrt{2}})$ و $(\frac{3}{\sqrt{2}}, -\frac{3}{\sqrt{2}}, \frac{3}{\sqrt{2}})$ و $(\frac{3}{\sqrt{2}}, -\frac{3}{\sqrt{2}}, -\frac{3}{\sqrt{2}})$ و چهارتای باقیمانده به زیرفضای $\frac{1}{\sqrt{2}} = j$ تعلق دارند: $(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{3}{\sqrt{2}}, \frac{3}{\sqrt{2}})$ و $(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{3}{\sqrt{2}}, -\frac{3}{\sqrt{2}})$ و $(\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{3}{\sqrt{2}}, \frac{3}{\sqrt{2}})$ و $(\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{3}{\sqrt{2}}, -\frac{3}{\sqrt{2}})$. برای ساختن حالت‌های $|j_{12}, j, m\rangle$ برحسب (\pm, \pm, \pm) قصد داریم تا دو زیرفضای $j = \frac{1}{\sqrt{2}}$ و $j = \frac{3}{\sqrt{2}}$ را جداگانه بررسی کنیم.

زیرفضای $j = \frac{3}{\sqrt{2}}$

ابتدا واضح است که حالت‌های $(\frac{3}{\sqrt{2}}, \frac{3}{\sqrt{2}}, \frac{3}{\sqrt{2}})$ و $(\frac{3}{\sqrt{2}}, \frac{3}{\sqrt{2}}, -\frac{3}{\sqrt{2}})$ با رابطه‌های زیر داده می‌شوند:

$$\left|1, \frac{3}{\sqrt{2}}, \frac{3}{\sqrt{2}}\right\rangle = |j_1, j_2, j_3; +, +, +\rangle, \quad \left|1, \frac{3}{\sqrt{2}}, -\frac{3}{\sqrt{2}}\right\rangle = |j_1, j_2, j_3; -, -, -\rangle \quad (372-7)$$

برای به دست آوردن $(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{3}{\sqrt{2}}, \frac{3}{\sqrt{2}})$ از یک سو باید \hat{J}_- را روی $(\frac{3}{\sqrt{2}}, \frac{3}{\sqrt{2}}, \frac{3}{\sqrt{2}})$ اثر دهیم ((۷-۲۲۰) را ببینید):

$$\hat{J}_- \left|1, \frac{3}{\sqrt{2}}, \frac{3}{\sqrt{2}}\right\rangle = \hbar \sqrt{\frac{3}{2} \left(\frac{3}{2} + 1\right) - \frac{3}{2} \left(\frac{3}{2} - 1\right)} \left|1, \frac{3}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right\rangle = \hbar \sqrt{3} \left|1, \frac{3}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right\rangle \quad (373-7)$$

و از سوی دیگر، $(\hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-} + \hat{J}_{3-})$ را روی $(\frac{3}{\sqrt{2}}, \frac{3}{\sqrt{2}}, \frac{3}{\sqrt{2}}; +, +, +)$ اثر دهیم ((۷-۲۲۱) تا (۷-۲۲۳) را ببینید). این کار به معادله‌ی زیر می‌انجامد:

$$(\hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-} + \hat{J}_{3-}) |j_1, j_2, j_3; +, +, +\rangle = \hbar (|j_1, j_2, j_3; -, +, +\rangle + |j_1, j_2, j_3; +, -, +\rangle + |j_1, j_2, j_3; +, +, -\rangle) \quad (374-7)$$

زیرا $1 = \sqrt{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1\right) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} - 1\right)}$ است. با مساوی قرار دادن ((۷-۳۷۳) و ((۷-۳۷۴) نتیجه می‌گیریم که

$$\left|1, \frac{3}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|j_1, j_2, j_3; -, +, +\rangle + |j_1, j_2, j_3; +, -, +\rangle + |j_1, j_2, j_3; +, +, -\rangle) \quad (375-7)$$

با پیروی از همین روش (اعمال \hat{J}_- روی $|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ و $(\hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-} + \hat{J}_{3-})$ روی طرف راست (۳۷۵-۷) و سپس مساوی قرار دادن دو نتیجه‌ی به‌دست آمده، به نتیجه‌ی زیر می‌رسیم:

$$\left|1, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|j_1, j_2, j_3; +, -, -\rangle + |j_1, j_2, j_3; -, +, -\rangle + |j_1, j_2, j_3; -, -, +\rangle) \quad (376-7)$$

زیرفضای $\frac{1}{2} = j$

می‌توانیم $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ را به صورت ترکیبی خطی از $|j_1, j_2, j_3; +, +, -\rangle$ و $|j_1, j_2, j_3; -, +, +\rangle$ بنویسیم:

$$\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \alpha |j_1, j_2, j_3; +, +, -\rangle + \beta |j_1, j_2, j_3; -, +, +\rangle \quad (377-7)$$

با توجه به این که $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ بهنجار است، در حالی که $|j_1, j_2, j_3; +, +, -\rangle$ و $|j_1, j_2, j_3; -, +, +\rangle$ متعامد بهنجارند و ضریب‌های کلیش-گوردن (مانند α و β) عددهایی حقیقی‌اند، معادله‌ی (۳۷۷-۷) نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\alpha^2 + \beta^2 = 1 \quad (378-7)$$

از سوی دیگر، چون $\langle 1, \frac{3}{2}, \frac{1}{2} | \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle = 0$ است، ترکیب (۳۷۵-۷) و (۳۷۷-۷) به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\frac{1}{\sqrt{3}}(\alpha + \beta) = 0 \implies \alpha = -\beta \quad (379-7)$$

جاگذاری $\alpha = -\beta$ در (۳۷۸-۷) نتیجه‌ی $\alpha = -\beta = 1/\sqrt{2}$ را می‌دهد و با جاگذاری این نتیجه در (۳۷۷-۷) به‌دست می‌آوریم:

$$\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|j_1, j_2, j_3; +, +, -\rangle - |j_1, j_2, j_3; -, +, +\rangle) \quad (380-7)$$

با پیروی از همان روندی که به (۳۷۵-۷) انجامید (اعمال \hat{J}_- روی طرف چپ (۳۸۰-۷) و $(\hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-} + \hat{J}_{3-})$ روی طرف راست و سپس مساوی قرار دادن دو نتیجه‌ی به‌دست آمده) به نتیجه‌ی زیر می‌رسیم:

$$\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}}(-|j_1, j_2, j_3; +, -, -\rangle + |j_1, j_2, j_3; -, -, +\rangle) \quad (381-7)$$

حال برای یافتن $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ می‌توانیم آن را به صورت ترکیبی خطی از $|j_1, j_2, j_3; +, +, -\rangle$ و $|j_1, j_2, j_3; -, +, +\rangle$ بنویسیم:

$$\left|1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \alpha |j_1, j_2, j_3; +, +, -\rangle + \beta |j_1, j_2, j_3; +, -, +\rangle + \gamma |j_1, j_2, j_3; -, +, +\rangle \quad (382-7)$$

این حالت عمود بر $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ است از این رو $\alpha = \gamma$ است. به صورت مشابه، چون این حالت عمود بر $|\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ است، داریم: $\alpha + \beta + \gamma = 0$ و از این رو $2\alpha + \beta = 0$ یا $\beta = -2\alpha$. حال با توجه به این که تمام حالت‌های (۳۸۲-۷) متعامد بهنجارند، داریم: $\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = 1$ که زمانی که با

به $\alpha = \gamma = -1/\sqrt{6}$ و $\beta = 2/\sqrt{6}$ می‌انجامد. بنابراین می‌توانیم (۳۸۲-۷) را به صورت زیر بنویسیم:

$$\left| 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} (-|j_1, j_2, j_3; +, +, -\rangle + 2|j_1, j_2, j_3; +, -, +\rangle - |j_1, j_2, j_3; -, +, +\rangle) \quad (382-7)$$

سرانجام با اعمال \hat{J}_- روی طرف چپ (۳۸۳-۷) و $(\hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-} + \hat{J}_{3-})$ بر طرف راست و مساوی قرار دادن دو نتیجه‌ی به‌دست آمده، به نتیجه‌ی زیر می‌رسیم:

$$\left| 1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} (|j_1, j_2, j_3; +, -, -\rangle - 2|j_1, j_2, j_3; -, +, -\rangle + |j_1, j_2, j_3; -, -, +\rangle) \quad (384-7)$$

(ب) با توجه به این که سه ذره‌ی (غیر یکسان) متفاوت داریم، تکانه‌های زاویه‌ای اسپینی آنها دو به دو جابه‌جا می‌شوند. بنابراین می‌توانیم هامیلتونی آنها را به صورت $\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$ بنویسیم. به دلیل این شکل پیشنهادی \hat{H} ، همانطور که در (الف) نشان داده شد، بهتر است با جفت کردن \hat{S}_1 و \hat{S}_2 شروع کنیم تا $\hat{S}_{12} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2$ را به دست آوریم و سپس \hat{S}_{12} را با \hat{S}_3 برای تولید اسپین کل $\hat{S} = \hat{S}_{12} + \hat{S}_3$ جمع کنیم. بنابراین می‌توانیم \hat{H} را به صورت زیر بنویسیم:

$$\hat{H} = -\frac{\epsilon_0}{\hbar^2} (\hat{S}_1 + \hat{S}_2) \cdot \hat{S}_3 = -\frac{\epsilon_0}{\hbar^2} \hat{S}_{12} \cdot \hat{S}_3 = -\frac{\epsilon_0}{2\hbar^2} (\hat{S}^2 - \hat{S}_{12}^2 - \hat{S}_3^2) \quad (385-7)$$

زیرا $\hat{S}_{12} \cdot \hat{S}_3 = \frac{1}{2} [(\hat{S}_{12} + \hat{S}_3)^2 - \hat{S}_{12}^2 - \hat{S}_3^2]$. با توجه به این که عملگرهای \hat{H} ، \hat{S}_{12}^2 و \hat{S}_3^2 دو به دو جابه‌جا می‌شوند، می‌توانیم ویژه‌حالت‌های مشترک آنها را به صورت کت‌های $|s_{12}, s, m\rangle$ انتخاب کنیم. در (الف) دیدیم که چگونه می‌توانیم این حالت‌ها را بسازیم. بنابراین ویژه‌مقدارهای \hat{H} از معادله‌ی زیر به دست می‌آیند:

$$\hat{H}|s_{12}, s, m\rangle = -\frac{\epsilon_0}{2\hbar^2} (\hat{S}^2 - \hat{S}_{12}^2 - \hat{S}_3^2) |s_{12}, s, m\rangle \quad (386-7)$$

$$= -\frac{\epsilon_0}{2} \left[s(s+1) - s_{12}(s_{12}+1) - \frac{3}{4} \right] |s_{12}, s, m\rangle$$

$$\text{زیرا } s_3 = \frac{1}{2} \text{ و } \hat{S}_3^2 |s_{12}, s, m\rangle = \hbar^2 s_3(s_3+1) |s_{12}, s, m\rangle = (3\hbar^2/4) |s_{12}, s, m\rangle$$

همانطور که در (۳۸۶-۷) نشان داده شد، ترازهای انرژی این سیستم نسبت به m واگن‌اند زیرا به عددهای کوانتومی s و s_{12} بستگی دارند ولی به m وابسته نیستند:

$$E_{s_{12}, s} = -\frac{\epsilon_0}{2} \left[s(s+1) - s_{12}(s_{12}+1) - \frac{3}{4} \right] \quad (387-7)$$

برای مثال، انرژی $E_{1, 3/2} = E_{1, 2/2} = -\epsilon_0/2$ واگن چهارگانه است زیرا متناظر با چهار حالت متفاوت $|1, \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2}\rangle$ و $|1, \frac{3}{2}, \pm \frac{3}{2}\rangle$ است. به صورت مشابه، انرژی $E_{0, 1/2} = 0$ واگن دوگانه است و حالت‌های متناظر عبارتند از $|\frac{0}{2}, \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2}\rangle$. سرانجام انرژی $E_{1, 1/2} = \epsilon_0$ نیز واگن دوگانه است زیرا متناظر با $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2}\rangle$ است.

مسئله ۵-۷

سیستمی متشکل از چهار ذره‌ی غیریکسان با اسپین $\frac{1}{2}$ را در نظر بگیرید. مقدارهای ممکن اسپین کل S این سیستم را بیابید و تعداد ویژه‌حالت‌های تکانه‌ی زاویه‌ای متناظر با هر مقدار S را مشخص کنید.

حل

ابتدا باید جداگانه دو اسپین را جفت کنیم: $\hat{S}_{12} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2$ و $\hat{S}_{34} = \hat{S}_3 + \hat{S}_4$. سپس \hat{S}_{12} و \hat{S}_{34} را با هم جفت می‌کنیم: $\hat{S} = \hat{S}_{12} + \hat{S}_{34}$. از مسئله‌ی حل شده‌ی ۴-۷ داریم: $s_{12} = 0, 1$ و $s_{34} = 0, 1$. مجموع ۱۶ حالت $|s, m\rangle$ وجود دارند زیرا $2^4 = 16$. وجود دارند زیرا $(2s_1 + 1)(2s_2 + 1)(2s_3 + 1)(2s_4 + 1) = 2^4 = 16$. چون $s_{12} = 0, 1$ و $s_{34} = 0, 1$ است، جفت کردن \hat{S}_{12} و \hat{S}_{34} مقدارهای زیر را به‌ازای اسپین کل s نتیجه می‌دهد:

- هنگامی که $s_{12} = 0$ و $s_{34} = 0$ است، تنها یک مقدار ممکن ($s = 0$) و از این‌رو تنها یک ویژه‌حالت $|s, m\rangle = |0, 0\rangle$ را داریم.
 - هنگامی که $s_{12} = 1$ و $s_{34} = 0$ است، داریم: $s = 1$ و سه ویژه‌حالت $|s, m\rangle = |1, \pm 1\rangle$ و $|1, 0\rangle$ وجود دارند.
 - هنگامی که $s_{12} = 0$ و $s_{34} = 1$ است، داریم: $s = 1$ و سه ویژه‌حالت $|s, m\rangle = |1, \pm 1\rangle$ و $|1, 0\rangle$ وجود دارند.
 - هنگامی که $s_{12} = 1$ و $s_{34} = 1$ است، داریم: $s = 0, 1, 2$ و در اینجا نه ویژه‌حالت داریم (مسئله‌ی حل شده‌ی ۳-۷ را ببینید): $|0, 0\rangle, |1, \pm 1\rangle, |1, 0\rangle, |2, \pm 2\rangle, |2, \pm 1\rangle$ و $|2, 0\rangle$.
- در نتیجه، مقدارهای ممکن اسپین کل هنگامی که چهار اسپین $\frac{1}{2}$ جفت می‌شوند، عبارتند از $s = 0, 1, 2$. مقدار $s = 0$ دو بار روی می‌دهد، $s = 1$ سه بار و $s = 2$ تنها یک بار.

مسئله ۶-۷

جفت‌شدگی ایزواسپین‌های سیستم پیون-نوکلئون را بررسی کنید و حالت‌های مختلف این سیستم را نتیجه بگیرید.

حل

چون ایزواسپین مزون پیون برابر با ۱ و ایزواسپین یک نوکلئون برابر با $\frac{1}{2}$ است، می‌توان ایزواسپین کل سیستم پیون-نوکلئون را با جفت کردن ایزواسپین‌های $t_1 = \frac{1}{2}$ و $t_2 = \frac{1}{2}$ به‌دست آورد. مقدارهای مختلف ایزواسپین کل در محدوده‌ی $t_1 + t_2 < T < |t_1 - t_2|$ قرار می‌گیرند و از این‌رو عبارتند از $\frac{1}{2}, T = \frac{3}{2}$. جفت‌شدگی ایزواسپین‌های $t_1 = \frac{1}{2}$ و $t_2 = \frac{1}{2}$ مشابه با جمع تکانه‌ی زاویه‌ای مدار $l = 1$ و اسپین $\frac{1}{2}$ است و عبارت‌های مربوط به این جفت‌شدگی در (۷-۲۰۶) تا (۷-۲۱۱) فهرست شده‌اند. توجه کنید

که سه مزون π متفاوت

$$|1, 1\rangle = |\pi^+\rangle, \quad |1, 0\rangle = |\pi^0\rangle, \quad |1, -1\rangle = |\pi^-\rangle \quad (388-7)$$

و دو نوکلئون (یک پروتون و یک نوترون) وجود دارد:

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = |p\rangle, \quad \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = |n\rangle \quad (389-7)$$

در تشابه با (۷-۲۰۶) تا (۷-۲۱۱)، می‌توانیم حالت‌های متناظر با $T = \frac{3}{2}$ را به صورت

$$\left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = |1, 1\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = |\pi^+\rangle |p\rangle \quad (390-7)$$

$$\begin{aligned} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 0\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |1, 1\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ &= \sqrt{\frac{2}{3}} |\pi^0\rangle |p\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |\pi^+\rangle |n\rangle \end{aligned} \quad (391-7)$$

$$\begin{aligned} \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} |1, -1\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 0\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}} |\pi^-\rangle |p\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |\pi^0\rangle |n\rangle \end{aligned} \quad (392-7)$$

$$\left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle = |1, -1\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = |\pi^-\rangle |n\rangle \quad (393-7)$$

و حالت‌های متناظر با $T = \frac{1}{2}$ را به صورت زیر بنویسیم:

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 1\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} |1, 0\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ &= \sqrt{\frac{2}{3}} |\pi^+\rangle |n\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} |\pi^0\rangle |p\rangle \end{aligned} \quad (394-7)$$

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} |1, 0\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} |1, -1\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}} |\pi^0\rangle |n\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} |\pi^-\rangle |p\rangle \end{aligned} \quad (395-7)$$

مسأله‌ی ۷-۷

(الف) عبارت $\langle 2, 0 | Y_1 | 1, 0 \rangle$ را محاسبه کنید.

(ب) از نتیجه‌ی (الف) همراه با قضیه‌ی ویگنر-اکارت برای محاسبه‌ی عنصر ماتریسی کاهش یافته‌ی

$\langle 2 || Y_1 || 1 \rangle$ استفاده کنید.

حل

(الف) چون داریم:

$$\langle 2, 0 | Y_{10} | 1, 0 \rangle = \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} Y_{20}^*(\theta, \varphi) Y_{10}(\theta, \varphi) Y_{10}(\theta, \varphi) d\varphi \quad (396-7)$$

و با استفاده از رابطه‌های $Y_{10}(\theta, \varphi) = \sqrt{3/(4\pi)} \cos \theta$ و $Y_{20}(\theta, \varphi) = \sqrt{5/(16\pi)} (3 \cos^2 \theta - 1)$ خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} \langle 2, 0 | Y_{10} | 1, 0 \rangle &= \frac{3}{4\pi} \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \int_0^\pi \cos^2 \theta (3 \cos^2 \theta - 1) \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \\ &= \frac{3}{2} \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \int_0^\pi \cos^2 \theta (3 \cos^2 \theta - 1) \sin \theta d\theta \end{aligned} \quad (397-7)$$

تغییر متغیر $x = \cos \theta$ به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\begin{aligned} \langle 2, 0 | Y_{10} | 1, 0 \rangle &= \frac{3}{2} \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \int_0^\pi \cos^2 \theta (3 \cos^2 \theta - 1) \sin \theta d\theta \\ &= \frac{3}{2} \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \int_{-1}^1 x^2 (3x^2 - 1) dx = \frac{1}{\sqrt{5\pi}} \end{aligned} \quad (398-7)$$

(ب) با اعمال قضیه‌ی ویگنر-اکارت بر $\langle 2, 0 | Y_{10} | 1, 0 \rangle$ و استفاده از ضریب کلبش-گوردن $\langle 1, 1; 0, 0 | 2, 0 \rangle = 2/\sqrt{6}$ داریم:

$$\langle 2, 0 | Y_{10} | 1, 0 \rangle = \langle 1, 1; 0, 0 | 2, 0 \rangle \langle 2 || Y_1 || 1 \rangle = \frac{2}{\sqrt{6}} \langle 2 || Y_1 || 1 \rangle \quad (399-7)$$

سرانجام می‌توانیم $\langle 2 || Y_1 || 1 \rangle$ را از (398-7) و (399-7) به دست آوریم:

$$\langle 2 || Y_1 || 1 \rangle = \sqrt{\frac{3}{10\pi}} \quad (400-7)$$

مسئله‌ی ۸-۷

(الف) عناصر ماتریسی کاهش یافته‌ی وابسته به هماهنگ‌گروی $Y_{kq}(\theta, \varphi)$ را بیابید.

(ب) گذارهای دوقطبی $\langle n'l'm' | \mathbf{r} | nlm \rangle$ را محاسبه نمایید.

حل

از یک سو، به‌کار بردن قضیه‌ی ویگنر-اکارت برای Y_{kq} نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\langle l', m' | Y_{kq} | l, m \rangle = \langle l, k; m, q | l', m' \rangle \langle l' || Y^{(k)} || l \rangle \quad (401-7)$$

و از سوی دیگر، محاسبه‌ی سراسرت

$$\begin{aligned} \langle l', m' | Y_{kq} | l, m \rangle &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \langle l', m | \theta, \varphi \rangle Y_{kq}(\theta, \varphi) \langle \theta, \varphi | l, m \rangle \\ &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi) Y_{kq}(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) \end{aligned} \quad (402-7)$$

را می‌توان از رابطه‌ی انتگرالی سه‌گانه‌ی (۷-۲۴۴) نتیجه گرفت:

$$\langle l', m' | Y_{kq} | l, m \rangle = \sqrt{\frac{(2l+1)(2k+1)}{4\pi(2l'+1)}} \langle l, k; 0, 0 | l', 0 \rangle \langle l, k; m, q | l', m' \rangle \quad (403-7)$$

سپس می‌توانیم (۷-۴۰۱) و (۷-۴۰۳) را برای به‌دست آوردن عنصر ماتریسی کاهش یافته‌ی مورد نظر ترکیب کنیم:

$$\langle l' || Y^{(k)} || l \rangle = \sqrt{\frac{(2l+1)(2k+1)}{4\pi(2l'+1)}} \langle l, k; 0, 0 | l', 0 \rangle \quad (404-7)$$

(ب) برای محاسبه‌ی $\langle n'l'm' | \mathbf{r} | nlm \rangle$ بهتر است به‌صورت زیر بردار \mathbf{r} را برحسب مؤلفه‌های کروی $\mathbf{r} = (r_{-1}, r_0, r_1)$ که برحسب مختصات دکارتی x, y, z معلوم‌اند، بیان کنیم:

$$r_1 = -\frac{x+iy}{\sqrt{2}} = \frac{r}{\sqrt{2}} e^{i\varphi} \sin \theta, \quad r_0 = z = r \cos \theta, \quad r_{-1} = \frac{x-iy}{\sqrt{2}} = \frac{r}{\sqrt{2}} e^{-i\varphi} \sin \theta \quad (405-7)$$

که به‌نوبه‌ی خود می‌توان آن را به‌صورت تک‌رابطه‌ی زیر فشرده کرد:

$$r_q = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_{1q}(\theta, \varphi) \quad q = 1, 0, -1 \quad (406-7)$$

سپس می‌توانیم $\langle n'l'm' | r_q | nlm \rangle$ را برحسب یک بخش شعاعی و یک بخش زاویه‌ای بنویسیم:

$$\langle n'l'm' | r_q | nlm \rangle = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \langle n', l' | r_q | n, l \rangle \langle l', m' | Y_{1q}(\theta, \varphi) | l, m \rangle \quad (407-7)$$

محاسبه‌ی بخش شعاعی $\langle n', l' | r_q | n, l \rangle = \int_0^\infty r^3 R_{n'l'}^*(r) R_{nl}^*(r) dr$ سراسرت است و در اینجا ارتباط چندانی به ما ندارد (برای محاسبه‌ی آن، فصل ۶ را ببینید). در رابطه با بخش زاویه‌ای $\langle l', m' | Y_{1q}(\theta, \varphi) | l, m \rangle$ باید گفت که می‌توانیم عبارت مربوط به آن را از (۷-۴۰۳) نتیجه بگیریم:

$$\langle l', m' | Y_{1q} | l, m \rangle = \sqrt{\frac{3(2l+1)}{4\pi(2l'+1)}} \langle l, 1; 0, 0 | l', 0 \rangle \langle l, 1; m, q | l', m' \rangle \quad (408-7)$$

ضریب‌های کلیش‌گوردن $\langle l, 1; m, q | l', m' \rangle$ صفر می‌شوند مگر آن‌که $m' = m + q$ و $l - 1 \leq l' \leq l + 1$ یا $l' \leq l + 1$ و $\Delta m = m' - m = q = 1, 0, -1$ و $\Delta l = l' - l = 1, 0, -1$ باشند. توجه کنید که قاعده‌ی گزینش پاریتته حالت $\Delta l = 0$ را رد می‌کند بنابراین تنها مقادارهای مجاز l' و l مقادارهایی هستند

که به‌ازای آنها $\Delta l = l' - l = \pm 1$ است. با به‌دست آوردن ضریب‌های کلیش‌گوردن متفاوت مربوطه از جدول‌های استاندارد، می‌توانیم تحقیق کنیم که تنها جمله‌هایی که از (۷-۸۰) باقی می‌مانند، عبارتند از

$$\langle l+1, m+1 | Y_{11} | l, m \rangle = \sqrt{\frac{3(l+m+1)(l+m+2)}{8\pi(2l+1)(2l+3)}} \quad (۷-۹۰)$$

$$\langle l-1, m+1 | Y_{11} | l, m \rangle = \sqrt{\frac{3(l-m-1)(l-m)}{8\pi(2l+1)(2l+3)}} \quad (۷-۹۱)$$

$$\langle l+1, m | Y_{10} | l, m \rangle = \sqrt{\frac{3[(l+1)^2 - m^2]}{4\pi(2l+1)(2l+3)}} \quad (۷-۹۱)$$

$$\langle l-1, m | Y_{10} | l, m \rangle = \sqrt{\frac{3(l^2 - m^2)}{4\pi(2l+1)(2l-1)}} \quad (۷-۹۲)$$

$$\langle l+1, m-1 | Y_{1-1} | l, m \rangle = \sqrt{\frac{3(l-m+1)(l-m+2)}{8\pi(2l+1)(2l+3)}} \quad (۷-۹۳)$$

$$\langle l-1, m-1 | Y_{1-1} | l, m \rangle = \sqrt{\frac{3(l+m)(l+m-1)}{8\pi(2l+1)(2l-1)}} \quad (۷-۹۴)$$

مسئله ۷-۹

ماتریس چرخش $d^{(1)}$ متناظر با $j = 1$ را بیابید.

حل

برای یافتن ماتریس $d^{(1)}(\beta) = e^{-i\beta\hat{J}_y/\hbar}$ به‌ازای $j = 1$ ، ابتدا باید نمایش ماتریسی \hat{J}_y در ویژه‌حالت‌های مشترک $\{|j, m\rangle\}$ عملگرهای \hat{J}_z و \hat{J}^2 بیابیم. چون پایه‌ی $j = 1$ از سه حالت $|\uparrow, 1\rangle$ ، $|\uparrow, 0\rangle$ و $|\uparrow, -1\rangle$ تشکیل شده است، ماتریس نمایش‌دهنده‌ی \hat{J}_y در این پایه به‌صورت زیر است:

$$\begin{aligned} J_y &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \langle \uparrow, 1 | \hat{J}_y | \uparrow, 1 \rangle & \langle \uparrow, 1 | \hat{J}_y | \uparrow, 0 \rangle & \langle \uparrow, 1 | \hat{J}_y | \uparrow, -1 \rangle \\ \langle \uparrow, 0 | \hat{J}_y | \uparrow, 1 \rangle & \langle \uparrow, 0 | \hat{J}_y | \uparrow, 0 \rangle & \langle \uparrow, 0 | \hat{J}_y | \uparrow, -1 \rangle \\ \langle \uparrow, -1 | \hat{J}_y | \uparrow, 1 \rangle & \langle \uparrow, -1 | \hat{J}_y | \uparrow, 0 \rangle & \langle \uparrow, -1 | \hat{J}_y | \uparrow, -1 \rangle \end{pmatrix} \\ &= \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (۷-۹۵)$$

به آسانی می‌توانیم ثابت کنیم که $J_y^{\mathcal{I}} = J_y$ است:

$$J_y^{\mathcal{I}} = \frac{\hbar^{\mathcal{I}}}{\mathcal{I}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & \mathcal{I} & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad J_y^{\mathcal{I}} = \frac{i\hbar^{\mathcal{I}}}{\sqrt{\mathcal{I}}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \hbar^{\mathcal{I}} J_y \quad (416-7)$$

بنابراین می‌توانیم نتیجه بگیریم که:

$$J_y^{\mathcal{I}n} = \hbar^{\mathcal{I}n-2} J_y^{\mathcal{I}} \quad (n > 0), \quad J_y^{\mathcal{I}n+1} = \hbar^{\mathcal{I}n} J_y \quad (417-7)$$

با ترکیب این دو رابطه با

$$\begin{aligned} e^{-i\beta J_y/\hbar} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i\beta}{\hbar}\right)^n J_y^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(\mathcal{I}n)!} \left(-\frac{i\beta}{\hbar}\right)^{\mathcal{I}n} J_y^{\mathcal{I}n} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(\mathcal{I}n+1)!} \left(-\frac{i\beta}{\hbar}\right)^{\mathcal{I}n+1} J_y^{\mathcal{I}n+1} \quad (418-7) \end{aligned}$$

رابطه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} e^{-i\beta J_y/\hbar} &= \hat{I} + \left(\frac{\hat{J}_y}{\hbar}\right)^{\mathcal{I}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(\mathcal{I}n)!} (\beta)^{\mathcal{I}n} - i \frac{\hat{J}_y}{\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(\mathcal{I}n+1)!} \beta^{\mathcal{I}n+1} \\ &= \hat{I} + \left(\frac{\hat{J}_y}{\hbar}\right)^{\mathcal{I}} \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(\mathcal{I}n)!} (\beta)^{\mathcal{I}n} - 1 \right] - i \frac{\hat{J}_y}{\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(\mathcal{I}n+1)!} \beta^{\mathcal{I}n+1} \quad (419-7) \end{aligned}$$

که در آن \hat{I} ماتریس یک‌ه‌ی 3×3 است. با استفاده از رابطه‌های $\sum_{n=0}^{\infty} [(-1)^n / (\mathcal{I}n)!] (\beta)^{\mathcal{I}n} = \cos \beta$ و $\sum_{n=0}^{\infty} [(-1)^n / (\mathcal{I}n+1)!] \beta^{\mathcal{I}n+1} = \sin \beta$ می‌توانیم بنویسیم:

$$e^{-i\beta J_y/\hbar} = \hat{I} + \left(\frac{\hat{J}_y}{\hbar}\right)^{\mathcal{I}} [\cos \beta - 1] - i \frac{\hat{J}_y}{\hbar} \sin \beta \quad (420-7)$$

حال با وارد کردن عبارت‌های ماتریسی J_y و $J_y^{\mathcal{I}}$ به صورتی که در (415-7) و (416-7) فهرست شد، رابطه‌ی

$$e^{-i\beta J_y/\hbar} = \hat{I} + \frac{1}{\mathcal{I}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & \mathcal{I} & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} (\cos \beta - 1) - i \frac{i}{\sqrt{\mathcal{I}}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \sin \beta \quad (421-7)$$

یا

$$d^{(\mathcal{I})}(\beta) = \begin{pmatrix} d_{11}^{(\mathcal{I})} & d_{10}^{(\mathcal{I})} & d_{1-1}^{(\mathcal{I})} \\ d_{01}^{(\mathcal{I})} & d_{00}^{(\mathcal{I})} & d_{0-1}^{(\mathcal{I})} \\ d_{-11}^{(\mathcal{I})} & d_{-10}^{(\mathcal{I})} & d_{-1-1}^{(\mathcal{I})} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\mathcal{I}}(1 + \cos \beta) & -\frac{1}{\sqrt{\mathcal{I}}} \sin \beta & \frac{1}{\mathcal{I}}(1 - \cos \beta) \\ \frac{1}{\sqrt{\mathcal{I}}} \sin \beta & \cos \beta & -\frac{1}{\sqrt{\mathcal{I}}} \sin \beta \\ \frac{1}{\mathcal{I}}(1 - \cos \beta) & \frac{1}{\sqrt{\mathcal{I}}} \sin \beta & \frac{1}{\mathcal{I}}(1 + \cos \beta) \end{pmatrix} \quad (422-7)$$

را به دست می‌آوریم. چون $\frac{1}{\sqrt{2}}(1 + \cos \beta) = \cos^2(\beta/2)$ و $\frac{1}{\sqrt{2}}(1 - \cos \beta) = \sin^2(\beta/2)$ است، داریم:

$$d^{(1)}(\beta) = e^{-i\beta \hat{J}_y / \hbar} = \begin{pmatrix} \cos^2(\beta/2) & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin(\beta) & \sin^2(\beta/2) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin(\beta) & \cos(\beta) & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin(\beta) \\ \sin^2(\beta/2) & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin(\beta) & \cos^2(\beta/2) \end{pmatrix} \quad (۴۲۳-۷)$$

هنگامی که بخواهیم ماتریس $d^{(j)}(\beta)$ را به‌ازای مقدارهای بزرگ j به دست آوریم، این روش بسیار مشکل می‌شود. در مسأله‌ی حل شده‌ی ۷-۱۰، قصد داریم تا روش ساده‌تری برای به‌دست آوردن $d^{(j)}(\beta)$ به‌ازای مقدارهای بزرگ‌تر j ارائه کنیم. این روش بر اساس جمع تکانه‌های زاویه‌ای است.

مسأله‌ی ۷-۱۰

(الف) از رابطه‌ی

$$d_{mm'}^{(j)}(\beta) = \sum_{m_1 m_2} \sum_{m'_1 m'_2} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle \langle j_1, j_2; m'_1, m'_2 | j, m' \rangle d_{m_1 m'_1}^{(j_1)}(\beta) d_{m_2 m'_2}^{(j_2)}(\beta)$$

همراه با ضریب‌های کلیش-گوردن به‌دست آمده در (۷-۲۰۶) تا (۷-۲۰۹) و عنصرهای ماتریسی

$d^{(1/2)}(\beta)$ و $d^{(1)}(\beta)$ که به ترتیب با (۷-۸۹) و (۷-۴۲۳) داده می‌شوند، برای حالتی که در آن $j_1 = 1$

و $j_2 = \frac{1}{2}$ است، استفاده کنید و عبارت‌های مربوط به عنصرهای ماتریسی $d_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}^{(3/2)}(\beta)$ ، $d_{\frac{1}{2} \frac{3}{2}}^{(3/2)}(\beta)$

و $d_{\frac{3}{2} \frac{1}{2}}^{(3/2)}(\beta)$ ، $d_{\frac{3}{2} \frac{3}{2}}^{(3/2)}(\beta)$ را بیابید.

(ب) از شش عبارت به‌دست آمده در (الف) استفاده کنید و ماتریس $d^{(3/2)}(\beta)$ را به‌دست آورید.

حل

(الف) با استفاده از $\langle 1, \frac{1}{2}; 1, \frac{1}{2} | \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \rangle = \cos(\beta/2)$ و $d_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}^{(1/2)}(\beta) = \cos^2(\beta/2)$ داریم:

$$d_{\frac{3}{2} \frac{3}{2}}^{(3/2)}(\beta) = \left\langle 1, \frac{1}{2}; 1, \frac{1}{2} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right. \right\rangle \left\langle 1, \frac{1}{2}; 1, \frac{1}{2} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right. \right\rangle d_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}^{(1)}(\beta) d_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}^{(1/2)}(\beta) = \cos^3 \left(\frac{\beta}{2} \right) \quad (۴۲۴-۷)$$

به‌صورت مشابه، چون $\langle 1, \frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2} | \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \rangle = \sqrt{2/3}$ و $\langle 1, \frac{1}{2}; 1, -\frac{1}{2} | \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \rangle = 1/\sqrt{3}$

داریم: $d_{\frac{3}{2} \frac{1}{2}}^{(3/2)}(\beta) = -\sin(\beta/2)$ و $d_{\frac{1}{2} \frac{3}{2}}^{(3/2)}(\beta) = -(1/\sqrt{2}) \sin(\beta)$

$$d_{\frac{3}{2} \frac{1}{2}}^{(3/2)}(\beta) = \left\langle 1, \frac{1}{2}; 1, \frac{1}{2} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right. \right\rangle \left\langle 1, \frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right. \right\rangle d_{\frac{1}{2} \frac{0}{2}}^{(1)}(\beta) d_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}^{(1/2)}(\beta) \\ + \left\langle 1, \frac{1}{2}; 1, \frac{1}{2} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right. \right\rangle \left\langle 1, \frac{1}{2}; 1, -\frac{1}{2} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right. \right\rangle d_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}^{(1)}(\beta) d_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}^{(1/2)}(\beta)$$

$$\begin{aligned}
 &= -\frac{1}{\sqrt{3}} \sin \beta \cos \left(\frac{\beta}{2} \right) - \frac{1}{\sqrt{3}} \cos^2 \left(\frac{\beta}{2} \right) \sin \left(\frac{\beta}{2} \right) \\
 &= -\sqrt{3} \sin \left(\frac{\beta}{2} \right) \cos^2 \left(\frac{\beta}{2} \right) \quad (۴۲۵-۷)
 \end{aligned}$$

برای محاسبه‌ی $d_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{(3/2)}(\beta)$ باید از ضریب‌های $\langle 1, \frac{1}{2}; 0, -\frac{1}{2} | \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \rangle = 1/\sqrt{3}$ و $d_{\frac{1}{2}-1}^{(1)}(\beta) = \sin^2(\beta/2)$ همراه با $\langle 1, \frac{1}{2}; -1, \frac{1}{2} | \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \rangle = 1/\sqrt{3}$ استفاده کنیم:

$$\begin{aligned}
 d_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{(3/2)}(\beta) &= \left\langle 1, \frac{1}{2}; 1, \frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle \left\langle 1, \frac{1}{2}; -1, \frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle d_{\frac{1}{2}-1}^{(1)}(\beta) d_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{(1/2)}(\beta) \\
 &\quad + \left\langle 1, \frac{1}{2}; 1, \frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle \left\langle 1, \frac{1}{2}; 0, -\frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle d_{\frac{1}{2}-1}^{(1)}(\beta) d_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{(1/2)}(\beta) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \sin^2 \left(\frac{\beta}{2} \right) \cos \left(\frac{\beta}{2} \right) + \frac{1}{\sqrt{3}} \sin \beta \sin \left(\frac{\beta}{2} \right) \quad (۴۲۶-۷) \\
 &= \sqrt{3} \sin^2 \left(\frac{\beta}{2} \right) \cos \left(\frac{\beta}{2} \right)
 \end{aligned}$$

برای $d_{\frac{1}{2}-\frac{3}{2}}^{(3/2)}(\beta)$ داریم:

$$\begin{aligned}
 d_{\frac{1}{2}-\frac{3}{2}}^{(3/2)}(\beta) &= \left\langle 1, \frac{1}{2}; 1, \frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle \left\langle 1, \frac{1}{2}; -1, -\frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle d_{\frac{1}{2}-1}^{(1)}(\beta) d_{\frac{1}{2}-\frac{3}{2}}^{(1/2)}(\beta) \\
 &= -\sin^2 \left(\frac{\beta}{2} \right) \quad (۴۲۷-۷)
 \end{aligned}$$

زیرا $d_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{(1/2)}(\beta) = -\sin(\beta/2)$ و $d_{\frac{1}{2}-1}^{(1)}(\beta) = \sin^2(\beta/2)$ ، $\langle 1, \frac{1}{2}; -1, -\frac{1}{2} | \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \rangle = 1$ است.

برای محاسبه‌ی $d_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{(3/2)}(\beta)$ باید از ضریب‌های $\langle 1, \frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2} | \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \rangle = 1/\sqrt{3}$ و $\langle 1, \frac{1}{2}; 1, -\frac{1}{2} | \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \rangle = 1/\sqrt{3}$ استفاده کنیم:

$$\begin{aligned}
 d_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{(3/2)}(\beta) &= \left\langle 1, \frac{1}{2}; 1, -\frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle 1, \frac{1}{2}; 1, -\frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle d_{\frac{1}{2}-1}^{(1)}(\beta) d_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{(1/2)}(\beta) \\
 &\quad + \left\langle 1, \frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle 1, \frac{1}{2}; 1, -\frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle d_{\frac{1}{2}-1}^{(1)}(\beta) d_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{(1/2)}(\beta) \\
 &\quad + \left\langle 1, \frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle 1, \frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle d_{\frac{1}{2}-1}^{(1)}(\beta) d_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{(1/2)}(\beta) \\
 &\quad + \left\langle 1, \frac{1}{2}; 1, -\frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle 1, \frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle d_{\frac{1}{2}-1}^{(1)}(\beta) d_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{(1/2)}(\beta) \\
 &= \frac{1}{3} \cos^2 \left(\frac{\beta}{2} \right) - \frac{1}{3} \sin(\beta) \sin \left(\frac{\beta}{2} \right) + \frac{2}{3} \cos(\beta) \cos \left(\frac{\beta}{2} \right)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{1}{3} \sin(\beta) \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \\
 & = \left[3 \cos^2\left(\frac{\beta}{2}\right) - 2 \right] \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) \\
 & = \frac{1}{2} (3 \cos \beta - 1) \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) \quad (۴۲۸-۷)
 \end{aligned}$$

به صورت مشابه، داریم:

$$\begin{aligned}
 d_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{(3/2)}(\beta) & = \left\langle 1, \frac{1}{2}; 1, -\frac{1}{2} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle 1, \frac{1}{2}; -1, \frac{1}{2} \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle d_{1-1}^{(1)}(\beta) d_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{(1/2)}(\beta) \right. \\
 & + \left\langle 1, \frac{1}{2}; 1, -\frac{1}{2} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle 1, \frac{1}{2}; 0, -\frac{1}{2} \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle d_{10}^{(1)}(\beta) d_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{(1/2)}(\beta) \right. \\
 & + \left\langle 1, \frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle 1, \frac{1}{2}; -1, \frac{1}{2} \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle d_{0-1}^{(1)}(\beta) d_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{(1/2)}(\beta) \right. \\
 & + \left. \left\langle 1, \frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle 1, \frac{1}{2}; 0, -\frac{1}{2} \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle d_{00}^{(1)}(\beta) d_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{(1/2)}(\beta) \right. \right. \\
 & = \frac{1}{3} \sin^2\left(\frac{\beta}{2}\right) - \frac{1}{3} \sin(\beta) \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) - \frac{1}{3} \sin(\beta) \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) \\
 & - \frac{2}{3} \cos(\beta) \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \\
 & = - \left[3 \cos^2\left(\frac{\beta}{2}\right) - 1 \right] \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \\
 & = -\frac{1}{2} (3 \cos \beta + 1) \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \quad (۴۲۹-۷)
 \end{aligned}$$

(ب) با استفاده از ویژگی‌های تابع d فهرست شده در (۷-۶۷)، می‌توان ده عنصر ماتریسی باقیمانده‌ی

$$d_{m'm}^{(j)}(\beta) = \text{با استفاده از } d_{m'm}^{(j)}(\beta) \text{ را از شش عنصر به دست آمده در بالا به دست آورد. به عنوان مثال،}$$

$$(-1)^{m'-m} d_{-m'-m}^{(j)}(\beta) \text{ می‌توانیم ثابت کنیم که}$$

$$d_{-\frac{3}{2}-\frac{3}{2}}^{(3/2)}(\beta) = d_{\frac{3}{2}\frac{3}{2}}^{(3/2)}(\beta), \quad d_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{(3/2)}(\beta) = d_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^{(3/2)}(\beta), \quad d_{-\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}^{(3/2)}(\beta) = -d_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}}^{(3/2)}(\beta) \quad (۴۳۰-۷)$$

$$d_{-\frac{3}{2}\frac{1}{2}}^{(3/2)}(\beta) = d_{\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}^{(3/2)}(\beta), \quad d_{-\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^{(3/2)}(\beta) = -d_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{(3/2)}(\beta), \quad d_{-\frac{1}{2}-\frac{3}{2}}^{(3/2)}(\beta) = -d_{\frac{1}{2}\frac{3}{2}}^{(3/2)}(\beta) \quad (۴۳۱-۷)$$

به صورت مشابه، با استفاده از $d_{m'm}^{(j)}(\beta) = (-1)^{m'-m} d_{mm'}^{(j)}(\beta)$ می‌توانیم چهار عنصر باقیمانده را به دست آوریم:

$$d_{\frac{1}{2}\frac{3}{2}}^{(3/2)}(\beta) = -d_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}}^{(3/2)}(\beta), \quad d_{-\frac{1}{2}\frac{3}{2}}^{(3/2)}(\beta) = d_{\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}^{(3/2)}(\beta) \quad (۴۳۲-۷)$$

$$d_{\frac{1}{2}-\frac{3}{2}}^{(3/2)}(\beta) = d_{-\frac{3}{2}\frac{1}{2}}^{(3/2)}(\beta), \quad d_{-\frac{1}{2}-\frac{3}{2}}^{(3/2)}(\beta) = -d_{\frac{1}{2}\frac{3}{2}}^{(3/2)}(\beta) \quad (۴۳۳-۷)$$

با گردآوری شش عنصر ماتریسی محاسبه شده در (الف) همراه با ده عنصر به دست آمده در بالا، ماتریس $d^{(3/2)}(\beta)$ را به دست می‌آوریم:

$$\begin{pmatrix} \cos^2\left(\frac{\beta}{2}\right) & -\sqrt{3}\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)\cos^2\left(\frac{\beta}{2}\right) & \sqrt{3}\sin^2\left(\frac{\beta}{2}\right)\cos\left(\frac{\beta}{2}\right) & -\sin^2\left(\frac{\beta}{2}\right) \\ \sqrt{3}\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)\cos^2\left(\frac{\beta}{2}\right) & \frac{1}{2}(3\cos\beta - 1)\cos\left(\frac{\beta}{2}\right) & -\frac{1}{2}(3\cos\beta + 1)\cos\left(\frac{\beta}{2}\right) & \sqrt{3}\sin^2\left(\frac{\beta}{2}\right)\cos\left(\frac{\beta}{2}\right) \\ \sqrt{3}\sin^2\left(\frac{\beta}{2}\right)\cos\left(\frac{\beta}{2}\right) & \frac{1}{2}(3\cos\beta + 1)\sin\left(\frac{\beta}{2}\right) & \frac{1}{2}(3\cos\beta - 1)\cos\left(\frac{\beta}{2}\right) & -\sqrt{3}\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)\cos^2\left(\frac{\beta}{2}\right) \\ \sin^2\left(\frac{\beta}{2}\right) & \sqrt{3}\sin^2\left(\frac{\beta}{2}\right)\cos\left(\frac{\beta}{2}\right) & \sqrt{3}\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)\cos^2\left(\frac{\beta}{2}\right) & \cos^2\left(\frac{\beta}{2}\right) \end{pmatrix} \quad (۴۳۴-۷)$$

که می‌توان آن را به ماتریس زیر کاهش داد:

$$d^{3/2}(\beta) = \frac{\sin\beta}{2} \begin{pmatrix} \frac{\cos^2(\beta/2)}{\sin(\beta/2)} & -\sqrt{3}\cos\left(\frac{\beta}{2}\right) & \sqrt{3}\sin\left(\frac{\beta}{2}\right) & -\frac{\sin^2(\beta/2)}{\cos(\beta/2)} \\ \sqrt{3}\cos\left(\frac{\beta}{2}\right) & \frac{2\cos\beta - 1}{2\sin(\beta/2)} & -\frac{2\cos\beta + 1}{2\cos(\beta/2)} & \sqrt{3}\sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \\ \sqrt{3}\sin\left(\frac{\beta}{2}\right) & \frac{2\cos\beta + 1}{\cos(\beta/2)} & \frac{2\cos\beta - 1}{2\sin(\beta/2)} & -\sqrt{3}\cos\left(\frac{\beta}{2}\right) \\ \frac{\sin^2(\beta/2)}{\cos(\beta/2)} & \sqrt{3}\sin\left(\frac{\beta}{2}\right) & \sqrt{3}\cos\left(\frac{\beta}{2}\right) & \frac{\cos^2(\beta/2)}{\sin(\beta/2)} \end{pmatrix} \quad (۴۳۵-۷)$$

با پیروی از روش استفاده شده در این مسأله، اصولاً می‌توانیم ماتریس هر تابع d را بیابیم. به عنوان مثال، با استفاده از ماتریس‌های $d^{(1)}$ و $d^{(1/2)}$ همراه با ضرب‌های کلیش‌گوردن حاصل از جمع $j_1 = 1$ و $j_2 = 1$ می‌توانیم ماتریس $d^{(2)}(\beta)$ را بیابیم.

مسأله‌ی ۷-۱۱

دو ذره‌ی غیریکسان، هریک با تکانه‌ی زاویه‌ای ۱ را در نظر بگیرید که هامیلتونی آنها به صورت زیر است:

$$\hat{H} = \frac{\varepsilon_1}{\hbar^2} (\hat{L}_1 + \hat{L}_2) \cdot \hat{L}_2 + \frac{\varepsilon_2}{\hbar^2} (\hat{L}_z + \hat{L}_{2z})^2$$

که در آن ε_1 و ε_2 ثابت‌هایی با بعد انرژی هستند. ترازهای انرژی و واگنی‌های آنها را برای آن دسته از حالت‌هایی از سیستم که تکانه‌ی زاویه‌ای کل آنها برابر با $2\hbar$ است، بیابید.

حل

تکانه‌ی زاویه‌ای کل سیستم از جفت کردن $l_1 = 1$ و $l_2 = 1$ به دست می‌آید: $\hat{L} = \hat{L}_1 + \hat{L}_2$ که به $(\hat{L}^2 - \hat{L}_1^2 - \hat{L}_2^2) = 2\hat{L}_1 \cdot \hat{L}_2$ می‌انجامد و هنگامی که این رابطه در هامیلتونی سیستم وارد شود،

نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\hat{H} = \frac{\varepsilon_1}{\hbar^2} (\hat{L}_1 \cdot \hat{L}_2 + \hat{L}_2^2) + \frac{\varepsilon_2}{\hbar^2} \hat{L}_z^2 = \frac{\varepsilon_1}{2\hbar^2} (\hat{L}^2 - \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2) + \frac{\varepsilon_2}{\hbar^2} \hat{L}_z^2 \quad (۴۳۶-۷)$$

توجه کنید که عملگرهای \hat{H} ، \hat{L}_1^2 ، \hat{L}_2^2 ، \hat{L}_z دو به دو جابه‌جا می‌شوند و ویژه‌حالت‌های مشترک آنها را با $|l, m\rangle$ نمایش می‌دهیم. بنابراین ترازهای انرژی (۴۳۶-۷) از رابطه‌ی زیر به دست می‌آیند:

$$E_{lm} = \frac{\varepsilon_1}{2} [l(l+1) - l_1(l_1+1) + l_2(l_2+1)] + \varepsilon_2 m^2 = \frac{\varepsilon_1}{2} l(l+1) + \varepsilon_2 m^2 \quad (۴۳۷-۷)$$

زیرا $l_1 = l_2 = 1$ است.

محاسبه‌ی $|l, m\rangle$ برحسب حالت‌های $|l_1, l_2; m_1, m_2\rangle = |l_1, l_2; m_1, m_2\rangle$ در مسأله‌ی حل شده‌ی ۷-۳ انجام شد. حالت‌های متناظر با تکانه‌ی زاویه‌ای کل $l = 2$ از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$|2, \pm 2\rangle = |1, 1; \pm 1, \pm 1\rangle, \quad |2, \pm 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 1; \pm 1, 0\rangle + |1, 1; 0, \pm 1\rangle) \quad (۴۳۸-۷)$$

$$|2, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(|1, 1; 1, -1\rangle + 2|1, 1; 0, 0\rangle + |1, 1; -1, 1\rangle) \quad (۴۳۹-۷)$$

از (۴۳۷-۷) می‌بینیم که انرژی متناظر با $l = 2$ و $m = \pm 2$ واگن دوگانه است زیرا حالت‌های $|2, \pm 2\rangle$ دارای انرژی یکسان $E_{2, \pm 2} = 3\varepsilon_1 + 4\varepsilon_2$ هستند. دو حالت $|2, \pm 1\rangle$ نیز واگن‌اند زیرا متناظر با انرژی یکسان $E_{2, \pm 1} = 3\varepsilon_1 + \varepsilon_2$ هستند. انرژی متناظر با $|2, 0\rangle$ واگن نیست: $E_{2, 0} = 3\varepsilon_1$.

۶-۷ تمرین‌ها

۱. نشان دهید که تبدیل خطی $y = Rx$ که در آن

$$R = \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi \\ -\sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix}, \quad y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}, \quad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

است، یک چرخش پادساعتگرد دستگاه مختصات دکارتی $x_1 x_2$ در صفحه‌ی حول مبدا با زاویه‌ی ϕ است.

۲. نشان دهید که توان m ام ماتریس چرخش

$$R(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix}$$

برابر با

$$R^n(\phi) = \begin{pmatrix} \cos(n\phi) & -\sin(n\phi) \\ \sin(n\phi) & \cos(n\phi) \end{pmatrix}$$

است. معنی هندسی این نتیجه چیست؟

۳. از عملگر جابه‌جایی فضایی $U(\hat{A}) = e^{-i\hat{A}\cdot\hat{P}/\hbar}$ که در آن \hat{P} عملگر تکانه‌ی خطی است، استفاده

کنید و نشان دهید که $e^{i\hat{A}\cdot\hat{P}/\hbar}\hat{R}e^{-i\hat{A}\cdot\hat{P}/\hbar} = \hat{R} + \hat{A}$ است.

۴. مؤلفه‌های A_j ($j = x, y, z$) بردار \hat{A} تحت چرخش‌های فضایی به صورت $A'_j = R_{ij}A_j$

تبدیل می‌شوند که در آن R ماتریس چرخش است.

(الف) با استفاده از ناوردایی ضرب نرده‌ای دو بردار (مثلاً $\hat{A}\cdot\hat{B}$) تحت چرخش‌ها، نشان دهید

که سطرها و ستون‌های ماتریس چرخش R نسبت به هم متعامد بهنجارند (یعنی نشان دهید

که $R_{lj}R_{lk} = \delta_{j,k}$ است).

(ب) نشان دهید که ترانهاده‌ی R برابر با وارون R و دترمینان R برابر با ± 1 است.

۵. عملگر متناظر با چرخش به اندازه‌ی زاویه‌ی θ حول محور \mathbf{n} از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$U_{\mathbf{n}}(\theta) = e^{-i\theta \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}/\hbar}$$

نشان دهید که عنصرهای ماتریسی عملگر مکان $\hat{\mathbf{R}}$ به اندازه‌ی یک چرخش بی‌نهایت کوچک مانند

$$\hat{\mathbf{R}}' = \hat{\mathbf{R}} + \theta \mathbf{n} \times \hat{\mathbf{R}}$$

$$U_{\mathbf{n}}^\dagger(\theta) \hat{R}_j U_{\mathbf{n}}(\theta) = \hat{R}_j + \theta (\mathbf{n} \times \hat{\mathbf{R}})_j$$

۶. تابع موج $\psi(\mathbf{r}) = (\sqrt{2}x + \sqrt{2}y + z)f(r)$ یک ذره را در نظر بگیرید که در آن $f(r)$ یک تابع

متقارن کروی است.

(الف) آیا $\psi(\mathbf{r})$ یک ویژه‌تابع \hat{L}^2 است؟ اگر چنین است، ویژه‌مقدار چقدر است؟

(ب) احتمال‌های مربوط به این ذره که در حالت $m_l = -1$ و $m_l = 0$ و $m_l = 1$ یافت شود، چقدر است؟

(پ) اگر $\psi(\mathbf{r})$ یک ویژه‌تابع انرژی با ویژه‌مقدارهای E و هرگاه $f(r) = 3r^2$ باشد آنگاه عبارت

مربوط به پتانسیل $V(r)$ که این ذره تحت تأثیر آن قرار دارد را بیابید.

۷. ذره‌ای را در نظر بگیرید که تابع موج آن به صورت زیر است:

$$\psi(\mathbf{r}) = \left(\frac{1}{\sqrt{5}} Y_{11}(\theta, \varphi) - \frac{1}{5} Y_{1-1}(\theta, \varphi) + \frac{1}{\sqrt{2}} Y_{10}(\theta, \varphi) \right) f(r)$$

که در آن $f(r)$ یک تابع شعاعی بهنجار است یعنی $\int_0^\infty r^2 f^2(r) dr = 1$.

(الف) مقدارهای چشمداشتی \hat{L}^2 ، \hat{L}_x و \hat{L}_z را در این حالت بیابید.

(ب) مقدار چشمداشتی $V(\theta) = 2 \cos^2 \theta$ را در این حالت بیابید.

(پ) احتمال این که ذره در حالت $m_l = 0$ یافت شود را بیابید.

۸. ذره‌ای با اسپین $\frac{1}{2}$ در حالت l ی تکانه‌ی زاویه‌ای مداری (یعنی $l = 2$) است. روی جفت شدگی تکانه‌های

زاویه‌ای مداری و اسپینی این ذره کار کنید و تمام حالت‌ها و ضریب‌های کلبش‌گوردن متناظر را بیابید.

۹. می‌توان هامیلتونی وابسته به اسپین سیستم الکترون-پوزیترون در حضور یک میدان مغناطیسی

یکنواخت در جهت z ($\mathbf{B} = B\mathbf{k}$) را به صورت زیر نوشت:

$$\hat{H} = \lambda \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 + \left(\frac{eB}{mc} \right) (\hat{S}_{1z} - \hat{S}_{2z})$$

که در آن λ یک عدد حقیقی است و \hat{S}_1 و \hat{S}_2 به ترتیب عملگرهای اسپینی مربوط به الکترون

و پوزیترون هستند.

(الف) اگر تابع اسپینی این سیستم با $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ داده شود آنگاه ویژه‌مقدارهای انرژی و ویژه‌بردارهای

متناظر آنها را بیابید.

(ب) قسمت (الف) را برای حالتی که در آن $\lambda = 0$ ولی $B \neq 0$ است، تکرار کنید.

(پ) قسمت (الف) را برای حالتی که در آن $B = 0$ ولی $\lambda \neq 0$ است، تکرار کنید.

۱۰. الف) نشان دهید که $e^{-i\pi\hat{J}_z/2}e^{-i\pi\hat{J}_x}e^{i\pi\hat{J}_z/2} = e^{-i\pi\hat{J}_y}$ است.

ب) رابطه‌ی $\hat{J}_-e^{-i\pi\hat{J}_x} = e^{-i\pi\hat{J}_x}\hat{J}_+$ را ثابت کنید و سپس نشان دهید که

$$e^{-i\pi\hat{J}_x}|j, m\rangle = e^{-i\pi j}|j, -m\rangle$$

پ) با استفاده از الف) و ب) نشان دهید که $e^{-i\pi\hat{J}_y}|j, m\rangle = (-1)^{j-m}|j, -m\rangle$

۱۱. با استفاده از رابطه‌های جابه‌جایی بین ماتریس‌های پائولی، نشان دهید که

$$e^{i\alpha\sigma_y}\sigma_x e^{-i\alpha\sigma_y} = \sigma_x \cos(2\alpha) + \sigma_z \sin(2\alpha) \quad \text{الف)}$$

$$e^{i\alpha\sigma_z}\sigma_x e^{-i\alpha\sigma_z} = \sigma_x \cos(2\alpha) - \sigma_y \sin(2\alpha) \quad \text{ب)}$$

$$e^{i\alpha\sigma_x}\sigma_y e^{-i\alpha\sigma_x} = \sigma_y \cos(2\alpha) - \sigma_z \sin(2\alpha) \quad \text{پ)}$$

۱۲. الف) نشان دهید که \hat{J}_x ، \hat{J}_y و \hat{J}_z تحت یک چرخش (متناهی) به اندازه‌ی زاویه‌ی α حول محور

x چگونه تبدیل می‌شوند.

ب) با استفاده از نتیجه‌های قسمت الف)، تعیین کنید که چگونه عملگر تکانه‌ی زاویه‌ای \hat{J} تحت این

چرخش تبدیل می‌شود.

۱۳. الف) نشان دهید که چگونه عملگر \hat{J}_\pm تحت چرخش به اندازه‌ی زاویه‌ی π حول محور x تبدیل می‌شود.

ب) از نتیجه‌ی قسمت الف) استفاده کنید و نشان دهید که $\hat{J}_\pm e^{-i\pi\hat{J}_x/\hbar} = e^{-i\pi\hat{J}_x/\hbar}\hat{J}_\mp$

۱۴. یک چرخش متناهی به اندازه‌ی زاویه‌ی α حول محور \mathbf{n} را در نظر بگیرید که بردار یکه‌ی \mathbf{a} را به

بردار یکه‌ی دیگر \mathbf{b} تبدیل می‌کند. نشان دهید که $e^{-i\beta\hat{J}_b/\hbar} = e^{i\alpha\hat{J}_n/\hbar}e^{-i\beta\hat{J}_a/\hbar}e^{-i\alpha\hat{J}_n/\hbar}$

$$15. \text{ الف) نشان دهید که } e^{i\pi\hat{J}_y/2\hbar}\hat{J}_xe^{-i\pi\hat{J}_y/2\hbar} = \hat{J}_z$$

ب) همچنین نشان دهید که $e^{i\pi\hat{J}_y/2\hbar}e^{i\alpha\hat{J}_x/\hbar}e^{-i\pi\hat{J}_y/2\hbar} = e^{i\alpha\hat{J}_z/\hbar}$

پ) به ازای هر عملگر برداری $\hat{\mathbf{A}}$ نشان دهید که $e^{i\alpha\hat{J}_z/\hbar}\hat{\mathbf{A}}_xe^{-i\alpha\hat{J}_z/\hbar} = \hat{\mathbf{A}}_x \cos \alpha + \hat{\mathbf{A}}_y \sin \alpha$

۱۶. با استفاده از $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2$ نشان دهید که

$$d_{mm'}^{(j)}(\beta) = \sum_{m_1 m_2} \sum_{m'_1 m'_2} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle \langle j_1, j_2; m'_1, m'_2 | j, m' \rangle d_{m_1 m'_1}^{(j_1)}(\beta) d_{m_2 m'_2}^{(j_2)}(\beta)$$

۱۷. تانسور $A(\theta, \varphi) = \cos \theta \sin \theta \cos \varphi$ را در نظر بگیرید.

الف) تمام عنصرهای ماتریسی $A_{m'l} = \langle l, m' | A | l, m \rangle$ را به ازای $l = 1$ محاسبه کنید.

ب) $A(\theta, \varphi)$ را برحسب مؤلفه‌های یک تانسور کروی مرتبه‌ی ۲ (یعنی برحسب $Y_{2m}(\theta, \varphi)$) بیان کنید.

پ) دوباره تمام عنصرهای ماتریسی $A_{m'l}$ را محاسبه کنید ولی این بار از قضیه‌ی ویگنر-اکارت

استفاده کنید. این دو نتیجه را با نتیجه‌ی به دست آمده در الف) مقایسه کنید. (می‌توان ضریب‌های

کلش-گوردن را از جدول‌ها به دست آورد).

۱۸. الف) xz/r^2 و $(x^2 - y^2)/r^2$ را برحسب مؤلفه‌های یک تانسور کروی مرتبه‌ی ۲ بیان کنید.

ب) با استفاده از قضیه‌ی ویگنر-اکارت، مقادیرهای $\langle 1, 0 | xz/r^2 | 1, 1 \rangle$ و $\langle 1, 1 | (x^2 - y^2)/r^2 | 1, 1 \rangle$

را محاسبه کنید.

۱۹. نشان دهید که $\langle j, m' | e^{-i\beta \hat{J}_y / \hbar} \hat{J}_z e^{i\beta \hat{J}_y / \hbar} | j, m' \rangle = \sum_{m=-j}^{m=j} m^2 |d_{m'm}^{(j)}(\beta)|^2$

۲۰. رد ماتریس چرخش $D^{(1/2)}(\alpha, \beta, \gamma)$ را برای (الف) $\beta = \pi$ و (ب) $\beta = \alpha = \gamma = \pi$ و $\beta = 2\pi$ محاسبه کنید.

۲۱. عملگر گساور چهارقطبی بار q از رابطه‌ی $\hat{Q}_2 = q(3\hat{z}^2 - r^2)$ به دست می‌آید. \hat{Q}_2 را برحسب

یک تانسور کروی تحویل‌ناپذیر مرتبه‌ی ۲ بنویسید و سپس $\langle j, j | \hat{Q}_2 | j, j \rangle$ را برحسب j و عنصر

ماتریسی کاهش یافته‌ی $\langle j || r^2 Y^{(2)} || j \rangle$ بیان کنید. راهنمایی: می‌توانید از ضریب

$$\langle j, 2; m, 0 | j, m \rangle = (-1)^{j-m} [3m^2 - j(j+1)] / \sqrt{(2j-1)j(j+1)(2j+3)}$$

استفاده کنید.

۲۲. رابطه‌های جابه‌جایی زیر را ثابت کنید:

$$[\hat{J}_x, [\hat{J}_x, \hat{T}_q^{(k)}]] = \sum_{q'} T_{q'}^{(k)} \langle k, q' | \hat{J}_x^2 | k, q \rangle \quad (\text{الف})$$

$$[\hat{J}_x, [\hat{J}_x, \hat{T}_q^{(k)}]] + [\hat{J}_y, [\hat{J}_y, \hat{T}_q^{(k)}]] + [\hat{J}_z, [\hat{J}_z, \hat{T}_q^{(k)}]] = k(k+1)\hbar^2 T_q^{(k)} \quad (\text{ب})$$

۲۳. ذره‌ای با اسپین $\frac{1}{2}$ را در نظر بگیرید که دارای تکانه‌ی زاویه‌ای مداری $l = 1$ است. تمام ضریب‌های

کلبش-گوردن مربوط به جمع تکانه‌های زاویه‌ای مداری و اسپینی این ذره را بیابید. راهنمایی: ضریب

کلبش-گوردن $\langle j_1, j_2; j_1, (j_2 - j_1) | j_2, j_2 \rangle$ حقیقی و مثبت است.

۲۴. این مسأله به روش دیگر یافتن عنصرهای ماتریسی $d^{(1)}(\beta)$ می‌پردازد. از رابطه‌ی

$$d_{mm'}^{(j)}(\beta) = \sum_{m_1 m_2} \sum_{m'_1 m'_2} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m \rangle \langle j_1, j_2; m'_1, m'_2 | j, m' \rangle d_{m_1 m'_1}^{(j_1)}(\beta) d_{m_2 m'_2}^{(j_2)}(\beta)$$

برای حالتی که در آن $j_1 = j_2 = \frac{1}{2}$ است، همراه با عنصرهای ماتریسی $d^{(1/2)}(\beta)$ که از (۷-۸۹)

به دست می‌آیند، برای به دست آوردن تمام عنصرهای ماتریسی $d^{(1)}(\beta)$ استفاده کنید.

۲۵. تانسور $A(\theta, \varphi) = \sin^2 \theta \cos(2\varphi)$ را در نظر بگیرید.

(الف) عنصر ماتریسی کاهش یافته‌ی $\langle 2 || Y_2 || 2 \rangle$ را محاسبه کنید. راهنمایی: می‌توانید به صورت

صریح $\langle 2, 1 | Y_2 | 2, 1 \rangle$ را محاسبه کنید و سپس از قضیه‌ی ویگنر-کارت برای محاسبه‌ی دوباره‌ی

آن استفاده نمایید.

(ب) $A(\theta, \varphi)$ را برحسب مؤلفه‌های یک تانسور کروی مرتبه‌ی ۲ (یعنی برحسب $Y_{2m}(\theta, \varphi)$) بیان کنید.

(پ) $\langle 2, m' | A | 2, \pm 1 \rangle = A_{m' \pm 1}$ را به ازای $m' = \pm 2, \pm 1, 0$ محاسبه کنید. ممکن است به

این ضریب کلبش-گوردن نیاز پیدا کنید:

$$\langle j, 2; m, 0 | j, m \rangle = [3m^2 - j(j+1)] / \sqrt{(2j-1)j(j+1)(2j+3)}$$

۲۶. (الف) عنصر ماتریسی کاهش یافته‌ی $\langle 1 || Y_1 || 2 \rangle$ را محاسبه کنید. راهنمایی: برای این کار،

ممکن است به محاسبه‌ی $\langle 1, 0 | Y_1 | 2, 0 \rangle$ به صورت مستقیم و سپس محاسبه‌ی آن از قضیه‌ی

ویگنر-کارت نیاز پیدا کنید.

(ب) با استفاده از قضیه‌ی ویگنر-اکارت و ضریب‌های کلیش-گوردن مربوطه از جدول،
 $\langle 1, m | Y_{1m} | 2, m'' \rangle$

را به‌ازای تمام مقدارهای ممکن m' ، m و m'' محاسبه کنید. راهنمایی: ممکن است انتگرال

$$\int_0^\infty r^3 R_{\gamma 1}^*(r) R_{\gamma 2}(r) dr = \frac{64 a_0}{15 \sqrt{5}} \left(\frac{6}{5}\right)^5$$

و ضریب‌های زیرمفید باشند: $\langle j, 1; m, 0 | (j-1), m \rangle = -\sqrt{(j-m)(j+m)/[j(2j+1)]}$

و $\langle j, 1; (m-1), 1 | (j-1), m \rangle = \sqrt{(j-m)(j-m+1)/[2j(2j+1)]}$

$\langle j, 1; (m+1), -1 | (j-1), m \rangle = \sqrt{(j+m)(j+m+1)/[2j(2j+1)]}$

۲۷. ذره‌ای با اسپین $\frac{1}{2}$ در حالت l تکانه‌ی زاویه‌ای مداری (یعنی $l=2$) است.

(الف) حالت‌های ممکن تکانه‌ی زاویه‌ای کل آن، کدام حالت‌ها هستند؟

(ب) اگر هامیلتونی به صورت $\hat{H} = a + b\hat{L} \cdot \hat{S} + c\hat{L}^2$ باشد که در آن a ، b و c اعدادی ثابتند، آنگاه مقدارهای انرژی را به‌ازای هر یک از حالت‌های متفاوت تکانه‌ی زاویه‌ای کل بیابید. پاسخ خود را برحسب a ، b و c بیان کنید.

۲۸. یک الکترون حالت h را در نظر بگیرید. ضریب‌های کلیش-گوردن مربوط به حالت‌های $\{|j, m\rangle\}$

این الکترون که در ادامه می‌آیند را محاسبه کنید: $\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle$ ، $\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | \frac{1}{2}, \frac{3}{2} \rangle$ و $\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \rangle$.

۲۹. فرض کنید هامیلتونی دو ذره‌ی غیریکسان با اسپین $\frac{1}{2}$ به صورت زیر است:

$$\hat{H} = \frac{\varepsilon_1}{\hbar^2} (\hat{S}_1 + \hat{S}_2) \cdot \hat{S}_1 - \frac{\varepsilon_2}{\hbar} (\hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z})$$

که در آن ε_1 و ε_2 ثابت‌هایی با ابعاد انرژی هستند. ترازهای انرژی و واگنی آنها را بیابید.

۳۰. ترازهای انرژی و واگنی آنها را برای سیستمی از دو ذره‌ی غیریکسان با اسپین $\frac{1}{2}$ و هامیلتونی زیر بیابید:

$$\hat{H} = \frac{\varepsilon_0}{\hbar^2} (\hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2) - \frac{\varepsilon_0}{\hbar} (\hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z})$$

که در آن ε_0 ثابتی با ابعاد انرژی است.

۳۱. دو ذره‌ی غیریکسان با اسپین $\frac{1}{2}$ و هامیلتونی زیر را در نظر بگیرید:

$$\hat{H} = \frac{\varepsilon_0}{\hbar^2} (\hat{S}_1 + \hat{S}_2)^2 + \frac{\varepsilon_0}{\hbar^2} (\hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z})^2$$

که در آن ε_0 ثابتی با ابعاد انرژی است. ترازهای انرژی و واگنی آنها را بیابید.

۳۲. سه ذره‌ی غیریکسان هر یک با اسپین $\frac{1}{2}$ و هامیلتونی آنها به صورت زیر است:

$$\hat{H} = \frac{\varepsilon_1}{\hbar^2} (\hat{S}_1 + \hat{S}_2) \cdot \hat{S}_3 + \frac{\varepsilon_2}{\hbar^2} (\hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z} + \hat{S}_{3z})^2$$

که در آن ε_1 و ε_2 ثابت‌هایی با ابعاد انرژی هستند. ترازهای انرژی و واگنی آنها را بیابید.

۳۳. سیستمی از سه ذره‌ی غیریکسان، هر یک با تکانه‌ی زاویه‌ای $\frac{3}{2}$ را در نظر بگیرید. مقدارهای ممکن اسپین

کل S این سیستم را بیابید و تعداد ویژه‌حالت‌های تکانه‌ی زاویه‌ای متناظر با هر مقدار S را مشخص کنید.

فصل هشتم

ذره‌های یکسان

تا اینجا اساساً با حرکت یک تک‌ذره سروکار داشتیم. اکنون می‌خواهیم بررسی کنیم که چگونه سیستم‌های چندذره‌ای را توصیف نماییم. بر روی بحث پیرامون سیستم‌های با ذره‌های یکسان متمرکز خواهیم شد و مشخص می‌کنیم که چگونه تابع‌های موج آنها را می‌سازیم.

۸-۱ سیستم‌های چندذره‌ای

بسیاری از سیستم‌های فیزیکی (نوکلئون‌ها، هسته‌ها، اتم‌ها، مولکول‌ها، جامدات، شاره‌ها، گازها و ...) شامل چند ذره‌اند و به‌عنوان سیستم‌های چندذره‌ای یا بس‌ذره‌ای شناخته می‌شوند. سیستم‌های اتمی، هسته‌ای و زیرهسته‌ای شامل تعداد متوسطی از ذره‌ها (در حدود ۲ تا 3×10^3 ذره) می‌شوند ولی جامدات، شاره‌ها و گازها سیستم‌هایی بس‌ذره‌ایند زیرا دارای تعداد بسیار زیادی ذره (10^{23}) هستند.

۸-۱-۱ معادله‌ی شرودینگر

پرسشی که در اینجا مطرح می‌شود این است که دینامیک سیستمی با N ذره چگونه توصیف می‌شود؟ در پاسخ باید گفت که می‌توان این توصیف را از تعمیم دینامیک یک تک‌ذره به دست آورد. حالت یک سیستم با N ذره‌ی بدون اسپین (در حال حاضر اسپین ذره‌ها را نادیده می‌گیریم) با تابع موج $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t)$ توصیف می‌شود که در آن $d^3r_1 d^3r_2 \dots d^3r_N$ احتمال یافتن ذره‌ی ۱ در المان حجم d^3r_1 که مرکز آن حول \mathbf{r}_1 ، ذره‌ی ۲ در المان حجم d^3r_2 که مرکز آن حول \mathbf{r}_2 ، ... و ذره‌ی

N در المان حجم d^3r_N که مرکز آن حول \mathbf{r}_N واقع شده است را در زمان t نمایش می‌دهد. شرط بهنجارش حالت سیستم از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\int d^3r_1 \int d^3r_2 \dots \int |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t)|^2 d^3r_N = 1 \quad (۱-۸)$$

تابع موج Ψ مطابق با معادله‌ی شرودینگر وابسته به زمان تحول می‌یابد:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) \quad (۲-۸)$$

شکل \hat{H} از تعمیم دادن هامیلتونی $\hat{\mathbf{P}}^2/(2m) + \hat{V}(\mathbf{r})$ یک ذره به N ذره به دست می‌آید:

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^N \frac{\hat{\mathbf{P}}_j^2}{2m_j} + \hat{V}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) = - \sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_j} \nabla_j^2 + \hat{V}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) \quad (۳-۸)$$

که در آن m_j و $\hat{\mathbf{P}}_j$ جرم و تکانه‌ی ذره‌ی j ام و \hat{V} عملگر متناظر با انرژی پتانسیل کل است (\hat{V} تمام اشکال برهمکنش (داخلی و خارجی)، برهمکنش متقابل بین ذره‌های مختلف یک سیستم و برهمکنش ذره‌ها با دنیای خارج را در خود دارد).

اصولاً می‌توان صورت‌بندی مکانیک کوانتومی برای یک سیستم N ذره‌ای را از صورت‌بندی مربوط به یک ذره نتیجه گرفت. به‌عنوان مثال، عملگرهای متناظر با ذره‌های متفاوت جابه‌جا می‌شوند. رابطه‌های جابه‌جایی بین عملگرهای مکان و تکانه عبارتند از

$$[\hat{X}_j, \hat{P}_{x_k}] = i\hbar \delta_{j,k}, \quad [\hat{X}_j, \hat{X}_k] = [\hat{P}_{x_j}, \hat{P}_{x_k}] = 0 \quad (j, k = 1, 2, 3, \dots, N) \quad (۴-۸)$$

که در آن \hat{X}_j مؤلفه‌ی x عملگر مکان ذره‌ی j ام و \hat{P}_{x_k} مؤلفه‌ی x عملگر تکانه‌ی ذره‌ی k ام است. می‌توان رابطه‌های مشابهی را برای مؤلفه‌های y و z نیز به دست آورد.

حالت‌های مانا

در حالتی که در آن پتانسیل \hat{V} مستقل از زمان است، جواب‌های (۲-۸) از حالت‌های مانا به دست می‌آیند:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) e^{-iEt/\hbar} \quad (۵-۸)$$

که در آن E انرژی کل سیستم و ψ جواب معادله‌ی شرودینگر مستقل از زمان $\hat{H}\psi = E\psi$ است یعنی

$$\left[- \sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_j} \nabla_j^2 + V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \right] \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = E\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (۶-۸)$$

ویژگی‌های حالت‌های مانا برای یک تک‌ذره برای سیستم‌های N ذره‌ای نیز به کار می‌روند. به‌عنوان مثال، چگالی احتمال $\langle \psi | \psi \rangle$ ، چگالی جریان احتمال \mathbf{j} و مقدارهای چشمداشتی عملگرهای مستقل از زمان

پایسته‌اند زیرا به زمان بستگی ندارند:

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle &= \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \\ &= \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \dots \int \psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \hat{A} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) d^3 r_N \quad (7-8) \end{aligned}$$

به خصوص انرژی یک حالت مانا پایسته است.

اتم‌های چندالکترونی

برای روشن شدن موضوع، یک اتم با Z الکترون را در نظر می‌گیریم. اگر \mathbf{R} برای نمایش مکان مرکز جرم هسته استفاده شود آنگاه تابع موج اتم به $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z, \mathbf{R})$ مختصه بستگی دارد، $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z, \mathbf{R})$ آن $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z$ بردارهای مکان Z الکترون‌اند. با چشم‌پوشی از سهم مربوط به تصحیح اسپین-مدار، تصحیح نسبیتی و جمله‌های مشابه، معادله‌ی شرودینگر مستقل از زمان این اتم به صورت زیر است:

$$\begin{aligned} \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^Z \nabla_{\mathbf{r}_i}^2 - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 - \sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}|} + \sum_{i>j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right] \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z, \mathbf{R}) \\ = E\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z, \mathbf{R}) \quad (8-8) \end{aligned}$$

که در آن M جرم هسته و $-\hbar^2 \nabla_{\mathbf{R}}^2 / 2M$ عملگر انرژی جنبشی آن است. جمله‌ی $-\sum_{i=1}^Z Ze^2 / |\mathbf{r}_i - \mathbf{R}|$ برهمکنش جاذبه‌ی کولنی هر الکترون با هسته را نمایش می‌دهد و $\sum_{i>j} e^2 / |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ برهمکنش دافعه‌ی کولنی بین الکترون‌های i ام و j ام و $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ فاصله‌ی بین آنها است. چون این برهمکنش‌ها (ی کولنی) مستقل از زمان‌اند، حالت‌های اتم‌ها مانا هستند.

باید توجه کنیم که معادله‌ی شرودینگر (۳-۸)، (۶-۸) و (۸-۸) همگی معادله‌های دیفرانسیل چندذره‌ای هستند. چون نمی‌توان این معادله‌ها را به معادله‌های تک‌ذره‌ای جدا کرد (اگر این معادله‌ها قابل حل باشند)، حل آنها بسیار دشوار است. برای حالت مهمی که در آن N ذره‌ی سیستم با هم برهمکنش ندارند (که از آن به‌عنوان یک سیستم ذره‌های مستقل یاد می‌شود)، به آسانی می‌توان معادله‌ی شرودینگر را به N معادله‌ی تک‌ذره‌ای کاهش داد (بخش ۳-۱-۸). چگونگی حل دقیق این معادله‌ها را در فصل‌های ۴ و ۶ دیدیم و چگونگی حل تقریبی آنها را در فصل‌های ۹ و ۱۰ خواهیم دید.

۲-۱-۸ تقارن تعویض

اگرچه معمولاً به‌دست آوردن ویژه‌حالت‌های دقیق هامیلتونی چندذره‌ای (۳-۸) غیرممکن است اما هنوز می‌توانیم برخی از ویژگی‌های آنها را به‌وسیله‌ی طرح‌های تقارنی نتیجه بگیریم. فرض کنید ξ_i مختصه‌های (مکان \mathbf{r}_i ، اسپین s_i و هر درجه‌ی آزادی داخلی دیگری از قبیل ایزواسپین، رنگ، طعم) ذره‌ی i ام را نمایش می‌دهد و $\psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N)$ تابع موج سیستم N ذره‌ای را نمایش می‌دهد.

عملگر جایگشت \hat{P}_{ij} (که عملگر تعویض نیز نامیده می‌شود) را به صورت عملگری تعریف می‌کنیم که وقتی روی تابع موج N ذره‌ای $\psi(\xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots, \xi_N)$ اثر می‌کند، ذره‌های i ام و j ام را تعویض می‌کند:

$$\hat{P}_{ij}\psi(\xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots, \xi_N) = \psi(\xi_1, \dots, \xi_j, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N) \quad (۹-۸)$$

که در آن i و j دلخواه‌اند ($i, j = 1, 2, \dots, N$). چون

$$\begin{aligned} \hat{P}_{ji}\psi(\xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots, \xi_N) &= \psi(\xi_1, \dots, \xi_j, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N) \\ &= \hat{P}_{ij}\psi(\xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots, \xi_N) \end{aligned} \quad (۱۰-۸)$$

داریم: $\hat{P}_{ij} = \hat{P}_{ji}$. به صورت کلی، عملگرهای جایگشت جابه‌جا نمی‌شوند:

$$\hat{P}_{ij}\hat{P}_{kl} \neq \hat{P}_{kl}\hat{P}_{ij} \quad \text{یا} \quad [\hat{P}_{ij}, \hat{P}_{kl}] \neq 0 \quad (ij \neq kl) \quad (۱۱-۸)$$

به عنوان مثال، در مورد حالت چهارذره‌ای $e^{-i\xi_1}$ ($\psi(\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4) = 3\xi_4/\xi_2\xi_3$) داریم:

$$\begin{aligned} \hat{P}_{12}\hat{P}_{14}\psi(\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4) &= \hat{P}_{12}\psi(\xi_2, \xi_2, \xi_3, \xi_1) \\ &= \psi(\xi_2, \xi_4, \xi_3, \xi_1) = \frac{3\xi_1}{\xi_4\xi_3} e^{-i\xi_2} \end{aligned} \quad (۱۲-۸)$$

$$\begin{aligned} \hat{P}_{14}\hat{P}_{12}\psi(\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4) &= \hat{P}_{14}\psi(\xi_2, \xi_1, \xi_3, \xi_4) \\ &= \psi(\xi_4, \xi_1, \xi_3, \xi_2) = \frac{3\xi_2}{\xi_1\xi_3} e^{-i\xi_4} \end{aligned} \quad (۱۳-۸)$$

چون دو بار اعمال پیاپی \hat{P}_{ij} تابع موج را تغییر نمی‌دهد:

$$\begin{aligned} \hat{P}_{ij}^2\psi(\xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots, \xi_N) &= \hat{P}_{ij}\psi(\xi_1, \dots, \xi_j, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N) \\ &= \psi(\xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots, \xi_N) \end{aligned} \quad (۱۴-۸)$$

داریم: $\hat{P}_{ij}^2 = 1$ از این رو \hat{P}_{ij} دارای دو ویژه‌مقدار ± 1 است:

$$\hat{P}_{ij}\psi(\xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots, \xi_N) = \pm \psi(\xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots, \xi_N) \quad (۱۵-۸)$$

تابع‌های موج متناظر با ویژه‌مقدار $+1$ نسبت به تعویض جفت (i, j) متقارن‌اند و تابع‌های موج متناظر با -1 پادمقارن‌اند. با نمایش دادن این تابع‌های موج به ترتیب با ψ_s و ψ_a داریم:

$$\psi_s(\xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots, \xi_N) = \psi_s(\xi_1, \dots, \xi_j, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N) \quad (۱۶-۸)$$

$$\psi_a(\xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots, \xi_N) = -\psi_a(\xi_1, \dots, \xi_j, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N) \quad (۱۷-۸)$$

مثال ۱-۸

تقارن تابع‌های زیر را مشخص کنید:

$$\psi(x_1, x_2) = 4(x_1 - x_2)^2 + \frac{1}{x_1^2 + x_2^2} \quad (\text{الف})$$

$$\phi(x_1, x_2) = -\frac{3(x_1 - x_2)}{2(x_1 - x_2)^2 + 7} \quad (\text{ب})$$

$$\chi(x_1, x_2, x_3) = 6x_1x_2x_3 + \frac{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - 1}{2x_1^2 + 2x_2^2 + 2x_3^2 + 5} \quad (\text{پ})$$

$$\Phi(x_1, x_2) = \frac{1}{x_2 + 3} e^{-|x_1|} \quad (\text{ت})$$

حل

(الف) تابع $\psi(x_1, x_2)$ متقارن است زیرا $\psi(x_2, x_1) = \psi(x_1, x_2)$.

(ب) تابع $\phi(x_1, x_2)$ پادمقارن است زیرا $\phi(x_2, x_1) = -\phi(x_1, x_2)$ و هنگامی که $x_1 = x_2$ است،

$\phi(x_1, x_1) = 0$ صفر می‌شود.

(پ) تابع $\chi(x_1, x_2, x_3)$ متقارن است زیرا

$$\chi(x_1, x_2, x_3) = \chi(x_1, x_3, x_2) = \chi(x_2, x_1, x_3) = \chi(x_2, x_3, x_1) \quad (18-8)$$

$$= \chi(x_3, x_1, x_2) = \chi(x_3, x_2, x_1)$$

(ت) تابع $\Phi(x_2, x_1)$ نه متقارن و نه پادمقارن است زیرا

$$\Phi(x_2, x_1) = \frac{1}{x_1 + 3} e^{-|x_2|} \neq \pm \Phi(x_1, x_2)$$

۳-۱-۸ سیستم‌های متشکل از ذره‌های غیربرهمکنشی تمایزپذیر

برای سیستمی متشکل از N ذره‌ی غیربرهمکنشی که تمایزپذیرند (هر ذره دارای جرم متفاوت m_i است و پتانسیل متفاوت $\hat{V}_i(\xi_i)$ را تجربه می‌کند)، پتانسیل از رابطه‌ی

$$\hat{V}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \sum_{i=1}^N \hat{V}_i(\xi_i) \quad (19-8)$$

و هامیلتونی این سیستم متشکل از N ذره‌ی مستقل از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i = \sum_{i=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + \hat{V}_i(\xi_i) \right] \quad (20-8)$$

که در آن $\hat{H}_i = -\hbar^2 \nabla_i^2 / 2m_i + \hat{V}_i(\xi_i)$ هامیلتونی ذره‌ی i ام است و به عنوان هامیلتونی تک‌ذره شناخته می‌شود. هامیلتونی ذره‌های متفاوت جابه‌جا می‌شوند: $[\hat{H}_i, \hat{H}_j] = 0$ زیرا $[\hat{P}_i, \hat{P}_j] = 0$.

معادله‌ی شرودینگر سیستم N ذره‌ای

$$\hat{H}\psi_{n_1, n_2, \dots, n_N}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = E_{n_1, n_2, \dots, n_N}\psi_{n_1, n_2, \dots, n_N}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) \quad (21-8)$$

به N معادله‌ی تک‌ذره‌ای جدا می‌شود:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_i}\nabla_i^2 + \hat{V}_i(\xi_i) \right] \psi_{n_i}(\xi_i) = \varepsilon_{n_i}\psi_{n_i}(\xi_i) \quad (22-8)$$

با

$$E_{n_1, n_2, \dots, n_N} = \varepsilon_{n_1} + \varepsilon_{n_2} + \dots + \varepsilon_{n_N} = \sum_{i=1}^N \varepsilon_{n_i} \quad (23-8)$$

و

$$\psi_{n_1, n_2, \dots, n_N}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \psi_{n_1}(\xi_1)\psi_{n_2}(\xi_2)\dots\psi_{n_N}(\xi_N) = \prod_{i=1}^N \psi_{n_i}(\xi_i) \quad (24-8)$$

ملاحظه می‌کنیم که وقتی برهمکنش‌ها نادیده گرفته می‌شوند، معادله‌ی شرودینگر N ذره‌ای به N معادله‌ی شرودینگر تک‌ذره‌ای جدا می‌شود. جواب‌های این معادله‌ها انرژی‌های ε_i و حالت‌های $\psi_{n_i}(\xi_i)$ تک‌ذره را نتیجه می‌دهند. حالت‌های تک‌ذره به‌عنوان اوربیتال نیز شناخته می‌شوند. انرژی کل برابر با مجموع انرژی‌های تک‌ذره و تابع موج کل برابر با حاصل ضرب اوربیتال‌ها است. عدد n_i مجموعه‌ی تمام عددهای کوانتومی ذره‌ی i ام را نشان می‌دهد. بسته به این که ذره‌ها در فضای یک، دو یا سه بعدی حرکت می‌کنند، به‌وضوح، هر ذره نیازمند یک، دو یا سه عدد کوانتومی برای توصیف کامل آن است. اگر اسپین در نظر گرفته شود آنگاه باید عدد کوانتومی دیگری را نیز اضافه کنیم. به‌عنوان مثال، اگر ذره‌ها در یک نوسانگر هماهنگ یک بعدی حرکت کنند آنگاه n_i عدد اشغال ذره‌ی i ام را نشان می‌دهد ولی اگر ذره‌ها الکترون‌های یک اتم باشند آنگاه n_i نشان‌دهنده‌ی چهار عدد کوانتومی است: عددهای کوانتومی شعاعی، مداری، مغناطیسی و اسپینی $n_i l_i m_i m_{s_i}$.

مثال ۸-۲

ترازهای انرژی و تابع‌های موج یک سیستم متشکل از چهار ذره‌ی بدون اسپین تمایزپذیر که در یک چاه پتانسیل نامتناهی به اندازه‌ی a قرار دارند را بیابید. از این نتیجه استفاده کنید و انرژی و تابع موج حالت پایه و نخستین حالت برانگیخته را نتیجه بگیرید.

حل

هر ذره در پتانسیلی حرکت می‌کند که با $\hat{V}_i(x_i) = 0$ به‌ازای $0 \leq x_i \leq a$ و $\hat{V}_i(x_i) = \infty$ به‌ازای سایر مقادیر x_i تعریف می‌شود. در این حالت معادله‌ی شرودینگر سیستم چهار ذره‌ای

$$\sum_{i=1}^4 \left[-\frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{d^2}{dx_i^2} \right] \psi_{n_1, n_2, n_3, n_4}(x_1, x_2, x_3, x_4) = E_{n_1, n_2, n_3, n_4} \psi_{n_1, n_2, n_3, n_4}(x_1, x_2, x_3, x_4) \quad (25-8)$$

به چهار معادله‌ی تک‌ذره‌ای جدا می‌شود:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{d^2 \psi_{n_i}(x_i)}{dx_i^2} = \varepsilon_{n_i} \psi_{n_i}(x_i) \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (26-8)$$

$$\varepsilon_{n_i} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n_i^2}{2m_i a^2}, \quad \psi_{n_i}(x_i) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n_i \pi}{a} x_i\right) \quad (27-8)$$

انرژی و تابع موج کل از رابطه‌های زیر به‌دست می‌آیند:

$$E_{n_1, n_2, n_3, n_4} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2a^2} \left(\frac{n_1^2}{m_1} + \frac{n_2^2}{m_2} + \frac{n_3^2}{m_3} + \frac{n_4^2}{m_4} \right) \quad (28-8)$$

$$\psi_{n_1, n_2, n_3, n_4}(x_1, x_2, x_3, x_4) = \frac{2}{a^2} \sin\left(\frac{n_1 \pi}{a} x_1\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi}{a} x_2\right) \sin\left(\frac{n_3 \pi}{a} x_3\right) \sin\left(\frac{n_4 \pi}{a} x_4\right) \quad (29-8)$$

حالت پایه متناظر با حالتی است که در آن تمام چهار ذره اوربیتال‌های حالت پایه‌ی مربوط به خود را اشغال می‌کنند ($n_1 = n_2 = n_3 = n_4 = 1$). بنابراین انرژی و تابع موج حالت پایه از رابطه‌های زیر به‌دست می‌آیند:

$$E_{1,1,1,1} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2a^2} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} + \frac{1}{m_3} + \frac{1}{m_4} \right) \quad (30-8)$$

$$\psi_{1,1,1,1}(x_1, x_2, x_3, x_4) = \frac{2}{a^2} \sin\left(\frac{\pi}{a} x_1\right) \sin\left(\frac{\pi}{a} x_2\right) \sin\left(\frac{\pi}{a} x_3\right) \sin\left(\frac{\pi}{a} x_4\right) \quad (31-8)$$

پرداختن به نخستین حالت برانگیخته تا حدی دشوار است. چون این حالت متناظر با تراز انرژی بالاتر بعدی سیستم است، بنابراین باید متناظر با حالتی باشد که در آن ذره‌ی دارای جرم سنگین‌تر نخستین حالت برانگیخته‌ی خود را اشغال می‌کند در حالی که سه ذره‌ی دیگر در حالت‌های پایه‌ی خود باقی می‌مانند. برای روشن شدن موضوع، اگر ذره‌ی سوم بیشترین جرم را داشته باشد آنگاه نخستین حالت برانگیخته متناظر با بیکربندی $1 = n_1 = n_2 = n_4$ و $n_3 = 2$ است. آنگاه انرژی و تابع موج نخستین حالت برانگیخته از رابطه‌های زیر به‌دست می‌آیند:

$$E_{1,1,2,1} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2a^2} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} + \frac{4}{m_3} + \frac{1}{m_4} \right) \quad (32-8)$$

$$\psi_{1,1,2,1}(x_1, x_2, x_3, x_4) = \frac{2}{a^2} \sin\left(\frac{\pi}{a} x_1\right) \sin\left(\frac{\pi}{a} x_2\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a} x_3\right) \sin\left(\frac{\pi}{a} x_4\right) \quad (33-8)$$

با ادامه‌ی این روش می‌توانیم طیف انرژی کامل این سیستم را به‌دست آوریم.

۸-۲ سیستم‌های متشکل از ذره‌های یکسان

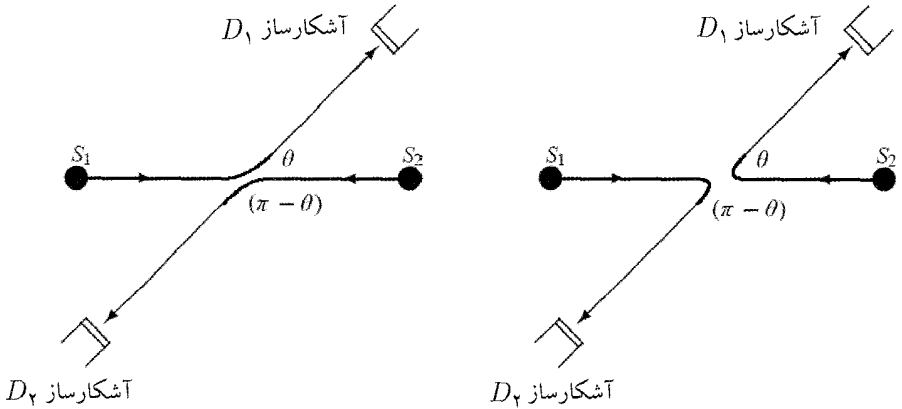
۸-۲-۱ ذره‌های یکسان در مکانیک کلاسیک و مکانیک کوانتومی

در مکانیک کلاسیک هنگامی که یک سیستم از ذره‌های یکسانی ساخته می‌شود، شناسایی و تمییز هر ذره از ذره‌های دیگر امکان‌پذیر است. یعنی اگرچه تمام ذره‌ها دارای ویژگی‌های فیزیکی یکسانی هستند، با این حال می‌توانیم هر ذره‌ی کلاسیکی را «برچسب» بزنیم و حرکت آن را در امتداد یک مسیر دنبال کنیم. به عنوان مثال، می‌توان هر ذره را به صورتی متفاوت با دیگر ذره‌ها رنگ کرد از این رو در هر لحظه می‌توانیم مسیر هر ذره را جداگانه دنبال کنیم. بنابراین ذره‌های کلاسیکی یکسان، شناسه‌ی خود را از دست نمی‌دهند و نمایان پذیرند.

اما در مکانیک کوانتومی ذره‌های یکسان واقعاً تمییزناپذیرند. پایه‌ی مربوط به این بحث دو جنبه دارد. ابتدا این که برای توصیف یک ذره نمی‌توانیم بیشتر از یک مجموعه‌ی کامل از مشاهده پذیرهای جابه‌جا شونده را مشخص کنیم. به خصوص، سازوکاری برای برچسب زدن ذره‌ها به صورتی که در مکانیک کلاسیک انجام می‌شود، وجود ندارد. دوم این که به دلیل اصل عدم قطعیت، مفهوم مسیر یک ذره معنی خود را از دست می‌دهد. حتی اگر مکان یک ذره در هر لحظه به صورت دقیق معلوم باشد آنگاه مشخص کردن مختصات آن در لحظه‌ی بعدی امکان‌پذیر نیست. بنابراین ذره‌های یکسان شناسه‌ی (منفرد بودن) خود را در مکانیک کوانتومی از دست می‌دهند.

برای روشن شدن موضوع، آزمایشی را در نظر بگیرید که در آن دو ذره‌ی یکسان را پراکنده می‌کنیم. همانطور که در شکل ۸-۱ نشان داده شده است، پس از این که ذره‌های ۱ و ۲ (که از چشمه‌های S_1 و S_2 شلیک شده‌اند) پراکنده می‌شوند، تمایز بین ذره‌های اول و دوم امکان‌پذیر نیست. یعنی به صورت تجربی نمی‌توانیم شناسه‌ی ذره‌هایی که توسط هر یک از آشکارسازها جمع‌آوری می‌شوند را تعیین کنیم. به عنوان مثال، به هیچ عنوان نمی‌توانیم بگوییم ذره‌ای که به آشکارساز D_1 رسیده است، ذره‌ی ۱ است یا ذره‌ی ۲. تنها می‌توانیم بگوییم که یک ذره به آشکارساز D_1 و ذره‌ی دیگر به آشکارساز D_2 رسیده است ولی هیچ اطلاعاتی پیرامون شناسه‌های مربوط به آنها در اختیار ما نیست. هیچ سازوکار تجربی وجود ندارد که به ما امکان دهد تا حرکت هر ذره از زمانی که از چشمه شلیک می‌شود تا زمانی که به آشکارساز می‌رسد را دنبال کنیم. این آزمایش نشان می‌دهد که منفرد بودن یک ذره‌ی میکروسکوپی در لحظه‌ای که با ذره‌های مشابه دیگر آمیخته می‌شود، از بین می‌رود. پس از بحث پیرامون مفهوم تمایزناپذیری یک سیستم دودزهای، حال بیایید به مطالعه‌ی این مفهوم روی سیستم‌های بزرگ‌تر پردازیم. برای این کار، سیستمی از N ذره‌ی یکسان را در نظر بگیرید که تابع موج آنها برابر با $\psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N)$ است.

از لحظه‌ای که این N ذره با یکدیگر آمیخته می‌شوند، هیچ آزمایشی نمی‌تواند تعیین کند که کدام ذره دارای مختصه‌ی ξ_1 یا کدام ذره دارای مختصه‌ی ξ_2 است و به همین ترتیب. به صورت تجربی، مشخص کردن شناسه‌ی ذره‌ای که در ξ_1 یا در ξ_2 واقع شده است امکان‌پذیر نیست و به همین ترتیب. تنها اندازه‌گیری‌هایی که می‌توانیم انجام دهیم، آن دسته از اندازه‌گیری‌هایی هستند که احتمال آن که یک ذره‌ی



شکل ۱-۸ هنگام پراکندگی دو ذره‌ی یکسان در چارچوب مرکز جرم، نمی‌توان با اطمینان پیش‌بینی کرد که ذره‌ها مطابق با فرآیند نخست پراکنده می‌شوند یا مطابق با فرآیند دوم. به‌عنوان مثال، نمی‌توانیم بگوییم که ذره‌ی شلیک شده از منبع S_1 به آشکارساز D_1 یا D_2 می‌رسد.

مشخص در ξ_1 و دیگری در ξ_2 واقع شده باشد را مشخص می‌کنند و به‌همین ترتیب. ولی هرگز نمی‌توانیم مشخص کنیم که هر یک از این ذره‌ها کدام ذره است. در نتیجه، با تعویض ذره‌ها، باید احتمال بدون تغییر باقی بماند. به‌عنوان مثال، تعویض ذره‌های i و j تأثیری بر چگالی احتمال ندارد:

$$|\psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots, \xi_N)|^2 = |\psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_j, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N)|^2 \quad (۳۴-۸)$$

از این رو داریم:

$$\psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots, \xi_N) = \pm \psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_j, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N) \quad (۳۵-۸)$$

این بدان معنی است که تابع موج سیستم N ذره‌ی یکسان تحت تعویض یک جفت از ذره‌ها، متقارن یا پادمتقارن است. به الزامات این نتیجه در بخش ۳-۲-۸ خواهیم پرداخت. خواهیم دید که علامت در (۳۵-۸) به اسپین ذره‌ها مربوط می‌شود: علامت منفی متناظر با ذره‌هایی با اسپین نیمه صحیح فرد و علامت مثبت متناظر با ذره‌هایی با اسپین صحیح است یعنی تابع‌های موج ذره‌های با اسپین‌های صحیح متقارن‌اند و تابع‌های موج ذره‌های با اسپین‌های نیمه صحیح فرد پادمتقارن‌اند. در واقع، مشاهده‌های تجربی نشان می‌دهند که در طبیعت، ذره‌ها به دو دسته تقسیم می‌شوند:

- ذره‌های با اسپین صحیح ($S_i = 0, 1\hbar, 2\hbar, 3\hbar, \dots$) مانند فوتون‌ها، پيون‌ها و ذره‌های آلفا. این ذره‌ها بوزون نامیده می‌شوند.

- ذره‌های با اسپین نیمه صحیح فرد ($S_i = \hbar/2, 3\hbar/2, 5\hbar/2, 7\hbar/2, \dots$) مانند کوارک‌ها، الکترون‌ها، پوزیترون‌ها، پروتون‌ها و نوترون‌ها. این ذره‌ها فرمیون نامیده می‌شوند.

یعنی ذره‌های موجود در طبیعت یا بوزون‌اند یا فرمیون.

قبیل از آن که به‌طور کامل به ویژگی‌های بوزون‌ها و فرمیون‌ها پردازیم، بیاید نکات عمده‌ی تقارن تعویض (جایگشت) را ارائه کنیم.

۸-۲-۲ واگنی تبادلی

پرسشی که در اینجا مطرح می‌شود این است که تقارن تعویض چگونه عملگرهایی مانند هامیلتونی را تحت تأثیر قرار می‌دهد؟ در پاسخ باید گفت که چون پتانسیل کولنی

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_Z) = - \sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}|} + \sum_{i>j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (۳۶-۸)$$

که از برهمکنش‌های الکترون-الکترون و الکترون-هسته نتیجه می‌شود تحت جایگشت هر جفت از الکترون‌ها ناوردا است، هامیلتونی (۸-۸) نیز تحت چنین جایگشت‌هایی ناوردا. همچنین این تقارن در مورد تکانه‌های زاویه‌ای مداری و اسپینی یک اتم نیز به کار می‌رود. بنابراین می‌توانیم از این تقارن برای معرفی تعریف دیگری از یکسان بودن ذره‌ها استفاده کنیم: به N ذره‌ی یک سیستم یکسان گفته می‌شود هرگاه مشاهده‌پذیرهای مختلف سیستم (مانند هامیلتونی \hat{H} ، تکانه‌های زاویه‌ای و ...) هنگامی که هر دو ذره تعویض می‌شوند، متقارن باشند. اگر این عملگرها تحت تعویض ذره‌ها متقارن نباشند آنگاه این ذره‌ها تمایزپذیرند.

ناوردایی هامیلتونی تحت تعویض ذره‌ها، الزامات فیزیکی را به دنبال دارد: ویژه‌مقدارهای \hat{H} واگن‌اند. تابع‌های موج متناظر با جایگشت‌های تمام الکترون‌ها دارای انرژی یکسان E هستند: $\hat{H}\psi = E\psi$ که به عنوان واگنی تبادلی شناخته می‌شود. به عنوان مثال، واگنی وابسته به سیستمی از دو ذره‌ی یکسان برابر با ۲ است زیرا $\psi(\xi_1, \xi_2)$ و $\psi(\xi_2, \xi_1)$ متناظر با انرژی یکسان E هستند.

بنابراین هامیلتونی سیستمی با N ذره‌ی یکسان ($m_i = m$) نسبت به مختصه‌های ذره کاملاً متقارن است:

$$\begin{aligned} \hat{H}(\xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots, \xi_N) &= \sum_{k=1}^N \frac{\hat{\mathbf{p}}_k^2}{2m} + \hat{V}(\xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots, \xi_N) \\ &= \hat{H}(\xi_1, \dots, \xi_j, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N) \end{aligned} \quad (۳۷-۸)$$

زیرا \hat{V} تحت جایگشت هر جفت از ذره‌ها ($i \leftrightarrow j$) ناوردا است:

$$\hat{V}(\xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots, \xi_N) = \hat{V}(\xi_1, \dots, \xi_j, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N) \quad (۳۸-۸)$$

همچنین می‌توان این ویژگی را با نشان دادن این مطلب که \hat{H} با عملگر تعویض \hat{P}_{ij} ذره جابه‌جا می‌شود، تحقیق کرد. اگر ψ ویژه‌حالت \hat{H} با ویژه‌مقدار E باشد آنگاه می‌توانیم بنویسیم:

$$\begin{aligned} \hat{H}\hat{P}_{ij}\psi(\xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots, \xi_N) &= \hat{H}\psi(\xi_1, \dots, \xi_j, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N) \\ &= E\psi(\xi_1, \dots, \xi_j, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N) = E\hat{P}_{ij}\psi(\xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots, \xi_N) \\ &= \hat{P}_{ij}E\psi(\xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots, \xi_N) = \hat{P}_{ij}\hat{H}\psi(\xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots, \xi_N) \quad (39-8) \end{aligned}$$

یا

$$[\hat{H}, \hat{P}_{ij}] = 0 \quad (40-8)$$

بنابراین \hat{P}_{ij} یک ثابت حرکت است. یعنی اگر با تابع موجی که متقارن (پادمتقارن) است، شروع کنیم آنگاه در زمان‌های بعدی به همین صورت باقی می‌ماند. علاوه بر این چون \hat{H} و \hat{P}_{ij} جابه‌جا می‌شوند، دارای مجموعه‌ی کاملی از تابع‌هایی هستند که ویژه‌حالت‌های مشترک هر دو عملگر هستند. همانطور که در (۱۵-۸) تا (۱۷-۸) نشان داده شد، این ویژه‌حالت‌ها پارته‌ی مشخصی دارند، یا متقارن‌اند و یا پادمتقارن.

۳-۲-۸ اصل موضوعه‌ی متقارن‌سازی

در (۳۵-۸) نشان دادیم که تابع موج یک سیستم با N ذره‌ی یکسان تحت تعویض هر جفت از ذره‌ها متقارن یا پادمتقارن است:

$$\psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots, \xi_N) = \pm \psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_j, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N) \quad (41-8)$$

این نتیجه که پشتوانه‌ی آن شواهد تجربی است، اساس اصل موضوعه‌ی متقارن‌سازی است که تصریح می‌کند که در طبیعت، حالت سیستم‌های محتوی N ذره‌ی یکسان تحت تعویض هر جفت از ذره‌ها یا به کل متقارن‌اند یا به کل پادمتقارن، و حالت‌هایی با تقارن آمیخته وجود ندارد. بعلاوه، این اصل موضوعه دو مطلب دیگر را نیز بیان می‌کند:

- ذره‌های با اسپین صحیح (یا بوزون‌ها) حالت‌های متقارنی دارند.

- ذره‌های با اسپین نیمه صحیح فرد (یا فرمیون‌ها) حالت‌های پادمتقارنی دارند.

گفته می‌شود که فرمیون‌ها از آمار فرمی-دیراک و بوزون‌ها از آمار بوز-اینشتین پیروی می‌کنند. بنابراین تابع موج سیستمی از بوزون‌های یکسان به کلی متقارن و تابع موج سیستمی از فرمیون‌های یکسان به کلی پادمتقارن است.

ذره‌های مرکب

بحث قبل به ذره‌های یکسانی مربوط می‌شود که «ساده» یا اولیه‌اند مانند کوارک‌ها، الکترون‌ها، پوزیترون‌ها، موئون‌ها و ... حال در مورد تقارن سیستم‌های یکسان «ذره‌های» مرکب بحث می‌کنیم که در آن هر ذره از دو یا چند ذره‌ی اولیه‌ی یکسان تشکیل شده است. به عنوان مثال، ذره‌ی آلفا که از هسته‌ای تشکیل شده است که مرکب از دو نوترون و دو پروتون است، مثالی نوعی از ذره‌های مرکب‌اند. می‌توان سیستمی از N اتم هیدروژن را نیز به صورت سیستمی از ذره‌های مرکب یکسان در نظر گرفت که در آن هر «ذره» (اتم) از

یک پروتون و یک الکترون تشکیل شده است. خود پروتون‌ها، نوترون‌ها، پيون‌ها و ... ذره‌های مرکب‌اند زیرا پروتون‌ها و نوترون‌ها از سه پيون‌ها از دو کوارک تشکیل شده‌اند. کوارک‌ها ذره‌هایی بنیادی با اسپین $\frac{1}{6}$ هستند. ذره‌های مرکب دارای اسپین‌اند. می‌توان اسپین هر ذره‌ی مرکب را با جمع کردن اسپین‌های اجزای سازنده‌ی آن به دست آورد. اگر اسپین کل ذره‌ی مرکب نیمه صحیح فرد باشد آنگاه این ذره مانند یک فرمیون رفتار می‌کند و از این رو از آمار فرمی-دیراک پیروی می‌کند. از سوی دیگر، اگر اسپین برآیند صحیح باشد آنگاه این ذره مانند یک بوزون رفتار می‌کند و از آمار بوز-اینشتین پیروی می‌کند. به طور کلی، اگر ذره‌ی مرکب دارای تعداد فرمیون‌های فرد باشد آنگاه این ذره یک فرمیون و در غیر این صورت یک بوزون است. به عنوان مثال، نوکلئون‌ها فرمیون‌اند زیرا از سه کوارک تشکیل شده‌اند و مزون‌ها بوزون‌اند زیرا از دو کوارک تشکیل شده‌اند. به عنوان یک مثال آموزنده‌ی دیگر، ایزوتوپ‌های ${}^3\text{He}$ و ${}^4\text{He}$ اتم هلیوم را در نظر می‌گیریم: ${}^4\text{He}$ که یک ذره‌ی آلفا نامیده می‌شود، یک بوزون است زیرا از ۴ نوکلئون (دو پروتون و دو نوترون) تشکیل شده است در حالی که ${}^3\text{He}$ یک فرمیون است زیرا از سه نوکلئون (یک نوترون و دو پروتون) تشکیل شده است. اتم هیدروژن از دو فرمیون (یک الکترون و یک پروتون) تشکیل شده است بنابراین یک بوزون است.

۸-۲-۴ ساختن تابع‌های متقارن و پادمقارن

چون تابع‌های موج سیستم‌های متشکل از ذره‌های یکسان در کل یا متقارن و یا پادمقارن‌اند، مناسب است تا به مطالعه‌ی صورت‌بندی چگونگی ساختن تابع‌های موجی که در کل متقارن یا پادمقارن هستند (با شروع از تابع‌های نامتقارن) بپردازیم. برای ساده شدن بحث، ابتدا سیستم متشکل از دو ذره‌ی یکسان را در نظر بگیریم. با شروع از هر تابع موج نامتقارن بهنجار $\psi(\xi_1, \xi_2)$ می‌توانیم تابع‌های موج متقارن $\psi_s(\xi_1, \xi_2)$ را به صورت

$$\psi_s(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi(\xi_1, \xi_2) + \psi(\xi_2, \xi_1)] \quad (۴۲-۸)$$

و تابع‌های موج پادمقارن $\psi_a(\xi_1, \xi_2)$ را به صورت

$$\psi_a(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi(\xi_1, \xi_2) - \psi(\xi_2, \xi_1)] \quad (۴۳-۸)$$

بسازییم که در آنها $1/\sqrt{2}$ ضریب بهنجارش است.

به صورت مشابه، برای سیستمی متشکل از سه ذره‌ی یکسان، به صورت زیر می‌توانیم ψ_s و ψ_a را از تابع نامتقارن ψ بسازییم:

$$\psi_s(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \frac{1}{\sqrt{6}} [\psi(\xi_1, \xi_2, \xi_3) + \psi(\xi_1, \xi_3, \xi_2) + \psi(\xi_2, \xi_3, \xi_1) + \psi(\xi_2, \xi_1, \xi_3) + \psi(\xi_3, \xi_1, \xi_2) + \psi(\xi_3, \xi_2, \xi_1)] \quad (۴۴-۸)$$

$$\psi_a(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \frac{1}{\sqrt{6}} [\psi(\xi_1, \xi_2, \xi_3) - \psi(\xi_1, \xi_3, \xi_2) + \psi(\xi_2, \xi_3, \xi_1) - \psi(\xi_2, \xi_1, \xi_3) + \psi(\xi_3, \xi_1, \xi_2) - \psi(\xi_3, \xi_2, \xi_1)] \quad (۴۵-۸)$$

اصولاً با ادامه‌ی این روش می‌توانیم تابع‌های موج متقارن و پادمقارن را برای هر سیستمی با N ذره‌ی یکسان، بسازییم.

۵-۲-۸ سیستم‌های متشکل از ذره‌های غیربرهمکنشی یکسان

در مورد یک سیستم متشکل از N ذره‌ی غیربرهمکنشی یکسان که در آن تمام ذره‌ها دارای جرم برابر $m_i = m$ هستند و پتانسیل یکسان $\hat{V}_i(\xi_i) = \hat{V}(\xi_i)$ را تجربه می‌کنند، معادله‌ی شرودینگر سیستم به N معادله‌ی تک‌ذره‌ای یکسان جدا می‌شود:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \hat{V}(\xi_i) \right] \psi_{n_i}(\xi_i) = \varepsilon_{n_i} \psi_{n_i}(\xi_i) \quad (۴۶-۸)$$

با توجه به این که انرژی (مانند مورد یک سیستم متشکل از N ذره‌ی تمایزپذیر) از مجموع انرژی‌های تک‌ذره‌ها به دست می‌آید: $E_{n_1, n_2, \dots, n_N} = \sum_{i=1}^N \varepsilon_{n_i}$ ، دست کم به دو دلیل، دیگر تابع موج از ضرب ساده‌ی $\psi_{n_i}(\xi_i)$ حاصل می‌شود: $\psi_{n_1, n_2, \dots, n_N}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \prod_{i=1}^N \psi_{n_i}(\xi_i)$ از چنین ضربی به دست می‌آید. ابتدا این که اگر تابع موج حالت ψ_{n_1} ذره‌ی ۱ در حالت ψ_{n_2} ذره‌ی ۲ ... و ذره‌ی N در حالت ψ_{n_N} قرار دارد که بی‌معنی است زیرا تمام آنچه که می‌دانیم این است که یکی از ذره‌ها در حالت ψ_{n_1} است، دیگری در ψ_{n_2} است و به همین ترتیب. چون ذره‌ها یکسان‌اند، راهی وجود ندارد که بگوییم کدام ذره در کدام حالت است. به هر حال، اگر ذره‌ها تمایزپذیر بودند آنگاه تابع موج کل آنها به صورتی که در (۲۴-۸) نشان داده شد، از چنین ضربی به دست می‌آید. دلیل دوم برای این که چرا نمی‌توان تابع موج سیستمی از ذره‌های یکسان را از رابطه‌ی $\prod_{i=1}^N \psi_{n_i}(\xi_i)$ به دست آورد به این واقعیت بر می‌گردد که به صورت کلی چنین ضربی تقارن مشخصی ندارد که لازمه‌ی سیستم‌های متشکل از N ذره‌ی یکسان است که تابع موج آنها باید متقارن یا پادمقارن باشد. می‌توانیم روش بخش ۸-۲-۴ را برای ساختن تابع‌های موج به کلی متقارن یا به کلی پادمقارن از حالت‌های تک‌ذره‌ای $\psi_{n_i}(\xi_i)$ گسترش دهیم. برای این کار، قصد داریم نشان دهیم که چگونه تابع‌های موج متقارن شده و پادمقارن شده را برای سیستم‌های متشکل از دو، سه و N ذره‌ی یکسان غیربرهمکنشی می‌سازیم.

۱-۵-۲-۸ تابع موج سیستم‌های دودره‌ای

در تشابه با (۴۲-۸) و (۴۳-۸)، به صورت زیر می‌توانیم تابع‌های موج متقارن و پادمقارن را برای سیستمی از دو ذره‌ی غیربرهمکنشی یکسان برحسب تابع‌های موج تک‌ذره بسازیم:

$$\psi_s(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{n_1}(\xi_1)\psi_{n_2}(\xi_2) + \psi_{n_1}(\xi_2)\psi_{n_2}(\xi_1)] \quad (۴۷-۸)$$

$$\psi_a(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{n_1}(\xi_1)\psi_{n_2}(\xi_2) - \psi_{n_1}(\xi_2)\psi_{n_2}(\xi_1)] \quad (۴۸-۸)$$

که در آن فرض کرده‌ایم که $n_1 \neq n_2$ است. هنگامی که $n_1 = n_2 = n$ است، تابع موج متقارن از $\psi_s(\xi_1, \xi_2) = \psi_n(\xi_1)\psi_n(\xi_2)$ به دست می‌آید و تابع موج پادمقارن برابر با صفر است. بعداً به این که چرا هرگاه $n_1 = n_2$ می‌شود آنگاه $\psi_a(\xi_1, \xi_2) = 0$ است، خواهیم پرداخت.

توجه کنید که می‌توانیم ψ_s را به صورت زیر بنویسیم:

$$\psi_s(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \sum_P \hat{P} \psi_{n_1}(\xi_1) \psi_{n_2}(\xi_2) \quad (49-8)$$

که در آن \hat{P} عملگر جایگشت است و جمع روی تمام جایگشت‌های ممکن صورت گرفته است (در اینجا تنها دو جایگشت ممکن داریم). به صورت مشابه، می‌توانیم ψ_a را به صورت زیر بنویسیم:

$$\psi_a(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \sum_P (-1)^P \hat{P} \psi_{n_1}(\xi_1) \psi_{n_2}(\xi_2) \quad (50-8)$$

که در آن $(-1)^P$ برای جایگشت زوج (یعنی هنگامی که ξ_1 و ξ_2 و همچنین n_1 و n_2 را تعویض می‌کنیم) برابر با $+1$ است و برای جایگشت فرد (یعنی هنگامی که ξ_1 و ξ_2 را تعویض می‌کنیم و نه n_1 و n_2 را و برعکس) برابر با -1 است. توجه کنید که می‌توانیم ψ_a در (۴۸-۸) را به شکل دترمینان زیر بنویسیم:

$$\psi_a(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(\xi_1) & \psi_{n_1}(\xi_2) \\ \psi_{n_2}(\xi_1) & \psi_{n_2}(\xi_2) \end{vmatrix} \quad (51-8)$$

۸-۲-۵-۲ تابع موج سیستم‌های سه ذره‌ای

برای سیستمی متشکل از سه ذره‌ی غیربرهمکنشی یکسان، تابع موج متقارن عبارت است از

$$\psi_s(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \sum_P \hat{P} \psi_{n_1}(\xi_1) \psi_{n_2}(\xi_2) \psi_{n_3}(\xi_3) \quad (52-8)$$

یا

$$\begin{aligned} \psi_s(\xi_1, \xi_2, \xi_3) &= \frac{1}{\sqrt{3!}} [\psi_{n_1}(\xi_1) \psi_{n_2}(\xi_2) \psi_{n_3}(\xi_3) + \psi_{n_1}(\xi_1) \psi_{n_2}(\xi_3) \psi_{n_3}(\xi_2) \\ &+ \psi_{n_1}(\xi_2) \psi_{n_2}(\xi_1) \psi_{n_3}(\xi_3) + \psi_{n_1}(\xi_2) \psi_{n_2}(\xi_3) \psi_{n_3}(\xi_1) \\ &+ \psi_{n_1}(\xi_3) \psi_{n_2}(\xi_1) \psi_{n_3}(\xi_2) + \psi_{n_1}(\xi_3) \psi_{n_2}(\xi_2) \psi_{n_3}(\xi_1)] \quad (53-8) \end{aligned}$$

و هنگامی که $n_1 \neq n_2 \neq n_3$ است، تابع موج پادمقارن از

$$\psi_a(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \sum_P (-1)^P \hat{P} \psi_{n_1}(\xi_1) \psi_{n_2}(\xi_2) \psi_{n_3}(\xi_3) \quad (54-8)$$

یا به شکل دترمینان از

$$\psi_a(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(\xi_1) & \psi_{n_1}(\xi_2) & \psi_{n_1}(\xi_3) \\ \psi_{n_2}(\xi_1) & \psi_{n_2}(\xi_2) & \psi_{n_2}(\xi_3) \\ \psi_{n_3}(\xi_1) & \psi_{n_3}(\xi_2) & \psi_{n_3}(\xi_3) \end{vmatrix} \quad (55-8)$$

به دست می‌آید. اگر $n_1 = n_2 = n_3 = n$ باشد آنگاه داریم: $\psi_s(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \psi_n(\xi_1) \psi_n(\xi_2) \psi_n(\xi_3)$

$$\psi_a(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = 0$$

۳-۵-۲-۸ تابع موج سیستم‌های چندذره‌ای

می‌توانیم (۵۲-۸) و (۵۵-۸) را تعمیم دهیم و تابع‌های موج متقارن و پادمقارن سیستمی از N ذره‌ی غیربرهمکنشی یکسان را به صورت زیر بنویسیم:

$$\psi_s(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \hat{P} \psi_{n_1}(\xi_1) \psi_{n_2}(\xi_2) \dots \psi_{n_N}(\xi_N) \quad (۵۶-۸)$$

$$\psi_a(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P \psi_{n_1}(\xi_1) \psi_{n_2}(\xi_2) \dots \psi_{n_N}(\xi_N) \quad (۵۷-۸)$$

$$\psi_a(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(\xi_1) & \psi_{n_1}(\xi_2) & \dots & \psi_{n_1}(\xi_N) \\ \psi_{n_2}(\xi_1) & \psi_{n_2}(\xi_2) & \dots & \psi_{n_2}(\xi_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{n_N}(\xi_1) & \psi_{n_N}(\xi_2) & \dots & \psi_{n_N}(\xi_N) \end{vmatrix} \quad (۵۸-۸)$$

این دترمینان $N \times N$ که تنها شامل حالت‌های تک‌ذره‌ای است، به عنوان دترمینان اسلیتر شناخته می‌شود. تعویض هر جفت ذره متناظر با تعویض دو ستون دترمینان است. این تعویض موجب تغییر علامت دترمینان می‌شود. برای جایگشت‌های زوج داریم: $(-1)^P = 1$ و برای جایگشت‌های فرد داریم: $(-1)^P = -1$. رابطه‌های (۵۶-۸) و (۵۸-۸) برای حالت‌هایی معتبرند که در آنها تمام عددهای m_1, m_2, \dots, m_N متفاوت از یکدیگر باشند. اما پرسشی که در اینجا مطرح می‌شود این است که اگر تعدادی از (یا تمام) این عددها برابر باشند آنگاه چه اتفاقی می‌افتد؟ در پاسخ باید گفت که در حالت متقارن، اگر $n_1 = n_2 = \dots = n_N$ باشد آنگاه ψ_s از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\psi_s(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \prod_{i=1}^N \psi_N(\xi_i) = \psi_n(\xi_1) \psi_n(\xi_2) \dots \psi_n(\xi_N) \quad (۵۹-۸)$$

هنگامی که چندتاییگی در عددهای m_1, m_2, \dots, m_N وجود دارد (یعنی هنگامی که تعدادی از عددهای n_i بیشتر از یک بار تکرار شوند)، باید مراقب باشیم و از شمارش دوباره‌ی آنها اجتناب کنیم. به عنوان مثال، اگر n_1 در دنباله‌ی m_1, m_2, \dots, m_N بار تکرار شود و n_2, m_2 بار تکرار شود و به همین ترتیب آنگاه تابع موج متقارن از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\psi_s(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \sqrt{\frac{N_1! N_2! \dots N_N!}{N!}} \sum_P \hat{P} \psi_{n_1}(\xi_1) \psi_{n_2}(\xi_2) \dots \psi_{n_N}(\xi_N) \quad (۶۰-۸)$$

جمع \sum_P تنها روی جایگشت‌هایی زده می‌شود که به جمله‌های متفاوتی می‌انجامد و شامل $N! / N_1! N_2! \dots N_N!$ جمله‌ی متفاوت است. به عنوان مثال، در مورد سیستمی متشکل از سه بوزون

یکسان مستقل که در آن $n_1 = n_2 = n$ و $n_3 \neq n$ است، چندتاییگی n_1 برابر با $N_1 = 2$ است از این رو ψ_s از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\psi_s(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \sqrt{\frac{2!}{3!}} \sum_P \hat{P} \psi_n(\xi_1) \psi_n(\xi_2) \psi_n(\xi_3) = \frac{1}{\sqrt{3}} [\psi_n(\xi_1) \psi_n(\xi_2) \psi_{n_3}(\xi_3) + \psi_n(\xi_1) \psi_{n_3}(\xi_2) \psi_n(\xi_3) + \psi_{n_3}(\xi_1) \psi_n(\xi_2) \psi_n(\xi_3)] \quad (8-61)$$

برخلاف حالت متقارن، حالت پادمقارن کاملاً سراسر است: اگر در بین عددهای n_1, n_2, \dots, n_N تنها دو عدد برابر باشند آنگاه تابع موج پادمقارن صفر می‌شود. به عنوان مثال، اگر $n_i = n_j$ باشد آنگاه سطرهای i ام و j ام دترمینان (8-58) یکسان خواهند شد از این رو دترمینان صفر می‌شود. بنابراین تابع‌های موج پادمقارن تنها برای حالت‌هایی غیر صفرند که در آنها تمام عددهای n_1, n_2, \dots, n_N متفاوت باشند.

۸-۳ اصل طرد پائولی

همانطور که در بالا اشاره شد، هرگاه دو ذره یک حالت تک‌ذره را اشغال کنند آنگاه دترمینان (8-58) و از این رو تابع موج کل صفر خواهد شد زیرا دو سطر دترمینان یکسان خواهند شد. بنابراین می‌توانیم نتیجه بگیریم که در سیستمی متشکل از N ذره‌ی یکسان، دو فرمیون نمی‌توانند در یک زمان، حالت تک‌ذره‌ی یکسانی را اشغال کنند و هر حالت تک‌ذره حداکثر به وسیله‌ی یک فرمیون می‌تواند اشغال شود. این اصل طرد پائولی است که اولین بار در سال ۱۹۲۵ برای توضیح جدول تناوبی اصل موضوعه قرار گرفت. این اصل بیان می‌کند که دو الکترون نمی‌توانند به صورت هم‌زمان حالت کوانتومی (تک‌ذره‌ی) یکسانی را در یک اتم اشغال کنند و تنها (یا حداکثر) یک الکترون می‌تواند یک حالت عددهای کوانتومی $n_i l_i m_{l_i} m_{s_i}$ را اشغال کند: $\psi_{n_i l_i m_{l_i} m_{s_i}}(\mathbf{r}_i, \mathbf{S}_i)$. اصل طرد نقش مهمی در ساختار اتم‌ها ایفا می‌کند. این اصل اثر مستقیمی روی توزیع فضایی فرمیون‌ها دارد.

چگالش بوزون

اما در مورد بوزون‌ها چه می‌توان گفت؟ آیا بوزون‌ها نیز مانند فرمیون‌ها دارای محدودیت‌اند؟ در پاسخ باید گفت که خیر. هیچ محدودیتی روی تعداد بوزون‌هایی که می‌توانند یک تک‌حالت را اشغال کنند، وجود ندارد. به جای اصل طرد فرمیون‌ها، بوزون‌ها تمایل دارند تماماً در یک حالت (حالت پایه) چگالیده شوند که چگالش بوزون نامیده می‌شود. به عنوان مثال، تمام ذره‌های ${}^4\text{He}$ مایع (یک سیستم بوزونی) یک حالت پایه را اشغال می‌کنند. این پدیده به عنوان چگالش بوز-اینشتین شناخته می‌شود. ویژگی‌های ${}^3\text{He}$ مایع کاملاً متفاوت از ویژگی‌های ${}^4\text{He}$ مایع است زیرا ${}^3\text{He}$ یک سیستم فرمیونی است.

ملاحظات

دیدیم هنگامی که معادله‌ی شرودینگر شامل اسپین است، تابع موج یک تک‌ذره برابر با حاصل ضرب بخش فضایی و بخش اسپینی است: $\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{S}) = \psi(\mathbf{r})\chi(\mathbf{S})$. تابع موج سیستمی متشکل از N ذره

که دارای اسپین هستند، برابر با حاصل ضرب بخش فضایی و بخش اسپینی است:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{S}_1; \mathbf{r}_2, \mathbf{S}_2; \dots; \mathbf{r}_N, \mathbf{S}_N) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \chi(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \dots, \mathbf{S}_N) \quad (۶۲-۸)$$

این تابع موج باید لازمه‌های تقارنی مناسب را هنگامی که N ذره یکسان‌اند، برآورده کند. در مورد سیستمی متشکل از N بوزون یکسان، تابع موج باید متقارن باشد از این رو بخش‌های فضایی و اسپینی باید پارته‌ی یکسانی داشته باشند:

$$\Psi_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{S}_1; \mathbf{r}_2, \mathbf{S}_2; \dots; \mathbf{r}_N, \mathbf{S}_N) = \begin{cases} \psi_a(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \chi_a(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \dots, \mathbf{S}_N) \\ \psi_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \chi_s(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \dots, \mathbf{S}_N) \end{cases} \quad (۶۳-۸)$$

در مورد سیستمی متشکل از N فرمیون یکسان، بخش‌های فضایی و اسپینی باید پارته‌های متفاوتی داشته باشند که به یک تابع موج کل می‌انجامد که پادمقارن است:

$$\Psi_a(\mathbf{r}_1, \mathbf{S}_1; \mathbf{r}_2, \mathbf{S}_2; \dots; \mathbf{r}_N, \mathbf{S}_N) = \begin{cases} \psi_a(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \chi_s(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \dots, \mathbf{S}_N) \\ \psi_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \chi_a(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \dots, \mathbf{S}_N) \end{cases} \quad (۶۴-۸)$$

مثال ۳-۸ (تابع موج دو ذره‌ی غیربرهمکنشی یکسان)

تابع‌های موج دو سیستم متشکل از ذره‌های غیربرهمکنشی یکسان که اولی از دو بوزون و دومی از دو فرمیون با اسپین $\frac{1}{2}$ تشکیل شده است را بیابید.

حل

برای سیستم متشکل از دو بوزون غیربرهمکنشی یکسان، (۴۷-۸) و (۴۸-۸) رابطه‌ی

$$\Psi_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{S}_1; \mathbf{r}_2, \mathbf{S}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{cases} [\psi_{n_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_2) - \psi_{n_1}(\mathbf{r}_2) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_1)] \chi_a(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2) \\ [\psi_{n_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_2) + \psi_{n_1}(\mathbf{r}_2) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_1)] \chi_s(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2) \end{cases} \quad (۶۵-۸)$$

و برای سیستمی متشکل از دو فرمیون با اسپین $\frac{1}{2}$ ، رابطه‌ی

$$\Psi_a(\mathbf{r}_1, \mathbf{S}_1; \mathbf{r}_2, \mathbf{S}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{cases} [\psi_{n_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_2) - \psi_{n_1}(\mathbf{r}_2) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_1)] \chi_s(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2) \\ [\psi_{n_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_2) + \psi_{n_1}(\mathbf{r}_2) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_1)] \chi_a(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2) \end{cases} \quad (۶۶-۸)$$

را نتیجه می‌دهند که در آنها از صورت‌بندی جمع نکانه‌ی زاویه‌ای، سه حالت (یک سه‌تایی) وجود دارند که متقارن‌اند $(\chi_s(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2))$:

$$\chi_{\text{سه‌تایی}}(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2) = \begin{cases} \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle_2 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle_2 + \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle_2 \right) \\ \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle_2 \end{cases} \quad (۶۷-۸)$$

و یک حالت (یک تک‌تایی) وجود دارد که پادمتقارن است $(\chi_a(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2))$:

$$\chi_{\text{تک‌تایی}}(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_2 - \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_2 \right) \quad (۶۸-۸)$$

۴-۸ اصل طرد و جدول تناوبی

توضیح جدول تناوبی یکی از برجسته‌ترین موفقیت‌های معادله‌ی شرودینگر است. هنگامی که این معادله با اصل طرد پائولی ترکیب شود، اطلاعات بسیار مفیدی پیرامون ساختار اتم‌های چند الکترونی ارائه می‌کند. در فصل ۶ دیدیم که حالت الکترون هیدروژن که در پتانسیل کولنی متقارن کروی هسته حرکت می‌کند، به وسیله‌ی چهار عدد کوانتومی n, l, m_l و m_s توصیف می‌شود: $\Psi_{nlm_l m_s}(\mathbf{r}) = \psi_{nlm_l}(\mathbf{r}) \chi_{m_s}$ که در آن $\psi_{nlm_l}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \varphi)$ تابع موج الکترون است هنگامی که از اسپین چشم‌پوشی شود، و $\chi_{m_s} = \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle$ حالت اسپین است. معلوم شده است که این نمایش برای هر اتم دیگری نیز مناسب است. در یک اتم چند الکترونی، پتانسیل میانگینی که هر الکترون در آن حرکت می‌کند، متفاوت از پتانسیل کولنی هسته است. اما هنوز با تقریب خوبی می‌توان آن را متقارن کروی فرض کرد. بنابراین می‌توانیم مانند مورد اتم هیدروژن، حالت‌های الکترونی را با چهار عدد کوانتومی n, l, m_l و m_s مشخص کنیم که به ترتیب عدد کوانتومی اصلی، عدد کوانتومی مداری، عدد کوانتومی مغناطیسی (یا سمتی) و عدد کوانتومی اسپینی را نمایش می‌دهند. m_l مؤلفه‌ی z تکانه‌ی زاویه‌ای مداری الکترون و m_s مؤلفه‌ی z اسپین آن را نمایش می‌دهد. اتم‌ها دارای ساختاری لایه‌ای هستند. هر اتم تعدادی لایه‌ی اصلی دارد که توسط عدد کوانتومی اصلی یا شعاعی n مشخص می‌شوند. لایه‌ها دارای زیرلایه‌هایی هستند که به وسیله‌ی عدد کوانتومی مداری l مشخص می‌شوند. زیرلایه‌ها نیز به نوبه‌ی خود دارای زیرزیرلایه‌هایی هستند که اوربیتال نامیده می‌شوند و توسط m_l مشخص می‌شوند. بنابراین یک اوربیتال به وسیله‌ی سه عدد کوانتومی n, l و m_l به صورت کامل مشخص می‌شود یعنی توسط $|nlm_l\rangle$ تعریف می‌شود. بنابراین هر لایه‌ی n دارای n زیرلایه‌ی متناظر با $l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$ است و هر زیرلایه به نوبه‌ی خود دارای $2l+1$ اوربیتال (یا زیرزیرلایه) است زیرا $m_l = -l, -l+1, -l+2, \dots, l-2, l-1, l$ است. مانند اتم هیدروژن، الکترون‌های منفرد حالت‌های تک‌ذره‌ای یا اوربیتال‌ها را اشغال می‌کنند. حالت‌های متناظر با مقادیر عددی $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots$ به ترتیب حالت‌های s, p, d, f, g, h, \dots نامیده می‌شوند. از این رو به ازای یک n معلوم، یک حالت s دارای ۱ اوربیتال ($m_l = 0$)، یک حالت p دارای ۳ اوربیتال ($m_l = -1, 0, 1$)، یک حالت d دارای ۵ اوربیتال ($m_l = -2, -1, 0, 1, 2$) است و به همین ترتیب (فصل ۶). حالت‌های الکترونی را با nl برحسب می‌زنیم که در آن (همانند گذشته) l به s, p, d, f, \dots بر می‌گردد. مثلاً $1s$ متناظر با $(1, 0)$ ، $2s$ متناظر با $(2, 0)$ ، $2p$ متناظر با $(2, 1)$ ، $3s$ متناظر با $(3, 0)$ است و به همین ترتیب.

پرسشی که در اینجا مطرح می‌شود این است که چگونه الکترون‌ها لایه‌ها و زیرلایه‌های مختلف در یک اتم را پر می‌کنند؟ در پاسخ باید گفت که اگر الکترون‌ها بوزن بودند آنگاه همگی در حالت پایه $|nlm_l\rangle = |1^0_0\rangle$ جمع می‌شدند و گوناگونی غنی عناصر که در طبیعت وجود دارد را نمی‌داشتیم. ولی چون الکترون‌ها فرمیون‌های یکسانی هستند، اصل طرد پائولی، که بیان می‌کند دو الکترون به صوت همزمان نمی‌توانند حالت کوانتومی $|nlm_l m_s\rangle$ یکسانی را در یک اتم اشغال کنند، بر آنها حاکم است. از این رو هر اوربیتال $|nlm_l\rangle$ می‌تواند حداکثر توسط دو الکترون اشغال شود: یکی از این دو الکترون دارای اسپین بالا $m_s = +\frac{1}{2}$ و دیگری دارای اسپین پایین $m_s = -\frac{1}{2}$ است. از این رو هر حالت nl می‌تواند $2(2l+1)$ الکترون را انبار کند. بنابراین یک حالت s (یعنی $|n^0_0\rangle$) حداکثر می‌تواند ۲ الکترون، یک حالت p (یعنی $|n^1 m_l\rangle$) حداکثر ۶ الکترون، یک حالت d (یعنی $|n^2 m_l\rangle$) حداکثر ۱۰ الکترون، یک حالت f (یعنی $|n^3 m_l\rangle$) حداکثر ۱۴ الکترون را در خود نگه دارد و به همین ترتیب (شکل ۸-۲).

برای یک اتم در حالت پایه، الکترون‌ها به ترتیب افزایش انرژی اوربیتال‌ها را پر می‌کنند. هنگامی که یک زیرلایه پر شد، الکترون بعدی به زیرلایه‌ی خالی که انرژی آن درست بالای زیرلایه‌ی قبلی است، می‌رود. هنگامی که تمام اوربیتال‌ها در یک لایه‌ی الکترونی اصلی به صورت کامل پر شدند، یک لایه‌ی بسته داریم. الکترون بعدی به لایه‌ی اصلی بعدی می‌رود و به همین ترتیب. با پر کردن اوربیتال‌های اتمی به ترتیب افزایش انرژی یکی پس از دیگری، تمام عنصرهای جدول تناوبی به دست می‌آیند (جدول ۸-۱).

عنصرهای $1 \leq Z \leq 18$

همانطور که در جدول ۸-۱ نشان داده شده است، تناوب اول (یا ردیف افقی اول) جدول تناوبی دارای دو عنصر هیدروژن H و هلیوم He است. تناوب دوم دارای ۸ عنصر لیتیم Li تا نئون Ne است. تناوب سوم نیز دارای ۸ عنصر سدیم Na تا آرگون Ar است و به همین ترتیب. اوربیتال‌های ۱۸ عنصر سبک ($1 \leq Z \leq 18$) مطابق با دنباله‌ی $1s, 2s, 2p, 3s, 3p$ به ترتیب افزایش انرژی پر می‌شوند. حالت الکترونی یک اتم با مشخص کردن اوربیتال‌های اشغال شده یا با آنچه که پیکربندی الکترونی نامیده می‌شود، تعیین می‌گردد. به عنوان مثال، هیدروژن دارای یک الکترون است و پیکربندی حالت پایه‌ی آن برابر با $1s^1$ است، هلیوم He دارای دو الکترون است: $1s^2$ ، لیتیم Li دارای سه الکترون است: $1s^2 2s^1$ ، برلیوم Be دارای چهار الکترون است: $1s^2 2s^2$ و به همین ترتیب. اکنون بیایید چند کلمه‌ای پیرامون این مطلب که چگونه تکانه‌ی زاویه‌ای کل یک اتم تعیین می‌شود، صحبت کنیم. بدین منظور، باید تکانه‌ی زاویه‌ای مداري کل $\mathbf{L} = \sum_{i=1}^Z \mathbf{l}_i$ ، اسپین کل $\mathbf{S} = \sum_{i=1}^Z \mathbf{s}_i$ را محاسبه کنیم و سپس تکانه‌ی زاویه‌ای کل را با جفت کردن \mathbf{L} و \mathbf{S} به دست آوریم یعنی $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ که در آن \mathbf{l}_i و \mathbf{s}_i تکانه‌های زاویه‌ای مداري و اسپینی الکترون‌های منفرد هستند. همانطور که در فصل ۹ خواهیم دید، هنگامی که جفت‌شدگی اسپین-مدار در نظر گرفته شود، بخشی از واگنی ترازهای انرژی اتم از بین می‌رود

جدول ۸-۱ پیکربندی‌های الکترونی حالت پایه، توصیف طیفی و انرژی‌های یونش مربوط به چهار ردیف جدول تناوبی. گروه‌ها، عنصرهای با لایه‌ی بسته را نمایش می‌دهند.

لایه	Z	عنصر	پیکربندی حالت پایه	توصیف طیفی	انرژی یونش (eV)	
۱	۱	H	(1s) ¹	² S _{1/2}	۱۳٫۶	
	۲	He	(1s) ²	¹ S ₀	۲۴٫۵۸	
۲	۳	Li	[He](2s) ¹ = (1s ²)(2s) ¹	² S _{1/2}	۵٫۳۹	
	۴	Be	[He](2s) ²	¹ S ₀	۹٫۳۲	
	۵	B	[He](2s) ² (2p) ¹	² P _{1/2}	۸٫۳۰	
	۶	C	[He](2s) ² (2p) ²	³ P ₀	۱۱٫۲۶	
	۷	N	[He](2s) ² (2p) ³	⁴ S _{3/2}	۱۴٫۵۵	
	۸	O	[He](2s) ² (2p) ⁴	³ P ₂	۱۳٫۶۱	
	۹	F	[He](2s) ² (2p) ⁵	² P _{3/2}	۱۷٫۴۲	
	۱۰	Ne	[He](2s) ² (2p) ⁶	¹ S ₀	۲۱٫۵۶	
	۳	۱۱	Na	[Ne](3s) ¹	² S _{1/2}	۵٫۱۴
		۱۲	Mg	[Ne](3s) ²	¹ S ₀	۷٫۶۴
۱۳		Al	[Ne](3s) ² (3p) ¹	² P _{1/2}	۵٫۹۴	
۱۴		Si	[Ne](3s) ² (3p) ²	³ P ₀	۸٫۱۵	
۱۵		P	[Ne](3s) ² (3p) ³	⁴ S _{3/2}	۱۰٫۴۸	
۱۶		S	[Ne](3s) ² (3p) ⁴	³ P ₂	۱۰٫۳۶	
۱۷		Cl	[Ne](3s) ² (3p) ⁵	² P _{3/2}	۱۳٫۰۱	
۱۸		Ar	[Ne](3s) ² (3p) ⁶	¹ S ₀	۱۵٫۷۶	
۴		۱۹	K	[Ar](4s) ¹	² S _{1/2}	۴٫۳۴
		۲۰	Ca	[Ar](4s) ²	¹ S ₀	۶٫۱۱
	۲۱	Sc	[Ar](3d) ¹ (4s) ²	² D _{3/2}	۶٫۵۴	
	۲۲	Ti	[Ar](3d) ² (4s) ²	³ F ₂	۶٫۸۳	
	۲۳	V	[Ar](3d) ³ (4s) ²	⁴ F _{3/2}	۶٫۷۴	
	۲۴	Cr	[Ar](3d) ⁴ (4s) ²	⁵ S ₃	۶٫۷۶	
	۲۵	Mn	[Ar](3d) ⁵ (4s) ²	⁶ S _{5/2}	۷٫۴۳	
	۲۶	Fe	[Ar](3d) ⁶ (4s) ²	⁵ D ₄	۷٫۸۷	
	۲۷	Co	[Ar](3d) ⁷ (4s) ²	⁴ F _{9/2}	۷٫۸۶	
	۲۸	Ni	[Ar](3d) ⁸ (4s) ²	³ F ₄	۷٫۶۳	
	۲۹	Cu	[Ar](3d) ¹⁰ (4s) ¹	² S _{1/2}	۷٫۷۲	
	۳۰	Zn	[Ar](3d) ¹⁰ (4s) ²	¹ S ₀	۹٫۳۹	
	۳۱	Ga	[Ar](3d) ¹⁰ (4s) ² (4p) ¹	² P _{1/2}	۶٫۰۰	
	۳۲	Ge	[Ar](3d) ¹⁰ (4s) ² (4p) ²	³ P ₀	۷٫۸۸	
	۳۳	As	[Ar](3d) ¹⁰ (4s) ² (4p) ³	⁴ S _{3/2}	۹٫۸۱	
	۳۴	Se	[Ar](3d) ¹⁰ (4s) ² (4p) ⁴	³ P ₂	۹٫۷۵	
	۳۵	Br	[Ar](3d) ¹⁰ (4s) ² (4p) ⁵	² P _{3/2}	۱۱٫۸۴	
	۳۶	Kr	[Ar](3d) ¹⁰ (4s) ² (4p) ⁶	¹ S ₀	۹٫۸۱	

Element	1s	2s	2p			Configuration
H						$(1s)^1$
He						$(1s)^2$
Li						$(1s)^2(2s)^1$
Be						$(1s)^2(2s)^2$
B						$(1s)^2(2s)^2(2p)^1$
C						$(1s)^2(2s)^2(2p)^2$
N						$(1s)^2(2s)^2(2p)^3$
O						$(1s)^2(2s)^2(2p)^4$
F						$(1s)^2(2s)^2(2p)^5$
Ne						$(1s)^2(2s)^2(2p)^6$

شکل ۲-۸ پر شدن اوربیتال‌ها مطابق با اصل طرد پائولی.

و شکافتگی ترازها به وجود می‌آید. چهار عدد S, L, J و M عددهای کوانتومی خوبی هستند که در آنها مقدار J و هنگامی که $L < S$ است، $2L + 1$ مقدار وجود دارد. چون انرژی به J بستگی دارد، ترازهای متناظر با یک L و S به $(2J + 1)$ چندتایی شکافته می‌شوند. اکنون مسأله تعیین این واقعیت است که کدام یک از این حالت‌ها پایین‌ترین انرژی را دارد. قبل از پرداختن به این موضوع، نمادگذاری طیفی را معرفی می‌کنیم که مطابق با آن حالت یک اتم با

$$2S+1L_J$$

برچسب زده می‌شود که در آن (همانند گذشته) عددهای $L = 0, 1, 2, 3, \dots$ به ترتیب با F, D, P, S و ... نمایش داده می‌شوند (در اینجا باید یادآوری کنیم که حروف بزرگ F, D, P, S و ... به تکانه‌ی زاویه‌ای مداری کل یک اتم اشاره می‌کنند در حالی که حروف کوچک f, d, p, s و ... به الکترون‌های منفرد اشاره می‌کنند یعنی f, d, p, s و ... حالت‌های تکانه‌ی زاویه‌ای الکترون‌های منفرد را توصیف می‌کنند). به عنوان مثال، چون تکانه‌ی زاویه‌ای کل اتم بریلیم برابر با صفر $J = 0$ است زیرا $L = 0$ (تمام الکترون‌ها در حالت‌های s قرار دارند، $l_i = 0$ و $S = 0$)، هر دو الکترون در حالت‌های $(1s)^2$ و $(2s)^2$ جفت شده‌اند) است، می‌توان حالت پایه‌ی بریلیم را به صورت 1S_0 نوشت. در واقع این نمادگذاری برای تمام اتم‌های با لایه‌ی بسته‌ی دیگر مانند هلیوم He ، نئون Ne ، آرگون Ar و ... به کار می‌رود. حالت‌های پایه‌ی این عنصرها همگی با 1S_0 مشخص می‌شوند (جدول ۸-۱).

حال اتم بور B را در نظر بگیریم: لایه‌های بسته‌ی $1s$ و $2s$ دارای $J = 0$ هستند. بنابراین تکانه‌ی زاویه‌ای بور به وسیله‌ی الکترون $1p$ که دارای $S = 1/2$ و $L = 1$ است، تعیین می‌شوند. جفت‌شدگی $S = 1/2$ ، $L = 1$ مقدار $J = 1/2$ یا $3/2$ را نتیجه می‌دهد که بنابراین به دو حالت ممکن زیر می‌انجامد:

$$^2P_{3/2} \quad \text{یا} \quad ^2P_{1/2} \quad (8-70)$$

اما کدام یک دارای انرژی پایین‌تری است؟ قبل از پاسخ دادن به این پرسش، بیایید مثال دیگری (اتم کربن) را بررسی کنیم.

پیکربندی حالت پایه‌ی اتم کربن که با $(2p)^2(2s)^2(1s)^2$ داده می‌شود، بیان می‌کند که تکانه‌ی زاویه‌ای کل آن به وسیله‌ی دو الکترون $2p$ تعیین می‌شود. همانطور که در معادله‌های (۷-۱۷۴) تا (۷-۱۷۷) نشان داده شد، جفت کردن دو اسپین $s = 1/2$ ، دو مقدار $S = 0$ یا $S = 1$ را برای اسپین کل آنها نتیجه می‌دهد و همانطور که در مسأله‌ی حل شده‌ی ۷-۳ نشان داده شد، جفت کردن دو تکانه‌ی زاویه‌ای مداری منفرد $l = 1$ ، سه مقدار $L = 0, 1, 2$ را برای تکانه‌ی زاویه‌ای کل نتیجه می‌دهد. ولی اصل طرد ایجاب می‌کند که تابع موج کل باید پادمتقارن باشد یعنی بخش‌های اسپینی و مداری تابع موج باید تقارن‌های مخالفی داشته باشد. چون حالت اسپینی تک‌تایی $S = 0$ پادمتقارن است، حالت سه‌تایی $S = 1$ متقارن، حالت سه‌تایی مداری $L = 1$ پادمتقارن، حالت چهارتایی مداری $L = 2$ متقارن و حالت تک‌تایی مداری $L = 0$ متقارن است و حالت‌های زیر پادمتقارن‌اند:

$$^1D_2 \quad \text{یا} \quad ^3P_2, \quad ^3P_1, \quad ^3P_0, \quad ^1S_0 \quad (8-71)$$

از این رو هر یک از این حالت‌ها می‌توانند حالت پایه‌ی کربن باشند. دوباره، پرسشی که مطرح می‌شود این است که کدام یک از این حالت‌ها دارای پایین‌ترین انرژی است؟

برای پاسخ دادن به این پرسش و پرسش مربوط به (۸-۷۰) می‌توانیم از قاعده‌های هوند بهره ببریم: (الف) پایین‌ترین تراز انرژی متناظر با حالت با بزرگ‌ترین مقدار اسپین S (یعنی بیشترین تعداد الکترون‌هایی

که اسپین‌های جفت نشده دارند) است (ب) در بین حالت‌های با مقدار اسپین معلوم S ، پایین‌ترین تراز انرژی متناظر با حالت با بزرگ‌ترین مقدار L است (پ) زیرلایه‌ای که کوچک‌تر از نصف پایین‌ترین حالت انرژی پر است، متناظر با $J = |L - S|$ است و زیرلایه‌ای که بیشتر از نصف پایین‌ترین حالت انرژی پر است، متناظر با $J = L + S$.

قاعده‌ی سوم هوند به پرسش مربوط به (۸-۷) پاسخ می‌دهد: چون لایه‌ی $2p$ ی بور کوچک‌تر از نصف است، مقدار J متناظر با پایین‌ترین انرژی از رابطه‌ی $1/2 = 1/2 - 1/2 = 1 - 1/2 = 1/2$ به دست می‌آید. از این رو $2P_{1/2}$ حالت انرژی پایین‌تر است.

برای یافتن پایین‌ترین انرژی در بین حالت‌های (۷-۷)، قاعده‌ی نخست هوند ایجاب می‌کند که $S = 1$ باشد. چون سه‌تایی $S = 1$ متقارن است، به یک تابع موج فضایی پادمقارن نیاز داریم که با سه‌تایی فضایی $L = 1$ داده می‌شود. بنابراین سه انتخاب ممکن $J = 0, 1, 2$ برای ما باقی می‌ماند. قاعده‌ی سوم هوند مقدارهای $J = 1, 2$ را رد می‌کند. چون لایه‌ی $2p$ ی کربن کوچک‌تر از نیمه پر است، مقدار J متناظر با پایین‌ترین انرژی از $J = |L - S| = 1 - 1 = 0$ به دست می‌آید از این رو $3P_0$ حالت انرژی پایین‌تر است (جدول ۸-۱) یعنی دو الکترون در حالت‌های فضایی متفاوت یا اوربیتال‌های متفاوتی هستند (شکل ۸-۲). در واقع می‌توانیم این نتیجه را حدس بزنیم: چون هنگامی که دو الکترون با یکدیگر جفت می‌شوند، دافعه‌ی کولنی بین آنها بسیار بیشتر از زمانی است که جفت نشده‌اند، پیکربندی انرژی پایین‌تر متناظر با حالتی است که در آن الکترون‌ها در حالت‌های فضایی متفاوتی هستند. می‌توان پیکربندی‌های حالت پایه‌ی عنصرهای باقیمانده (اکسیژن تا آرگون) را به صورت مشابهی نتیجه گرفت (جدول ۸-۱).

عنصرهای $Z \geq 18$

هنگامی که لایه‌ی $3p$ پر شد، می‌توان انتظار داشت که الکترون بعدی در لایه‌ی $3d$ قرار می‌گیرد. ولی این وضعیت به دلیل روی دادن یک اثر جالب اتفاق نمی‌افتد: حالت‌های $4s$ دارای انرژی پایین‌تری نسبت به حالت‌های $3d$ هستند. اما چرا؟ در یک اتم هیدروژن حالت‌های $3s$ ، $3p$ و $3d$ دارای انرژی یکسانی $(E_3^{(e)} = -R/3^2 = -1/51 \text{ eV})$ زیرا $R = 13.6 \text{ eV}$ است) هستند. ولی در اتم‌های چند الکترونی، این حالت‌ها مقدارهای انرژی متفاوتی دارند. با افزایش l ، پتانسیل دافعه‌ی مؤثر $\hbar^2 l(l+1)/2mr^2$ موجب می‌شود الکترون‌های حالت d به سمت خارج رانده شوند و الکترون‌های حالت s به هسته نزدیک‌تر باقی بمانند. بنابراین الکترون‌های حالت s با نزدیک‌تر بودن به هسته، جاذبه‌ی کامل هسته را حس می‌کنند در حالی که الکترون‌های حالت d جاذبه‌ی بسیار کمتری را تجربه می‌کنند. این پدیده به عنوان اثر استتار شناخته می‌شود زیرا الکترون‌های داخلی‌تر یعنی الکترون‌های حالت s ، هسته را استتار می‌کنند از این رو الکترون‌های خارجی‌تر (الکترون‌های حالت d) جاذبه‌ی کامل هسته را تجربه نمی‌کنند و به جای آن، پتانسیل مؤثر ضعیفی را حس می‌کنند. در نتیجه، انرژی حالت $3d$ بزرگ‌تر از انرژی حالت $4s$ است. همچنین اثر استتار موجب

می‌شود حالت $5s$ انرژی کمتری نسبت به حالت $4d$ داشته باشد و به همین ترتیب. بنابراین به‌ازای یک n معلوم، انرژی‌های E_{nl} با افزایش l افزایش می‌یابند. در واقع با چشم‌پوشی از برهمکنش اسپین-مدار و در نظر گرفتن تصحیح‌های نسبیتی، در فصل ۹ نشان خواهیم داد ($90^\circ-9^\circ$) که انرژی حالت پایه به صورت $E_{nl}^{(0)} = Z^2 E_n^{(0)} \{1 + \alpha^2 Z^2 [2/(2l+1) - 3/4n]/n\}$ به عددهای کوانتومی اصلی و مداری n و l بستگی دارد که در آن $\alpha = 1/137$ ثابت ساختار ریزو $\alpha = 13.6 \text{ eV}/n^2 = -R/n^2 = E_n^{(0)}$ است. در پایان، می‌توان جدول تناوبی را با پر کردن اوربیتال‌ها به ترتیب افزایش انرژی E_{nl} به صورتی که در ادامه می‌آید، به دست آورد (جدول ۸-۱):

$$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^2, 3d^1, 4p^6, 5s^2, 4d^1, 5p^6, 6s^2, 4f^1, 5d^1, 6p^6, 7s^2, 5f^1, 6d^1, 7p^6, \dots \quad (8-72)$$

ملاحظات

ویژگی‌های شیمیایی یک عنصر بیشتر به وسیله لایه‌ی خارجی آن عنصر تعیین می‌شود. از این رو عنصرهای با پیکربندی‌های الکترونی لایه‌ی خارجی مشابه، ویژگی‌های شیمیایی مشابهی دارند. این موضوع، ایده‌ی پشت پرده‌ی ساختار جدول تناوبی است: جدول تناوبی به صورتی مرتب می‌شود که تمام عنصرهای واقع در یک ستون، ویژگی‌های شیمیایی مشابهی داشته باشند. به عنوان مثال، لایه‌ی خارجی $5p$ عنصرهای واقع در ستون آخر هلیوم، نئون، آرگون، کریپتون و ... کاملاً پر است (به استثنای هلیوم که لایه‌ی خارجی آن $1s$ است). این اتم‌ها زمانی که یک لایه یا زیرلایه پر می‌شود، تشکیل می‌شوند و بسیار پایدارند؛ با یکدیگر برهمکنش بسیار ضعیفی دارند و با عنصرهای دیگر برای تشکیل مولکول‌ها یا ترکیب‌های جدید ترکیب نمی‌شوند یعنی از نظر شیمیایی بی‌اثرند. این عنصرها برای از دست دادن یا گرفتن یک الکترون بسیار مقاومند. به دلیل این ویژگی‌ها، این عنصرها گازهای نجیب نامیده می‌شوند. این گازها نقطه‌ی جوش بسیار پایینی (حدود 20°C) دارند. توجه کنید که هر ردیف جدول تناوبی متناظر با پر شدن یک لایه یا زیرلایه‌ی اتم تا گاز نجیب بعدی است. پس از رسیدن به تراز بعدی هر یک از این عنصرها، با گاف انرژی قابل ملاحظه‌ای روبرو می‌شویم. همانطور که در جدول ۸-۱ نشان داده شده است، انرژی زیادی برای یونیده کرده این عنصرها لازم است به عنوان مثال، $24/58 \text{ eV}$ انرژی لازم است تا اتم هلیوم یونیده شود. اتم‌هایی که یک پوسته‌ی بسته (یا پیکربندی گاز نادر) به اضافه‌ی یک الکترون s (یا یک الکترون ظرفیت) دارند، مانند Li ، Na ، K و ...، پایین‌ترین انرژی بستگی را دارند. این عنصرها به عنوان فلزات قلیایی شناخته می‌شوند. در عنصرهایی که از یک اتم قلیایی به اضافه‌ی یک الکترون تشکیل شده‌اند، الکترون دوم s به دلیل بار بیشتر هسته، مقیدتر از الکترون ظرفیت اتم قلیایی است. با پر شدن تدریجی لایه‌ی p (ورای پیکربندی گاز نجیب)، در ابتدا انرژی بستگی تا پر شدن الکترون چهارم افزایش می‌یابد (مانند بور، کربن و نیتروژن) سپس

شروع به کاهش می‌کند (جدول ۸-۱). این به این دلیل است که وقتی لایه p کوچک‌تر از نیمه‌پر است، تمام اسپین‌ها موازی‌اند. از این رو تمام سه تابع موج فضایی پادمقارن‌اند. با پر شدن الکترون چهارم (مانند اکسیژن)، دو اسپین پادموازی یا جفت شده خواهند بود از این رو تابع موج فضایی به کلی پادمقارن نیست که موجب کاهش انرژی می‌شود. توجه کنید که عنصرهای با یک الکترون بیشتر با یک الکترون کمتر از پیکربندی گازهایی نجیب فعالیت شیمیایی بیشتری دارند زیرا تمایل دارند به آسانی یک الکترون را از دست بدهند یا بگیرند.

مثال ۴-۸

(الف) تکانه‌ی زاویه‌ای کل متناظر با 4G ، 3H و 1D را مشخص کنید.

(ب) نمادگذاری طیفی مربوط به پیکربندی‌های حالت پایه‌ی آلومینیوم ($Z = 13$) Al و اسکاندیم Sc ($Z = 21$) را بیابید.

حل

(الف) برای 4G ، تکانه‌ی زاویه‌ای مداری برابر با $L = 4$ و اسپین برابر با $S = 3/2$ است زیرا $4 = 1 + 3S$ است. مقادیر تکانه‌ی زاویه‌ای کل متناظر با جفت کردن $L = 4$ و $S = 3/2$ از $J = 4 + 3/2$ تا $J = 4 - 3/2$ به دست می‌آید. از این رو داریم: $J = 5/2, 7/2, 9/2, 11/2$. به صورت مشابه، برای 3H داریم: $S = 1$ و $L = 5$. بنابراین داریم: $5 + 1 \leq J \leq 5 - 1$ یا $J = 4, 5, 6$.

برای 1D داریم: $S = 0$ و $L = 2$. بنابراین داریم: $2 + 0 \leq J \leq 2 - 0$ یا $J = 2$.

(ب) پیکربندی حالت پایه‌ی Al به صورت $1^1(3p)(2^2(3s)[Ne]$ است. تکانه‌ی زاویه‌ای کل این عنصر به وسیله‌ی الکترون $3p$ تعیین می‌شود زیرا هم برای $[Ne]$ و هم برای $(3s)^2$ ، $S = 0$ و $L = 0$ است. چون الکترون $3p$ دارای $S = 1/2$ و $L = 1$ است، تکانه‌ی زاویه‌ای کل از $1 + 1/2 \leq J \leq 1 - 1/2$ به دست می‌آید. از این رو داریم: $J = 1/2, 3/2$. اما کدام یک از مقادیرهای $J = 1/2$ و $J = 3/2$ انرژی پایین‌تری دارد؟ مطابق با قاعده‌ی سوم هوند، چون لایه‌ی $3p$ کوچک‌تر از نیمه‌پر است، حالت $J = |L - S| = 1/2$ انرژی پایین‌تری دارد. از این رو پیکربندی حالت پایه‌ی Al متناظر با ${}^2P_{1/2}$ است (جدول ۸-۱) که در آن از نمادگذاری طیفی ${}^{2S+1}L_J$ استفاده کرده‌ایم.

چون پیکربندی حالت پایه‌ی Sc به صورت $1^1(3d)(4s)[Ar]$ است، تکانه‌ی زاویه‌ای از تکانه‌ی زاویه‌ای الکترون $3d$ به دست می‌آید. چون $S = 1/2$ و $L = 2$ است و چون لایه‌ی $3d$ کوچک‌تر از نیمه‌پر است، قاعده‌ی سوم هوند ایجاب می‌کند که تکانه‌ی زاویه‌ای کل از $2 - 1/2 = 3/2$ تا $J = |L - S| = 3/2$ به دست می‌آید. از این رو داریم: ${}^2D_{3/2}$.

۵-۸ مسأله‌های حل شده

مسأله‌ی ۱-۸

سیستمی متشکل از سه ذره‌ی غیربرهمکنشی را در نظر بگیرید که به حرکت در یک چاه پتانسیل نامتناهی یک‌بعدی به طول a محدود شده‌اند: $V(x) = 0$ به‌ازای $0 < x < a$ و $V(x) = \infty$ به‌ازای مقادیرهای دیگر x . انرژی و تابع موج حالت پایه و نخستین و دومین حالت برانگیخته را هنگامی که سه ذره (الف) بدون اسپین و تمایزپذیر با $m_1 < m_2 < m_3$ هستند (ب) بوزون یکسان‌اند (پ) ذره‌های یکسان با اسپین $\frac{1}{2}$ هستند (ت) ذره‌های تمایزپذیر با اسپین $\frac{1}{2}$ هستند، تعیین کنید.

حل

(الف) همانطور که در مثال ۲-۸ نشان داده شد، انرژی و تابع موج کل از رابطه‌های زیر به‌دست می‌آیند:

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2a^2} \left(\frac{n_1^2}{m_1} + \frac{n_2^2}{m_2} + \frac{n_3^2}{m_3} \right) \quad (۷۳-۸)$$

$$\psi_{n_1, n_2, n_3}(x_1, x_2, x_3) = \sqrt{\frac{\Lambda}{a^3}} \sin\left(\frac{n_1 \pi}{a} x_1\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi}{a} x_2\right) \sin\left(\frac{n_3 \pi}{a} x_3\right) \quad (۷۴-۸)$$

حالت پایه‌ی سیستم متناظر با حالتی است که در آن تمام سه ذره اوربیتال‌های حالت پایه‌ی مربوط

به خود را اشغال می‌کنند، $n_1 = n_2 = n_3 = 1$ از این رو

$$E^{(0)} = E_{1,1,1} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2a^2} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} + \frac{1}{m_3} \right) \quad (۷۵-۸)$$

$$\psi^{(0)}(x_1, x_2, x_3) = \psi_{1,1,1}(x_1, x_2, x_3) = \sqrt{\frac{\Lambda}{a^3}} \sin\left(\frac{\pi}{a} x_1\right) \sin\left(\frac{\pi}{a} x_2\right) \sin\left(\frac{\pi}{a} x_3\right) \quad (۷۶-۸)$$

چون ذره‌ی ۳ بیشترین جرم را دارد، نخستین حالت برانگیخته متناظر با حالتی است که در آن ذره‌ی ۳

در $n_3 = 2$ است در حالی که ذره‌های ۱ و ۲ در $n_1 = n_2 = 1$ باقی می‌مانند:

$$E^{(1)} = E_{1,1,2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2a^2} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} + \frac{4}{m_3} \right) \quad (۷۷-۸)$$

$$\psi^{(1)}(x_1, x_2, x_3) = \psi_{1,1,2}(x_1, x_2, x_3)$$

$$= \sqrt{\frac{\Lambda}{a^3}} \sin\left(\frac{\pi}{a} x_1\right) \sin\left(\frac{\pi}{a} x_2\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a} x_3\right) \quad (۷۸-۸)$$

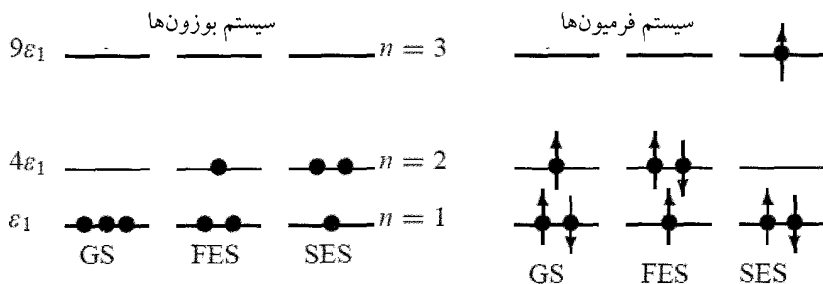
به‌صورت مشابه، دومین حالت برانگیخته متناظر با حالتی است که در آن ذره‌های ۲ و ۳ در $n_2 = n_3 = 2$

هستند در حالی که ذره‌ی ۱ در $n_1 = 1$ باقی می‌ماند:

$$E^{(2)} = E_{1,2,2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2a^2} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{4}{m_2} + \frac{4}{m_3} \right) \quad (۷۹-۸)$$

$$\begin{aligned} \psi^{(2)}(x_1, x_2, x_3) &= \psi_{1,2,2}(x_1, x_2, x_3) \\ &= \sqrt{\frac{\Lambda}{a^3}} \sin\left(\frac{\pi}{a}x_1\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}x_2\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}x_3\right) \quad (8-10) \end{aligned}$$

(ب) اگر تمام سه ذره بوزون‌های یکسانی باشند آنگاه حالت پایه متناظر با حالتی خواهد بود که در آن تمام سه ذره در پایین‌ترین حالت هستند، $n_1 = n_2 = n_3 = 1$ (شکل ۸-۳):



شکل ۸-۳ توزیع ذره‌ها در بین ترازهای حالت پایه (GS) و نخستین و دومین حالت برانگیخته (FES و SES) مربوط به سیستمی از سه بوزون غیربرهمکنشی یکسان (چپ) و سه فرمیون غیربرهمکنشی یکسان (راست) که در یک چاه نامتناهی با $\epsilon_1 = \hbar^2 \pi^2 / (2ma^2)$ حرکت می‌کنند. هر حالت سیستم فرمیون به دلیل جهت‌گیری‌های مختلف ممکن اسپین‌ها واگن چهارگانه است.

$$E^{(0)} = E_{1,1,1} = 3\epsilon_1 = \frac{3\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad (8-11)$$

$$\begin{aligned} \psi^{(0)} &= \psi_1(x_1)\psi_1(x_2)\psi_1(x_3) = \sqrt{\frac{\Lambda}{a^3}} \sin\left(\frac{\pi}{a}x_1\right) \sin\left(\frac{\pi}{a}x_2\right) \sin\left(\frac{\pi}{a}x_3\right) \quad (8-12) \\ \psi_n(x_i) &= \sqrt{2/a} \sin(n\pi x_i/a) \quad \text{زیرا} \end{aligned}$$

در نخستین حالت برانگیخته دو ذره در ψ_1 (هر یک با انرژی $\epsilon_1 = \hbar^2 \pi^2 / (2ma^2)$) و یک ذره در ψ_2 (با انرژی $\epsilon_2 = 4\hbar^2 \pi^2 / (2ma^2) = 4\epsilon_1$) داریم:

$$E^{(1)} = 2\epsilon_1 + \epsilon_2 = 2\epsilon_1 + 4\epsilon_1 = 6\epsilon_1 = \frac{3\hbar^2 \pi^2}{a^2} \quad (8-13)$$

دوباره تابع موج تا اندازه‌ای پیچیده است. چون ذره‌ها یکسانند، دیگر نمی‌توانیم بگوییم که کدام ذره در کدام حالت است. تمام آنچه که می‌توانیم بگوییم این است که دو ذره در ψ_1 و یک ذره در ψ_2 است. چون مقدار $n = 1$ دو بار روی می‌دهد (دو ذره در ψ_1 هستند)، از (۸-۶) و (۸-۱۰) نتیجه می‌گیریم که

$$\begin{aligned} \psi^{(1)}(x_1, x_2, x_3) &= \sqrt{\frac{2!}{3!}} [\psi_1(x_1)\psi_1(x_2)\psi_2(x_3) + \psi_1(x_1)\psi_2(x_2)\psi_1(x_3) \\ &\quad + \psi_2(x_1)\psi_1(x_2)\psi_1(x_3)] \quad (8-14) \end{aligned}$$

در دومین حالت برانگیخته، یک ذره در ψ_1 و دو ذره در ψ_2 داریم:

$$E^{(2)} = \varepsilon_1 + 2\varepsilon_2 = \varepsilon_1 + 8\varepsilon_2 = 9\varepsilon_1 = \frac{9\hbar^2\pi^2}{2ma^2} \quad (85-8)$$

حال، با توجه به این که مقدار $n = 2$ دو بار روی می‌دهد (دو ذره در ψ_2 هستند) و $n = 1$ تنها یک بار روی می‌دهد، از (8-6) و (8-61) داریم:

$$\psi^{(2)}(x_1, x_2, x_3) = \sqrt{\frac{2!}{3!}} [\psi_1(x_1)\psi_2(x_2)\psi_2(x_3) + \psi_2(x_1)\psi_1(x_2)\psi_2(x_3) + \psi_2(x_1)\psi_2(x_2)\psi_1(x_3)] \quad (86-8)$$

(پ) اگر سه ذره فرمیون‌های یکسان با اسپین $\frac{1}{2}$ باشند آنگاه حالت پایه متناظر با حالتی است که در آن دو ذره در پایین‌ترین حالت ψ_1 هستند (یکی از آنها دارای اسپین بالا $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = |+\rangle$ و دیگری دارای اسپین پایین $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = |-\rangle$ است) و ذره سوم در حالت بعدی ψ_2 است (اسپین آن می‌تواند بالا یا پایین باشد، $|\pm\rangle = |\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$) را ببینید. شکل 8-3 را ببینید. انرژی حالت پایه برابر است با

$$E^{(0)} = 2\varepsilon_1 + \varepsilon_2 = 2\varepsilon_1 + 4\varepsilon_1 = 6\varepsilon_1 = \frac{3\hbar^2\pi^2}{ma^2} \quad (87-8)$$

تابع موج حالت پایه پادمقارن است و مطابق با (8-55) از دترمینان زیر به دست می‌آید:

$$\psi^{(0)}(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1)\chi(S_1) & \psi_1(x_2)\chi(S_2) & \psi_1(x_3)\chi(S_3) \\ \psi_1(x_1)\chi(S_1) & \psi_1(x_2)\chi(S_2) & \psi_1(x_3)\chi(S_3) \\ \psi_2(x_1)\chi(S_1) & \psi_2(x_2)\chi(S_2) & \psi_2(x_3)\chi(S_3) \end{vmatrix} \quad (88-8)$$

این حالت، واگن چهارگانه است زیرا چهار روش متفاوت برای پیکربندی اسپین‌های سه فرمیون وجود دارد (حالت پایه‌ی (GS) نشان داده شده در شکل 8-3 تنها یکی از چهار پیکربندی است).

ملاحظات

باید مراقب بود تا به اشتباه نتیجه نگرفت که چون اولین و دومین سطر دترمینان (88-8) «یکسان‌اند» دترمینان برابر با صفر است. باید به خاطر داشت که حالت‌های اسپینی از $|\pm\rangle$ ، $\chi(S_1) = |\pm\rangle$ ، $\chi(S_2) = |\pm\rangle$ و $\chi(S_3) = |\pm\rangle$ به دست می‌آیند از این رو باید این حالت‌های اسپینی را به صورتی برگزینیم که دو سطر (یا دو ستون) دترمینان یکسان نباشند. به عنوان مثال، یکی از پیکربندی‌های ممکن تابع موج حالت پایه از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\psi^{(0)}(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1)|+\rangle & \psi_1(x_2)|-\rangle & \psi_1(x_3)|+\rangle \\ \psi_1(x_1)|-\rangle & \psi_1(x_2)|+\rangle & \psi_1(x_3)|+\rangle \\ \psi_2(x_1)|+\rangle & \psi_2(x_2)|+\rangle & \psi_2(x_3)|-\rangle \end{vmatrix} \quad (89-8)$$

این ملاحظات برای تابع‌های موج نخستین و دومین حالت برانگیخته‌ی (۸-۹۰) و (۸-۹۲) و همچنین برای تابع موج (۸-۱۰۹) نیز به‌کار می‌رود.

نخستین حالت برانگیخته متناظر با حالتی است که در آن یک ذره در پایین‌ترین حالت ψ_1 است (اسپین آن می‌تواند بالا یا پایین باشد) و دو ذره‌ی دیگر در حالت ψ_2 هستند (اسپین یکی بالا و اسپین دیگری پایین است). مانند حالت پایه، در اینجا نیز چهار روش متفاوت برای پیکربندی اسپین‌های سه فرمیون در نخستین حالت برانگیخته (FES) وجود دارد. FES نشان داده شده در شکل ۸-۳ تنها یکی از چهار پیکربندی است:

$$\psi^{(1)}(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1)\chi(S_1) & \psi_1(x_2)\chi(S_2) & \psi_1(x_3)\chi(S_3) \\ \psi_2(x_1)\chi(S_1) & \psi_2(x_2)\chi(S_2) & \psi_2(x_3)\chi(S_3) \\ \psi_2(x_1)\chi(S_1) & \psi_2(x_2)\chi(S_2) & \psi_2(x_3)\chi(S_3) \end{vmatrix} \quad (90-8)$$

این چهار حالت متفاوت متناظر با انرژی یکسان زیر هستند:

$$E^{(1)} = \varepsilon_1 + 2\varepsilon_2 = \varepsilon_1 + 8\varepsilon_1 = 9\varepsilon_1 = \frac{9\hbar^2\pi^2}{2ma^2} \quad (91-8)$$

انرژی برانگیختگی نخستین حالت برانگیخته برابر با $(2ma^2)^{-1} 3\hbar^2\pi^2 = 9\varepsilon_1 - 6\varepsilon_1 = E^{(1)} - E^{(0)}$ است. دومین حالت برانگیخته متناظر با دو ذره در پایین‌ترین حالت ψ_1 (یکی با اسپین بالا و دیگری با اسپین پایین) و ذره سوم در حالت سوم ψ_3 است (اسپین آن می‌تواند بالا یا پایین باشد). این حالت نیز چهار پیکربندی اسپینی متفاوت دارد از این رو واگن چهارگانه است:

$$\psi^{(2)}(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1)\chi(S_1) & \psi_1(x_2)\chi(S_2) & \psi_1(x_3)\chi(S_3) \\ \psi_1(x_1)\chi(S_1) & \psi_1(x_2)\chi(S_2) & \psi_1(x_3)\chi(S_3) \\ \psi_3(x_1)\chi(S_1) & \psi_3(x_2)\chi(S_2) & \psi_3(x_3)\chi(S_3) \end{vmatrix} \quad (92-8)$$

انرژی دومین حالت برانگیخته برابر است با

$$E^{(2)} = 2\varepsilon_1 + \varepsilon_3 = 2\varepsilon_1 + 9\varepsilon_1 = 11\varepsilon_1 = \frac{11\hbar^2\pi^2}{2ma^2} \quad (93-8)$$

انرژی برانگیختگی این حالت برابر با $(2ma^2)^{-1} 5\hbar^2\pi^2 = 11\varepsilon_1 - 6\varepsilon_1 = E^{(2)} - E^{(0)}$ است. (ت) اگر ذره‌ها فرمیون‌های تمایزپذیر باشند آنگاه هیچ محدودیتی روی تقارن تابع موج (نه روی بخش فضایی و نه روی بخش اسپینی) وجود نخواهد داشت. مقدارهای انرژی حالت پایه، نخستین حالت برانگیخته و دومین حالت برانگیخته مشابه با انرژی‌های به‌دست آمده در قسمت (الف) خواهد بود. تابع‌های موج این حالت‌ها تا اندازه‌ای با تابع‌های موج به‌دست آمده در قسمت (الف) تفاوت دارد. حالت‌های به‌دست آمده در (الف) غیر واگن‌اند ولی هر حالت سیستم مورد بحث ما در اینجا واگنی هشت‌گانه دارد زیرا جفت کردن

سه اسپین $\frac{1}{2}$ ، هشت حالت اسپینی متفاوت را نتیجه می‌دهد (فصل ۷). بنابراین تابع‌های موج سیستم از ضرب هر یک از تابع‌های موج فضایی $\psi^{(0)}(x_1, x_2, x_3)$ ، $\psi^{(1)}(x_1, x_2, x_3)$ و $\psi^{(2)}(x_1, x_2, x_3)$ که در (الف) به دست آمدند، در هر یک از هشت حالت اسپینی محاسبه شده در فصل ۷ به دست می‌آیند:

$$\left| 1, \frac{3}{2}, \pm \frac{3}{2} \right\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle \quad (۹۴-۸)$$

$$\left| 1, \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|j_1, j_2, j_3; \mp, \pm, \pm\rangle + |j_1, j_2, j_3; \pm, \mp, \pm\rangle + |j_1, j_2, j_3; \pm, \pm, \mp\rangle) \quad (۹۵-۸)$$

$$\left| 0, \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|j_1, j_2, j_3; \pm, \pm, \mp\rangle - |j_1, j_2, j_3; \mp, \pm, \pm\rangle) \quad (۹۶-۸)$$

$$\left| 1, \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{\mp 1}{\sqrt{6}} (|j_1, j_2, j_3; \pm, \pm, \mp\rangle - 2|j_1, j_2, j_3; \pm, \mp, \pm\rangle + |j_1, j_2, j_3; \mp, \pm, \pm\rangle) \quad (۹۷-۸)$$

مسئله‌ی ۲-۸

سیستمی متشکل از سه ذره‌ی غیربرهمکنشی یکسان با اسپین $\frac{1}{2}$ را در نظر بگیرید که در حالت اسپینی یکسان $\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$ قرار دارند و به حرکت در یک چاه پتانسیل نامتناهی یک بعدی به طول a محدود شده‌اند: $V(x) = 0$ به ازای $0 < x < a$ و $V(x) = \infty$ به ازای مقادیرهای دیگر x . انرژی و تابع موج حالت پایه، نخستین و دومین حالت برانگیخته را تعیین کنید.

حل

ابتدا باید یادآوری کنیم که انرژی و تابع موج ذره‌ای که در یک چاه پتانسیل نامتناهی حرکت می‌کند، از رابطه‌های $\varepsilon_n = n^2 \hbar^2 \pi^2 / (2ma^2)$ و $\psi_n(x_i) = \sqrt{2/a} \sin(n\pi x_i / 2)$ به دست می‌آیند. تابع موج این سیستم پادمتقارن است زیرا از فرم‌یون‌های یکسانی تشکیل شده است. علاوه بر این، چون هر سه ذره در حالت اسپینی یکسانی هستند، دودره نمی‌توانند در یک حالت باشند و هر تراز انرژی حداکثر به وسیله‌ی یک ذره اشغال می‌شود. به عنوان مثال، حالت پایه متناظر با حالتی است که در آن سه تراز پایین انرژی $n = 1, 2, 3$ هر کدام به وسیله‌ی یک ذره اشغال شده‌اند. بنابراین انرژی و تابع موج حالت پایه از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$E^{(0)} = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 = \varepsilon_1 + 4\varepsilon_1 + 9\varepsilon_1 = 14\varepsilon_1 = \frac{V \hbar^2 \pi^2}{ma^2} \quad (۹۸-۸)$$

$$\psi^{(0)}(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \psi_1(x_2) & \psi_1(x_3) \\ \psi_2(x_1) & \psi_2(x_2) & \psi_2(x_3) \\ \psi_3(x_1) & \psi_3(x_2) & \psi_3(x_3) \end{vmatrix} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (۹۹-۸)$$

نخستین حالت برانگیخته (از حالت پایه) با بالا بردن ذره‌ی سوم به تراز چهارم به دست می‌آید: ترازهای $n = 1, 2, 4$ هر یک به وسیله‌ی یک ذره اشغال می‌شوند و تراز سوم خالی است:

$$E^{(1)} = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_4 = \varepsilon_1 + 4\varepsilon_1 + 16\varepsilon_1 = 21\varepsilon_1 = \frac{21\hbar^2\pi^2}{2ma^2} \quad (100-8)$$

$$\psi^{(1)}(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \psi_1(x_2) & \psi_1(x_3) \\ \psi_2(x_1) & \psi_2(x_2) & \psi_2(x_3) \\ \psi_4(x_1) & \psi_4(x_2) & \psi_4(x_3) \end{vmatrix} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (101-8)$$

در دومین حالت برانگیخته، ترازهای $n = 1, 3, 4$ هر یک به وسیله‌ی یک ذره اشغال می‌شوند و تراز سوم خالی است:

$$E^{(2)} = \varepsilon_1 + \varepsilon_3 + \varepsilon_4 = \varepsilon_1 + 9\varepsilon_1 + 16\varepsilon_1 = 26\varepsilon_1 = \frac{13\hbar^2\pi^2}{ma^2} \quad (102-8)$$

$$\psi^{(2)}(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \psi_1(x_2) & \psi_1(x_3) \\ \psi_3(x_1) & \psi_3(x_2) & \psi_3(x_3) \\ \psi_4(x_1) & \psi_4(x_2) & \psi_4(x_3) \end{vmatrix} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (103-8)$$

مسأله‌ی ۳-۸

انرژی و تابع موج حالت پایه‌ی سیستمی از N ذره‌ی غیربرهمکنشی یکسان که در یک چاه نامتناهی یک‌بعدی محدود شده‌اند را هنگامی که این ذره‌ها (الف) بوزون و (ب) فرمیون‌هایی با اسپین $\frac{1}{2}$ هستند، بیابید. حل

انرژی و تابع موج ذره‌ای که در یک چاه نامتناهی حرکت می‌کند عبارتند از $\varepsilon_n = n^2\hbar^2\pi^2/(2ma^2)$ و $\psi_n(x_i) = \sqrt{2/a} \sin(n\pi x_i/a)$

(الف) در حالتی که در آن N ذره بوزون‌اند، حالت پایه از قرار دادن تمام ذره‌ها در حالت $n = 1$ به دست می‌آید. آنگاه انرژی و تابع موج از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$E^{(0)} = \varepsilon_1 + \varepsilon_1 + \varepsilon_1 + \dots + \varepsilon_1 = N\varepsilon_1 = \frac{N\hbar^2\pi^2}{2ma^2} \quad (104-8)$$

$$\begin{aligned} \psi^{(0)}(x_1, x_2, \dots, x_N) &= \prod_{i=1}^N \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi}{a} x_i\right) \\ &= \sqrt{\frac{2^N}{a^N}} \sin\left(\frac{\pi}{a} x_1\right) \sin\left(\frac{\pi}{a} x_2\right) \dots \sin\left(\frac{\pi}{a} x_N\right) \quad (105-8) \end{aligned}$$

(ب) در حالتی که در آن N ذره فرمیون با اسپین $\frac{1}{2}$ هستند، هر تراز می‌تواند حداکثر به وسیله‌ی دو ذره که دارای حالت‌های اسپینی متفاوت $|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$ هستند، اشغال شود. بنابراین حالت پایه از توزیع N ذره در بین $N/2$ تراز پایین با آهنگ دو ذره در هر تراز به دست می‌آید:

$$E^{(0)} = 2\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2 + 2\varepsilon_3 + \dots + 2\varepsilon_{N/2} = 2 \sum_{n=1}^{N/2} \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2} \sum_{n=1}^{N/2} n^2 \quad (106-8)$$

اگر N بزرگ باشد آنگاه می‌توانیم $\sum_{n=1}^{N/2} n^2$ را با استفاده از تقریب زیر محاسبه کنیم:

$$\sum_{n=1}^{N/2} n^2 \simeq \int_1^{N/2} n^2 dn \simeq \frac{1}{3} \left(\frac{N}{2}\right)^3 \quad (107-8)$$

از این رو انرژی حالت پایه از رابطه‌ی زیر به دست خواهد آمد:

$$E^{(0)} \simeq N^3 \frac{\hbar^2 \pi^2}{24ma^2} \quad (108-8)$$

انرژی میانگین به ازای هر ذره برابر با $(24ma^2)^{-1} N^2 \hbar^2 \pi^2$ است. در حالتی که در آن N زوج است، یک پیکر بندی ممکن تابع موج حالت پایه $\psi^{(0)}(x_1, x_2, \dots, x_N)$ به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1)\chi(S_1) & \psi_1(x_2)\chi(S_2) & \dots & \psi_1(x_N)\chi(S_N) \\ \psi_1(x_1)\chi(S_1) & \psi_1(x_2)\chi(S_2) & \dots & \psi_1(x_N)\chi(S_N) \\ \psi_2(x_1)\chi(S_1) & \psi_2(x_2)\chi(S_2) & \dots & \psi_2(x_N)\chi(S_N) \\ \psi_2(x_1)\chi(S_1) & \psi_2(x_2)\chi(S_2) & \dots & \psi_2(x_N)\chi(S_N) \\ \psi_3(x_1)\chi(S_1) & \psi_3(x_2)\chi(S_2) & \dots & \psi_3(x_N)\chi(S_N) \\ \psi_3(x_1)\chi(S_1) & \psi_3(x_2)\chi(S_2) & \dots & \psi_3(x_N)\chi(S_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{N/2}(x_1)\chi(S_1) & \psi_{N/2}(x_2)\chi(S_2) & \dots & \psi_{N/2}(x_N)\chi(S_N) \\ \psi_{N/2}(x_1)\chi(S_1) & \psi_{N/2}(x_2)\chi(S_2) & \dots & \psi_{N/2}(x_N)\chi(S_N) \end{vmatrix} \quad (109-8)$$

که در آن حالت اسپینی ذره‌ی i ام با $i = 1, 2, 3, \dots, N$ است. اگر N فرد باشد آنگاه باید آخرین سطر دترمینان را حذف کنیم.

مسئله‌ی ۴-۸

با چشم‌پوشی از برهمکنش اسپین-مدار و برهمکنش بین الکترون‌ها، ترازهای انرژی و تابع‌های موج سه تراز پایین یک اتم دو الکترونی را بیابید.

حل

مثال‌هایی از چنین سیستمی عبارتند از اتم هلیم ($Z = ۲$)، یون یک بار یونیده‌ی Li^+ ($Z = ۳$)، یون دو بار یونیده‌ی Be^{2+} ($Z = ۴$) و به همین ترتیب. با چشم‌پوشی از برهم‌کنش اسپین-مدار و برهم‌کنش بین الکترون‌ها ($V_{۱۲} = e^2/r_{۱۲} = e^2/|r_1 - r_2|$)، می‌توانیم هر الکترون را به صورتی که در میدان کولنی Ze هسته حرکت می‌کند، در نظر بگیریم. بنابراین هامیلتونی این سیستم برابر با مجموع هامیلتونی‌های دو الکترون است:

$$\hat{H} = \hat{H}_e^{(۱)} + \hat{H}_e^{(۲)} = \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{r_1} \right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{r_2} \right) \quad (۱۱۰-۸)$$

که در آن $\mu = Mm_e/(M + m_e)$ جرم m_e جرم هسته و M جرم الکترون است. در اینجا فرض کرده‌ایم که هسته در مبدا قرار دارد و الکترون‌ها در r_1 و r_2 واقع شده‌اند. معادله‌ی شرودینگر سیستم از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$[\hat{H}_e^{(۱)} + \hat{H}_e^{(۲)}] \Psi(r_1, S_1; r_2, S_2) = E_{n_1 n_2} \Psi(r_1, S_1; r_2, S_2) \quad (۱۱۱-۸)$$

که در آن انرژی $E_{n_1 n_2}$ برابر با مجموع انرژی الکترون‌ها است:

$$E_{n_1 n_2} = E_{n_1}^{(e)} + E_{n_2}^{(e)} = -\frac{Z^2 e^2}{2a_0} \frac{1}{n_1^2} - \frac{Z^2 e^2}{2a_0} \frac{1}{n_2^2} \quad (۱۱۲-۸)$$

که در آن $a_0 = \hbar^2/(me^2)$ شعاع بوهر است. تابع موج برابر با حاصل ضرب قسمت‌های فضایی و اسپینی است:

$$\Psi(r_1, S_1; r_2, S_2) = \psi(r_1, r_2) \chi(S_1, S_2) \quad (۱۱۳-۸)$$

که در آن S_1 و S_2 بردارهای اسپین الکترون‌ها هستند.

چون این سیستم از دو فرمیون (الکترون) یکسان تشکیل شده است، تابع موج آن باید پادمتقارن باشد. بنابراین قسمت فضایی پادمتقارن و قسمت اسپینی متقارن است:

$$\begin{aligned} \Psi(r_1, S_1; r_2, S_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_{n_1 l_1 m_1}(r_1) \phi_{n_2 l_2 m_2}(r_2) \\ &\quad - \phi_{n_2 l_2 m_2}(r_1) \phi_{n_1 l_1 m_1}(r_2)] \chi_{\text{سه‌تایی}}(S_1, S_2) \end{aligned} \quad (۱۱۴-۸)$$

یا قسمت فضایی متقارن و قسمت اسپینی پادمتقارن است:

$$\Psi(r_1, S_1; r_2, S_2) = \phi_{n_1 l_1 m_1}(r_1) \phi_{n_2 l_2 m_2}(r_2) \chi_{\text{تک‌تایی}}(S_1, S_2) \quad (۱۱۵-۸)$$

که در آن سه‌تایی χ و تک‌تایی χ که از جفت‌شدگی دو اسپین $\frac{1}{2}$ نتیجه می‌شوند، از (۶۷-۸) و (۶۸-۸) به دست می‌آیند.

حال بیابید تا ترازهای انرژی و تابع‌های موج سه تراز پایین را مشخص کنیم. حالت پایه متناظر با حالتی است که در آن هر دو الکترون پایین‌ترین تراز $|nlm\rangle = |1^0_0\rangle$ (یعنی $n_1 = n_2 = 1$) را اشغال کرده‌اند. می‌توان انرژی و تابع موج آن را از (۱۱۲-۸) و (۱۱۵-۸) نتیجه گرفت:

$$E^{(0)} = E_{11} = 2E_1^{(0)} = -2 \frac{Z^2 e^2}{2a_0} = -27.2 Z^2 eV \quad (116-8)$$

$$\Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{S}_1; \mathbf{r}_2, \mathbf{S}_2) = \phi_{100}(\mathbf{r}_1) \phi_{100}(\mathbf{r}_2) \chi_{\text{تک‌تابی}}(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2) \quad (117-8)$$

که در آن $\phi_{100}(\mathbf{r}) = R_{10}(r)Y_{00}(\Omega) = (1/\sqrt{\pi})(Z/a_0)^{3/2}e^{-Zr/a_0}$ است. در نخستین حالت برانگیخته، یک الکترون پایین‌ترین تراز $|nlm\rangle = |1^0_0\rangle$ و الکترون دیگر تراز $|2^0_0\rangle = |2^0_0\rangle$ را اشغال می‌کند. این حالت متناظر با $n_1 = 1$ و $n_2 = 2$ یا $n_1 = 2$ و $n_2 = 1$ است. بنابراین می‌توان انرژی و تابع موج آن را از (۱۱۲-۸) و (۱۱۴-۸) نتیجه گرفت:

$$\begin{aligned} E^{(1)} = E_{12} &= E_1^{(0)} + E_2^{(0)} = -\frac{Z^2 e^2}{2a_0} - \frac{1}{4} \frac{Z^2 e^2}{2a_0} \\ &= -\frac{5}{4} \times 13.6 Z^2 eV = -17.0 Z^2 eV \end{aligned} \quad (118-8)$$

$$\Psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{S}_1; \mathbf{r}_2, \mathbf{S}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_{100}(\mathbf{r}_1) \phi_{200}(\mathbf{r}_2) - \phi_{200}(\mathbf{r}_1) \phi_{100}(\mathbf{r}_2)] \chi_{\text{سه‌تابی}}(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2) \quad (119-8)$$

که در آن $\phi_{200}(\mathbf{r}) = R_{20}(r)Y_{00}(\Omega) = (1/\sqrt{4\pi})(Z/a_0)^{3/2}(1 - Zr/2a_0)e^{-Zr/2a_0}$ است. سرانجام انرژی و تابع موج دومین حالت برانگیخته که متناظر با حالتی است که در آن هر دو الکترون تراز دوم $|nlm\rangle = |2^0_0\rangle$ (یعنی $n_1 = n_2 = 2$) را اشغال کرده‌اند را می‌توان از (۱۱۲-۸) و (۱۱۵-۸) نتیجه گرفت:

$$\begin{aligned} E^{(2)} = E_{22} &= E_2^{(0)} + E_2^{(0)} = 2E_2^{(0)} = -\frac{1}{2} \frac{Z^2 e^2}{2a_0} \\ &= -\frac{1}{2} \times 13.6 Z^2 eV = -6.8 Z^2 eV \end{aligned} \quad (120-8)$$

$$\Psi_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{S}_1; \mathbf{r}_2, \mathbf{S}_2) = \phi_{200}(\mathbf{r}_1) \phi_{200}(\mathbf{r}_2) \chi_{\text{تک‌تابی}}(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2) \quad (121-8)$$

به‌وضوح انتظار نمی‌رود که این نتیجه درست باشد زیرا با چشم‌پوشی از برهمکنش کولنی بین الکترون‌ها، تقریب غیردقیق فاحشی زده‌ایم. به‌عنوان مثال، مقدار عددی انرژی حالت پایه‌ی به‌دست آمده از (۱۱۲-۸) برای اتم هلیوم برابر است با $E_{\text{نظری}}^{(0)} = -108.78 eV$ در حالی که مقدار تجربی برابر با است $E_{\text{تجربی}}^{(0)} = -78.975 eV$ یعنی مقدار نظری به اندازه‌ی 37.8% کوچک‌تر از مقدار تجربی است. در فصل ۹ نشان خواهیم داد که چگونه از نظریه‌ی اختلال و روش وردشی برای به‌دست آوردن مقدارهای بسیار دقیق نظری برای ترازهای انرژی اتم‌های دو الکترونی استفاده می‌کنیم.

مسأله‌ی ۵-۸

ترازهای انرژی و تابع‌های موج حالت پایه و نخستین حالت برانگیخته‌ی سیستمی متشکل از دو ذره‌ی غیربرهمکنشی یکسان که در پتانسیل یک نوسانگر هماهنگ خارجی مشترک حرکت می‌کنند را برای (الف) دو ذره با اسپین ۱ و بدون تکانه‌ی زاویه‌ای مداری و (ب) دو ذره با اسپین $\frac{1}{2}$ بیابید.

حل

چون ذره‌ها غیربرهمکنشی و یکسان‌اند، هامیلتونی آنها برابر با $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$ است که در آن \hat{H}_1 و \hat{H}_2 هامیلتونی‌های ذره‌های ۱ و ۲ هستند: $\hat{H}_j = -(\hbar^2/2m)d^2/dx_j^2 + m\omega x_j^2/2$ با $j = 1, 2$. انرژی کل سیستم برابر با $E_{n_1, n_2} = \varepsilon_{n_1} + \varepsilon_{n_2}$ است که در آن $\varepsilon_{n_j} = (n_j + \frac{1}{2})\hbar\omega$ است. (الف) هنگامی که سیستم از ذره‌های یکسان با اسپین ۱ تشکیل می‌شود، تابع موج کل این سیستم باید متقارن باشد. بنابراین قسمت‌های فضایی و اسپینی هر دو باید متقارن یا پادمقارن باشند:

$$\Psi(x_1, S_1; x_2, S_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_s(x_1, x_2)\chi_s(S_1, S_2) + \psi_a(x_1, x_2)\chi_a(S_1, S_2)] \quad (122-8)$$

که در آن

$$\psi_s(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2) + \psi_{n_1}(x_2)\psi_{n_2}(x_1)] \quad (123-8)$$

$$\psi_a(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2) - \psi_{n_1}(x_2)\psi_{n_2}(x_1)] \quad (124-8)$$

که در آن $\psi_n(x)$ تابع موج نوسانگر هماهنگ برای حالت n است. به‌عنوان مثال، حالت پایه و نخستین حالت برانگیخته به‌صورت زیر هستند:

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}x_0}} \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right), \quad \psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{\sqrt{\pi}x_0^3}} x \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right) \quad (125-8)$$

با $x_0 = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$

می‌توان حالت‌های اسپینی $\chi(S_1, S_2)$ را با جفت کردن اسپین‌های دو ذره ($S_1 = 1$ و $S_2 = 1$) به‌دست آورد: $S = S_1 + S_2$. همانطور که در فصل ۷ نشان داده شد، حالت‌های اسپینی متناظر با $S = 2$ از رابطه‌های زیر به‌دست می‌آیند:

$$|2, \pm 2\rangle = |1, 1; \pm 1, \pm 1\rangle, \quad |2, \pm 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 1; \pm 1, 0\rangle + |1, 1; 0, \pm 1\rangle) \quad (126-8)$$

$$|2, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} (|1, 1; 1, -1\rangle + 2|1, 1; 0, 0\rangle + |1, 1; -1, 1\rangle) \quad (127-8)$$

حالت‌های اسپینی متناظر با $S = 1$ از رابطه‌های زیر به‌دست می‌آیند:

$$|1, \pm 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\pm |1, 1; \pm 1, 0\rangle \mp |1, 1; 0, \pm 1\rangle) \quad (128-8)$$

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 1; 1, -1\rangle - |1, 1; -1, 1\rangle) \quad (129-8)$$

و حالت اسپینی متناظر با $S = 0$ از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|1, 1; 1, -1\rangle - |1, 1; 0, 0\rangle + |1, 1; -1, 1\rangle) \quad (130-8)$$

واضح است که پنج حالت $|2, m_s\rangle$ متناظر با $S = 2$ و سه حالت $|0, 0\rangle$ متناظر اند در حالی که سه حالت $|1, m_s\rangle$ پادمقارن‌اند. بنابراین $\chi_s(S_1, S_2)$ از هر یک از شش حالت $|2, \pm 2\rangle, |2, \pm 1\rangle, |2, 0\rangle$ و $|0, 0\rangle$ به دست

می‌آید. در رابطه با $\chi_a(S_1, S_2)$ باید گفت که از هر یک از سه حالت $|2, \pm 1\rangle$ و $|1, 0\rangle$ به دست می‌آید.

حالت پایه متناظر با حالتی است که در آن هر دو ذره در حالت‌های پایه‌ی مربوط به خود هستند:

$n_1 = n_2 = 0$. آنگاه انرژی از رابطه‌ی $E^{(0)} = \varepsilon_0 + \varepsilon_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{1}{2}\hbar\omega = \hbar\omega$ به دست می‌آید.

چون $\psi_a(x_1, x_2)$ که از (۱۲۴-۸) به دست می‌آید به ازای $n_1 = n_2 = 0$ صفر می‌شود، تابع موج حالت

پایه‌ی (۱۲۲-۸) به رابطه‌ی زیر کاهش می‌یابد:

$$\begin{aligned} \Psi_0(x_1, S_1; x_2, S_2) &= \psi_0(x_1)\psi_0(x_2)\chi_s(S_1, S_2) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi x_0}} \exp\left(-\frac{x_1^2 + x_2^2}{2x_0^2}\right) \chi_s(S_1, S_2) \end{aligned} \quad (131-8)$$

که در آن $\psi_0(x)$ از (۱۲۵-۸) به دست می‌آید. بنابراین حالت پایه واگن شش‌گانه است زیرا شش حالت اسپینی $\chi_s(S_1, S_2)$ وجود دارند که متناظرند.

در نخستین حالت برانگیخته، یک ذره تراز حالت پایه‌ی $n = 0$ را اشغال می‌کند و ذره‌ی دیگر در

نخستین حالت برانگیخته‌ی $n = 1$ است. این وضعیت متناظر با دو بیکربندی ممکن است: $n_1 = 0$ و

$n_2 = 1$ یا $n_1 = 1$ و $n_2 = 0$. آنگاه انرژی از رابطه‌ی $E^{(1)} = \varepsilon_0 + \varepsilon_1 = \frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{3}{2}\hbar\omega = 2\hbar\omega$ به دست می‌آید.

می‌توان نخستین حالت برانگیخته را از (۱۲۲-۸) تا (۱۲۴-۸) نتیجه گرفت:

$$\begin{aligned} \Psi_1(x_1, S_1; x_2, S_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_0(x_1)\psi_1(x_2) + \psi_0(x_2)\psi_1(x_1)]\chi_s(S_1, S_2) \\ &\quad + \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_0(x_1)\psi_1(x_2) - \psi_0(x_2)\psi_1(x_1)]\chi_a(S_1, S_2) \end{aligned} \quad (132-8)$$

که در آن $\psi_0(x)$ و $\psi_1(x)$ در (۱۲۵-۸) فهرست شده‌اند. نخستین حالت برانگیخته واگن نه‌گانه است

زیرا شش حالت اسپینی $\chi_s(S_1, S_2)$ وجود دارند که متناظرند و سه حالت اسپینی $\chi_a(S_1, S_2)$

وجود دارند که پادمقارن‌اند.

(ب) برای سیستمی متشکل از دو فرمیون یکسان، تابع موج باید پادمقارن باشد و قسمت‌های فضایی

و اسپینی باید تقارن مخالف داشته باشند:

$$\Psi(x_1, S_1; x_2, S_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_s(x_1, x_2)\chi_{\text{تایب}}(S_1, S_2) + \psi_a(x_1, x_2)\chi_{\text{سه‌تایب}}(S_1, S_2)] \quad (133-8)$$

که در آن حالت اسپینی متقارن (S_1, S_2) سهم‌تایی χ از حالت‌های سه‌تایی فهرست شده در (۸-۶۷) و حالت اسپینی پادمقارن (S_1, S_2) سهم‌تایی χ از حالت (تک‌تایی) (۸-۶۸) به‌دست می‌آید.

حالت پایه‌ی دو ذره با اسپین $\frac{1}{2}$ متناظر با حالتی است که در آن هر دو ذره پایین‌ترین تراز $n_1 = n_2 = 0$ را اشغال می‌کنند و حالت‌های اسپینی متفاوتی دارند. آنگاه انرژی از رابطه‌ی $E^{(0)} = \varepsilon_0 + \varepsilon_0 = \hbar\omega$ و تابع موج از رابطه‌ی زیر به‌دست می‌آید:

$$\begin{aligned} \Psi_0(x_1, S_1; x_2, S_2) &= \psi_0(x_1)\psi_0(x_2)\chi_{\text{تک‌تایی}}(S_1, S_2) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi x_0}} \exp\left(-\frac{x_1^2 + x_2^2}{2x_0^2}\right) \chi_{\text{تک‌تایی}}(S_1, S_2) \end{aligned} \quad (8-134)$$

زیرا $\psi_a(x_1, x_2)$ به‌آزای $n_1 = n_2 = 0$ صفر می‌شود. حالت پایه واگن نیست زیرا تنها یک حالت اسپینی وجود دارد که پادمقارن است: $\chi_{\text{تک‌تایی}}(S_1, S_2)$.

نخستین حالت برانگیخته نیز متناظر با $n_1 = 0$ یا $n_2 = 1$ یا $n_1 = 1$ و $n_2 = 0$ است. آنگاه انرژی از رابطه‌ی $E^{(1)} = \varepsilon_0 + \varepsilon_1 = 2\hbar\omega$ و تابع موج از رابطه‌ی زیر به‌دست می‌آید:

$$\begin{aligned} \Psi_1(x_1, S_1; x_2, S_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_0(x_1)\psi_1(x_2) + \psi_0(x_2)\psi_1(x_1)] \chi_{\text{تک‌تایی}}(S_1, S_2) \\ &\quad + \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_0(x_1)\psi_1(x_2) - \psi_0(x_2)\psi_1(x_1)] \chi_{\text{سهم‌تایی}}(S_1, S_2) \end{aligned} \quad (8-135)$$

این حالت واگن چهارگانه است زیرا سه حالت اسپینی (S_1, S_2) سهم‌تایی وجود دارند که متقارن‌اند و یک حالت اسپینی (S_1, S_2) تک‌تایی وجود دارد که پادمقارن می‌باشد.

۶-۸ تمرین‌ها

- سیستمی از سه بوزون غیربرهمکنشی یکسان را در نظر بگیرید که در پتانسیل یک نوسانگر هماهنگ خارجی یک‌بعدی مشترک حرکت می‌کنند. ترازهای انرژی و تابع‌های موج حالت پایه، نخستین و دومین حالت برانگیخته‌ی سیستم را بیابید.
- دو ذره‌ی یکسان با اسپین $\frac{1}{2}$ را در نظر بگیرید که در یک جعبه‌ی مکعبی به ضلع L محدودند. انرژی و تابع موج این سیستم را در حالتی که برهمکنشی بین ذره‌ها وجود ندارد، بیابید.
- (الف) سیستمی از دو ذره‌ی غیریکسان هر یک با اسپین $\frac{1}{2}$ که تکانه‌ی زاویه‌ای ندارند (یعنی هر دو ذره در حالت‌های s هستند) را در نظر بگیرید. تمام حالت‌های ممکن را برای این سیستم بنویسید.
(ب) اگر دو ذره یکسان باشند آنگاه به چه محدودیت‌هایی بر خواهیم خورد؟ تمام حالت‌های ممکن را برای این سیستم متشکل از دو ذره‌ی یکسان با اسپین $\frac{1}{2}$ بنویسید.

۴. دو ذره‌ی یکسان با اسپین $\frac{1}{2}$ در یک جعبه‌ی پتانسیل یک‌بعدی به طول L با دیواره‌هایی صلب واقع در $x = 0$ و $x = L$ محصورند. با فرض آن که سیستم دو ذره‌ای در یک حالت اسپینی سه‌تایی است، ترازهای انرژی، تابع‌های موج و واگنی‌های متناظر با پایین‌ترین سه حالت را بیابید.
۵. دو ذره‌ی یکسان با اسپین $\frac{1}{2}$ در یک جعبه‌ی پتانسیل یک‌بعدی به طول L با دیواره‌هایی صلب در $x = 0$ و $x = L$ محصور شده‌اند. با فرض آن که سیستم دو ذره‌ای در یک حالت اسپینی تک‌تایی است، ترازهای انرژی، تابع‌های موج و واگنی‌های متناظر با پایین‌ترین سه حالت را بیابید.
۶. دو ذره‌ی یکسان با اسپین $\frac{1}{2}$ تحت تأثیر پتانسیل یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی حرکت می‌کنند. با فرض آن که سیستم دو ذره‌ای در یک حالت اسپینی سه‌تایی است، ترازهای انرژی، تابع‌های موج و واگنی‌های متناظر با پایین‌ترین سه حالت را بیابید.
۷. انرژی حالت پایه، انرژی حالت پایه‌ی میانگین به‌ازای هر ذره و تابع موج حالت پایه‌ی سیستمی متشکل از N بوزون غیربرهمکنشی یکسان که تحت تأثیر پتانسیل یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی حرکت می‌کنند را بیابید.
۸. انرژی حالت پایه، انرژی حالت پایه‌ی میانگین به‌ازای هر ذره و تابع موج حالت پایه‌ی سیستمی متشکل از N ذره‌ی غیربرهمکنشی یکسان با اسپین $\frac{1}{2}$ که تحت تأثیر پتانسیل یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی حرکت می‌کنند را برای دو حالت زیر بیابید:
(الف) هنگامی که N زوج است. (ب) هنگامی که N فرد است.
۹. سیستمی از چهار ذره‌ی غیربرهمکنشی که به حرکت در یک چاه پتانسیل نامتناهی یک‌بعدی به طول a محدود شده‌اند را در نظر بگیرید: $V(x) = 0$ به‌ازای $0 < x < a$ و $V(x) = \infty$ به‌ازای مقادیرهای دیگر x . انرژی‌ها و تابع‌های موج حالت پایه، نخستین و دومین حالت برانگیخته را هنگامی که چهار ذره: (الف) بوزون‌های تمایزپذیرند به‌طوری که جرم آنها در رابطه‌ی $m_1 < m_2 < m_3 < m_4$ صدق می‌کند و (ب) بوزون‌های یکسان (هر یک به جرم m) هستند، تعیین کنید.
۱۰. سیستمی از چهار ذره‌ی غیربرهمکنشی یکسان با اسپین $\frac{1}{2}$ (هر یک به جرم m) را در نظر بگیرید که به حرکت در یک چاه پتانسیل نامتناهی یک‌بعدی به طول a محدود شده‌اند: $V(x) = 0$ به‌ازای $0 < x < a$ و $V(x) = \infty$ به‌ازای مقادیرهای دیگر x . انرژی‌ها و تابع‌های موج حالت پایه و سه حالت برانگیخته‌ی نخست را تعیین کنید. شکلی رسم کنید که نشان دهد که چگونه این ذره‌ها در بین ترازها توزیع می‌شوند.
۱۱. سیستمی از چهار ذره‌ی غیربرهمکنشی یکسان با اسپین $\frac{1}{2}$ را در نظر بگیرید که در حالت اسپینی یکسان $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ و محدود به حرکت در یک چاه پتانسیل نامتناهی یک‌بعدی به طول a هستند: $V(x) = 0$ به‌ازای $0 < x < a$ و $V(x) = \infty$ به‌ازای مقادیرهای دیگر x . انرژی و تابع موج حالت پایه، نخستین و دومین حالت برانگیخته را تعیین کنید.

۱۲. با فرض آن که الکترون‌ها در اتم هلیوم بوزون‌های بدون اسپین باشند و با چشم‌پوشی از برهمکنش‌های بین آنها، انرژی و تابع موج حالت پایه و نخستین حالت برانگیخته‌ی این سیستم (فرضی) را بیابید.

۱۳. با فرض آن که الکترون‌ها در اتم لیتیوم بوزون‌های بدون اسپین باشند و با چشم‌پوشی از برهمکنش‌های بین آنها، انرژی و تابع موج حالت پایه و نخستین حالت برانگیخته‌ی این سیستم (فرضی) را بیابید.

۱۴. سیستمی از دو ذره‌ی غیربرهمکنشی یکسان با اسپین $\frac{1}{2}$ (به جرم m) را در نظر بگیرید که به حرکت در یک چاه پتانسیل نامتناهی یک‌بعدی به طول L محدود شده‌اند: $V(x) = 0$ به‌ازای $0 < x < L$ و $V(x) = \infty$ به‌ازای مقادیرهای دیگر x . فرض کنید ذره‌ها در حالتی با تابع موج

$$\Psi(x_1, x_2) = \frac{\sqrt{2}}{L} \left[\sin\left(\frac{2\pi x_1}{L}\right) \sin\left(\frac{5\pi x_2}{L}\right) + \sin\left(\frac{5\pi x_1}{L}\right) \sin\left(\frac{2\pi x_2}{L}\right) \right] \chi(s_1, s_2)$$

قراردارند که در آن x_1 و x_2 به‌ترتیب مکان ذره‌های ۱ و ۲ هستند و $\chi(s_1, s_2)$ حالت اسپینی دو ذره است: (الف) آیا $\chi(s_1, s_2)$ می‌تواند یک حالت تک‌تایی یا سه‌تایی باشد؟ (ب) انرژی این سیستم را بیابید.

۱۵. سیستمی از دو ذره‌ی غیربرهمکنشی یکسان با اسپین $\frac{1}{2}$ (به جرم m) را در نظر بگیرید که به حرکت در پتانسیل یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی مشترک محدود شده‌اند. با فرض آن که ذره‌ها در حالتی با تابع موج

$$\Psi(x_1, x_2) = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi x_0^2}} (x_2 - x_1) \exp\left(-\frac{x_1^2 + x_2^2}{2x_0^2}\right) \chi(s_1, s_2)$$

قراردارند که در آن x_1 و x_2 به‌ترتیب مکان ذره‌های ۱ و ۲ هستند و $\chi(s_1, s_2)$ حالت اسپینی دو ذره است: (الف) آیا $\chi(s_1, s_2)$ می‌تواند یک حالت تک‌تایی یا سه‌تایی باشد؟ (ب) انرژی این سیستم را بیابید.

۱۶. سیستمی از پنج الکترون غیربرهمکنشی را (با تقریبی که در آن از برهمکنش کولنی بین الکترون‌ها چشم‌پوشی می‌شود) در نظر بگیرید که به حرکت در یک چاه پتانسیل نامتناهی یک‌بعدی مشترک به طول $L = 0.5 \text{ nm}$ محدودند: $V(x) = 0$ به‌ازای $0 < x < L$ و $V(x) = \infty$ به‌ازای مقادیرهای دیگر x . (الف) انرژی حالت پایه‌ی سیستم را بیابید.

(ب) انرژی نخستین حالت برانگیخته‌ی سیستم را بیابید.

(پ) انرژی برانگیختگی نخستین حالت برانگیخته را بیابید.

۱۷. پیکربندی‌های الکترونی حالت پایه را برای اتم‌هایی که دارای $Z = 40, 53, 70, 82$ الکترون هستند، بیابید.

۱۸. مقدارهای J ممکن (یعنی تکانه‌های زاویه‌ای کل) وابسته به هر یک از حالت‌های 1P ، 3F ، 3G و 1H را مشخص کنید.

۱۹. نمادگذاری طیفی ${}^2S+1L_J$ پیکربندی حالت پایه‌ی

Sc ($Z = 21$) (الف)

Cu ($Z = 29$) (ب)

را بیابید (یعنی L ، S و J مربوط به هر یک را بیابید).

فصل نهم

روش‌های تقریب برای حالت‌های مانا

۹-۱ مقدمه

بسیاری از مسأله‌هایی که در مکانیک کوانتومی با آنها روبرو می‌شویم را نمی‌توان به صورت دقیق حل کرد. جواب‌های دقیق معادله‌ی شرودینگر تنها برای تعداد کمی از سیستم‌های ایده‌آل وجود دارند. برای حل مسأله‌های عمومی باید از روش‌های تقریبی استفاده کرد. روش‌های تقریبی گوناگونی گسترش یافته‌اند و هر یک کاربردهای مربوط به خود را دارند. در این فصل روش‌های تقریبی را بررسی می‌کنیم که با حالت‌های مانای متناظر با هامیلتونی‌های مستقل از زمان سروکار دارند. در فصل بعد، به روش‌های تقریبی مربوط به هامیلتونی‌هایی که به صورت صریح به زمان وابسته‌اند، خواهیم پرداخت.

برای مطالعه‌ی مسائل حالت مانا بر روی سه روش تقریبی متمرکز می‌شویم: نظریه‌ی اختلال، روش وردشی و روش WKB .

نظریه‌ی اختلال بر مبنای این فرض است که مسأله‌ای که می‌خواهیم آن را حل کنیم، اندکی متفاوت از مسأله‌ای است که می‌توان آن را به صورت دقیق حل کرد. در حالتی که در آن انحراف بین دو مسأله اندک است، نظریه‌ی اختلال برای محاسبه‌ی سهم وابسته به این انحراف مناسب است. آنگاه این سهم به صورت یک تصحیح به انرژی و تابع موج هامیلتونی که به صورت دقیق قابل حل است، افزوده می‌شود. بنابراین نظریه‌ی اختلال بر مبنای جواب‌های دقیق معلوم برای به دست آوردن جواب‌های تقریبی است.

اما در مورد سیستم‌هایی که هامیلتونی آنها را نمی‌توان به یک قسمت دقیقاً قابل حل به اضافه‌ی یک تصحیح کوچک کاهش داد، چه باید کرد؟ در پاسخ باید گفت که برای این سیستم‌ها می‌توانیم روش وردشی یا تقریب WKB را در نظر بگیریم. به‌خصوص روش وردشی در تخمین ویژه‌مقدارهای انرژی حالت پایه و چند حالت برانگیخته‌ی نخست سیستمی که برای آن تنها ایده‌ای کیفی پیرامون شکل تابع موج در دست داریم، مفید است. روش WKB روشی است مفید برای یافتن ویژه‌مقدارهای انرژی و تابع‌های موج سیستم‌هایی که برای آنها حد کلاسیک معتبر است. بر خلاف نظریه‌ی اختلال، روش‌های وردشی و WKB نیازی به وجود هامیلتونی دقیقاً مرتبط که می‌توان آن را به صورت دقیق حل کرد، ندارند.

کاربرد روش‌های تقریب در مطالعه‌ی حالت‌های مانا، از یافتن ویژه‌مقدارهای انرژی E_n و ویژه‌تابع‌های $|\psi_n\rangle$ هامیلتونی مستقل از زمان \hat{H} که دارای جواب‌های دقیق نیست، تشکیل شده است:

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \quad (۱-۹)$$

بسته به ساختار \hat{H} ، می‌توانیم از هر یک از سه روشی که پیشتر به آنها اشاره شد، برای یافتن جواب‌های تقریبی این مسأله‌ی ویژه‌مقدار استفاده کنیم.

۹-۲ نظریه‌ی اختلال مستقل از زمان

این روش بیشتر زمانی مناسب است که \hat{H} بسیار نزدیک به هامیلتونی \hat{H}_0 باشد که می‌توان آن را به صورت دقیق حل کرد. در این حالت می‌توان \hat{H} را به دو قسمت مستقل از زمان جدا کرد:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_p \quad (۲-۹)$$

که در آن \hat{H}_p در مقایسه با \hat{H}_0 بسیار کوچک است (\hat{H}_0 به عنوان هامیلتونی سیستم مختل نشده شناخته می‌شود). در نتیجه \hat{H}_p اختلال نامیده می‌شود زیرا اثر آن روی طیف انرژی و ویژه‌تابع‌ها بسیار کوچک خواهد بود. با چنین اختلالی به عنوان مثال در سیستم‌هایی که تحت تأثیر میدان‌های الکتریکی یا مغناطیسی ضعیف قرار می‌گیرند، روبرو می‌شویم. می‌توانیم این ایده را با نوشتن \hat{H}_p برحسب پارامتر حقیقی بدون بعد λ که بسیار کوچک‌تر از ۱ است، به صورت صریح‌تر بنویسیم:

$$\hat{H}_p = \lambda \hat{W} \quad (\lambda \ll 1) \quad (۳-۹)$$

بنابراین مسأله‌ی ویژه‌مقدار (۱-۹) به صورت زیر در می‌آید:

$$(\hat{H}_0 + \lambda \hat{W})|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \quad (۴-۹)$$

در ادامه قصد داریم تا بسته به این که جواب‌های دقیق \hat{H}_0 غیرواگن یا واگن باشند، دو حالت جدا از هم را در نظر بگیریم. هر یک از این دو حالت نیازمند طرح تقریبی مربوط به خود است.

۱-۲-۹ نظریه‌ی اختلال غیرواگن

در این بخش مطالعه‌ی خود را به حالت‌هایی محدود می‌کنیم که در آنها \hat{H}_0 دارای ویژه‌مقدارهای واگن نیست. یعنی به ازای هر انرژی $E_n^{(0)}$ تنها یک ویژه‌حالت $|\phi_n\rangle$ متناظر وجود دارد:

$$\hat{H}_0 |\phi_n\rangle = E_n^{(0)} |\phi_n\rangle \quad (5-9)$$

که در آن ویژه‌مقدارهای دقیق $E_n^{(0)}$ و ویژه‌تابع‌های دقیق $|\phi_n\rangle$ معلوم‌اند. ایده‌ی اصلی نظریه‌ی اختلال از این فرض تشکیل شده است که می‌توان ویژه‌مقدارها و ویژه‌تابع‌های مختل شده را به صورت سری توانی برحسب پارامتر λ بسط داد:

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \quad (6-9)$$

$$|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots \quad (7-9)$$

باید ملاحظاتی را که در ادامه می‌آیند، در نظر داشته باشیم. ابتدا این که ممکن است تصور شود که هر وقت اختلال به اندازه‌ی کافی ضعیف باشد آنگاه بسط‌های (۶-۹) و (۷-۹) همیشه وجود دارند. متأسفانه، این همیشه درست نیست. حالت‌هایی وجود دارند که در آنها اختلال کوچک است ولی E_n و $|\psi_n\rangle$ قابل بسط برحسب توان‌های λ نیستند. دوم این که سری‌های (۶-۹) و (۷-۹) اغلب همگرا نیستند. به هر حال هنگامی که λ کوچک است، چند جمله‌ی نخست، توصیف قابل اعتمادی از سیستم را فراهم می‌کنند. بنابراین در عمل، تنها یک یا دو جمله‌ی این بسط‌ها را نگه می‌داریم از این‌رواز مسأله‌ی غیرهمگرایی این سری‌ها اجتناب می‌شود (بعداً به مسأله‌ی همگرایی خواهیم پرداخت). توجه کنید هنگامی که $\lambda = 0$ است، عبارت‌های (۶-۹) و (۷-۹) جواب‌های مختل نشده را نتیجه می‌دهند: $E_n = E_n^{(0)}$ و $|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle$. پارامترهای $E_n^{(k)}$ و کت‌های $|\psi_n^{(k)}\rangle$ به ترتیب تصحیح‌های k ام ویژه‌مقدارهای انرژی و ویژه‌بردارها را نمایش می‌دهند. آنگاه نظریه‌ی اختلال به محاسبه‌ی $E_n^{(1)}$ ، $E_n^{(2)}$ ، ... و $|\psi_n^{(1)}\rangle$ ، $|\psi_n^{(2)}\rangle$ ، ... کاهش می‌یابد. در این بخش تنها $E_n^{(1)}$ ، $E_n^{(2)}$ و $|\psi_n^{(1)}\rangle$ را تعیین می‌کنیم. با فرض آن که حالت‌های مختل نشده‌ی $|\phi_n\rangle$ غیرواگن‌اند و با جاگذاری (۶-۹) و (۷-۹) در (۴-۹) به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} & (\hat{H}_0 + \lambda \hat{W}) \left(|\phi_n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots \right) \\ & = \left(E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \right) \left(|\phi_n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots \right) \end{aligned} \quad (8-9)$$

ضریب‌های توان‌های متوالی λ در هر دو طرف این معادله باید با هم برابر باشند. با مساوی قرار دادن ضریب‌های سه توان نخست λ ، نتیجه‌های زیر را به دست می‌آوریم:

• مرتبه‌ی صفرم λ :

$$\hat{H}_0 |\phi_n\rangle = E_n^{(0)} |\phi_n\rangle \quad (9-9)$$

• مرتبه‌ی نخست λ :

$$\hat{H}_0 |\psi_n^{(1)}\rangle + \hat{W} |\phi_n\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} |\phi_n\rangle \quad (10-9)$$

• مرتبه‌ی دوم λ :

$$\hat{H}_0 |\psi_n^{(2)}\rangle + \hat{W} |\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)} |\phi_n\rangle \quad (11-9)$$

حال ویژه‌مقدارهای $E_n^{(1)}$ و $E_n^{(2)}$ و ویژه‌بردار $|\psi_n^{(1)}\rangle$ را از (۹-۹) تا (۱۱-۹) تعیین می‌کنیم. برای این کار، باید مشخص کنیم که چگونه حالت‌های $|\phi_n\rangle$ و $|\psi_n\rangle$ همپوشانی می‌کنند. چون $|\psi_n\rangle$ به صورتی در نظر گرفته می‌شود که تفاوت چندانی با $|\phi_n\rangle$ نداشته باشد، داریم: $\langle \phi_n | \psi_n \rangle \simeq 1$. می‌توانیم $|\psi_n\rangle$ را طوری به‌نجار کنیم که همپوشانی آن با $|\phi_n\rangle$ دقیقاً برابر با یک باشد:

$$\langle \phi_n | \psi_n \rangle = 1 \quad (12-9)$$

با جاگذاری (۷-۹) در (۱۲-۹) نتیجه‌ی زیر را به‌دست می‌آوریم:

$$\lambda \langle \phi_n | \psi_n^{(1)} \rangle + \lambda^2 \langle \phi_n | \psi_n^{(2)} \rangle + \dots = 0 \quad (13-9)$$

از این رو ضریب‌های توان‌های مختلف λ باید جداگانه صفر شوند:

$$\langle \phi_n | \psi_n^{(1)} \rangle = \langle \phi_n | \psi_n^{(2)} \rangle = \dots = 0 \quad (14-9)$$

تصحیح مرتبه‌ی نخست

برای تعیین تصحیح مرتبه‌ی نخست $E_n^{(1)}$ تنها باید هر دو طرف (۱۰-۹) را در $\langle \phi_n |$ ضرب کنیم:

$$E_n^{(1)} = \langle \phi_n | \hat{W} | \phi_n \rangle \quad (15-9)$$

که در آن از این واقعیت‌ها استفاده کرده‌ایم که $\langle \phi_n | \hat{H}_0 | \psi_n^{(1)} \rangle$ و $\langle \phi_n | \psi_n^{(1)} \rangle$ هر دو برابر با صفرند و $\langle \phi_n | \phi_n \rangle = 1$ است. بنابراین وارد کردن (۱۵-۹) در (۹-۹) انرژی را تا اختلال مرتبه‌ی اول نتیجه می‌دهد:

$$E_n = E_n^{(0)} + \langle \phi_n | \hat{H}_p | \phi_n \rangle \quad (16-9)$$

توجه کنید که برای برخی از سیستم‌ها، تصحیح مرتبه‌ی نخست $E_n^{(1)}$ دقیقاً صفر می‌شود. در چنین موردهایی باید جمله‌های مرتبه‌ی بالاتر در نظر گرفته شوند.

حال بیایید $|\psi_n^{(1)}\rangle$ را تعیین کنیم. چون مجموعه‌ی حالت‌های مختل نشده‌ی $|\phi_n\rangle$ یک پایه‌ی کامل و متعامد به‌نجار را تشکیل می‌دهند، می‌توانیم $|\psi_n^{(1)}\rangle$ را برحسب پایه‌ی $\{|\phi_m\rangle\}$ بسط دهیم:

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \left(\sum_m |\phi_m\rangle \langle \phi_m| \right) |\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \langle \phi_m | \psi_n^{(1)} \rangle |\phi_m\rangle \quad (17-9)$$

جمله‌ی $m = n$ سهمی ندارد زیرا $\langle \phi_n | \psi_n^{(1)} \rangle = 0$ است. می‌توان ضریب $\langle \phi_m | \psi_n^{(1)} \rangle$ را از (۹-۱۰) و با ضرب کردن هر دو طرف در $\langle \phi_m |$ نتیجه گرفت:

$$\langle \phi_m | \psi_n^{(1)} \rangle = \frac{\langle \phi_m | \hat{W} | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (۹-۱۸)$$

که هنگامی که در (۹-۱۷) جاگذاری شود، به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m | \hat{W} | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\phi_m\rangle \quad (۹-۱۹)$$

آنگاه می‌توان با جاگذاری (۹-۱۹) در (۹-۷)، ویژه‌تابع $|\psi_n\rangle$ هامیلتونی \hat{H} را تا مرتبه‌ی نخست برحسب $\lambda \hat{W}$ به‌دست آورد:

$$|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m | \hat{H}_p | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\phi_m\rangle \quad (۹-۲۰)$$

تصحیح مرتبه‌ی دوم

حال برای تعیین $E_n^{(2)}$ باید هر دو طرف (۹-۱۱) را در $\langle \phi_n |$ ضرب کنیم:

$$E_n^{(2)} = \langle \phi_n | \hat{W} | \psi_n^{(1)} \rangle \quad (۹-۲۱)$$

در به‌دست آوردن این نتیجه از این واقعیت‌ها استفاده کرده‌ایم که $\langle \phi_n | \psi_n^{(1)} \rangle = \langle \phi_n | \psi_n^{(2)} \rangle = 0$ و $\langle \phi_n | \phi_n \rangle = 1$ است. با وارد کردن (۹-۱۹) در (۹-۲۱) به نتیجه‌ی زیر می‌رسیم:

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_m | \hat{W} | \phi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (۹-۲۲)$$

ویژه‌مقدار انرژی تا مرتبه‌ی دوم \hat{H}_p از جاگذاری (۹-۲۲) و (۹-۱۵) در (۹-۶) به‌دست می‌آید:

$$E_n = E_n^{(0)} + \langle \phi_n | \hat{H}_p | \phi_n \rangle + \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_m | \hat{H}_p | \phi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \dots \quad (۹-۲۳)$$

اصولاً می‌توانیم تصحیح‌های انرژی تا هر مرتبه‌ای را به‌دست آوریم. به هر حال، کشانیدن محاسبات به ورای مرتبه‌ی دوم علاوه بر دشوار بودن، کار بی‌فایده‌ای است زیرا معمولاً دو مرتبه‌ی نخست به اندازه‌ی کافی دقیق‌اند.

اعتبار نظریه‌ی اختلال مستقل از زمان

برای این که نظریه‌ی اختلال معتبر باشد، تصحیح‌هایی که این نظریه تولید می‌کند باید کوچک باشند و با دو تصحیح نخست باید به همگرایی برسیم. عبارات‌های (۹-۲۰) و (۹-۲۳) نشان می‌دهند که پارامتر بسط عبارت است از $\langle \phi_m | \hat{H}_p | \phi_n \rangle / (E_n^{(0)} - E_m^{(0)})$. بنابراین برای این که طرح‌های اختلال (۹-۶) و (۹-۷) کار کنند (یعنی همگرا شوند)، پارامتر بسط باید کوچک باشد:

$$\left| \frac{\langle \phi_m | \hat{H}_p | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \right| \ll 1 \quad (n \neq m) \quad (24-9)$$

اگر ترازهای انرژی مختل نشده‌ی $E_n^{(0)}$ و $E_m^{(0)}$ برابر (یعنی واگن) باشند آنگاه شرط (۹-۲۴) برقرار نیست. ترازهای انرژی واگن نیازمند رهیافتی هستند که متفاوت از بحث غیرواگن است. در بخش بعد به این پرسش پرداخته خواهد شد.

مثال ۹-۱ (نوسانگر باردار در یک میدان الکتریکی)

ذره‌ای با بار q و جرم m که در پتانسیل یک هماهنگ یک‌بعدی با بسامد ω حرکت می‌کند، تحت تأثیر میدان الکتریکی ضعیف \mathcal{E} در جهت x قرار می‌گیرد. (الف) عبارت دقیق مربوط به انرژی را بیابید. (ب) انرژی را تا اولین تصحیح غیرصفر محاسبه کنید و آن را با نتیجه‌ی دقیق به دست آمده در (الف) مقایسه کنید.

حل

برهمکنش بین بار نوسان کننده و میدان الکتریکی خارجی موجب پیدایش جمله‌ی $\hat{H}_p = q\mathcal{E}\hat{X}$ می‌شود که باید به هامیلتونی نوسانگر اضافه شود:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_p = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{X}^2 + q\mathcal{E}\hat{X} \quad (25-9)$$

(الف) ابتدا توجه کنید که می‌توان ویژه‌مقدارهای انرژی این هامیلتونی را بدون متوسل شدن به بحث اختلال، به صورت دقیق به دست آورد. تغییر متغیر $\hat{y} = \hat{X} + q\mathcal{E}/(m\omega^2)$ به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{y}^2 - \frac{q^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2} \quad (26-9)$$

این رابطه هامیلتونی یک نوسانگر هماهنگ است که مقدار ثابت $q^2 \mathcal{E}^2 / (2m\omega^2)$ از آن کم شده است. بنابراین می‌توان ویژه‌مقدارهای انرژی دقیق را به آسانی نتیجه گرفت:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega - \frac{q^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2} \quad (27-9)$$

این مثال ساده به ما امکان می‌دهد تا ویژه‌مقدارهای انرژی دقیق و تقریبی را با هم مقایسه کنیم.
 (ب) حال بیابید به مسأله‌ی یافتن ویژه‌مقدارهای تقریبی \hat{H} به وسیله‌ی نظریه‌ی اختلال برگردیم. چون میدان الکتریکی ضعیف است، می‌توانیم به \hat{H}_p به عنوان یک اختلال بنگریم.
 توجه کنید که تصحیح مرتبه‌ی اول انرژی ($E_n^{(1)} = a \langle n | \hat{X} | n \rangle$) صفر است (زیرا $\langle n | \hat{X} | n \rangle = 0$ است) ولی تصحیح مرتبه‌ی دوم صفر نیست:

$$E_n^{(2)} = q^2 \mathcal{E}^2 \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m | \hat{X} | n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (28-9)$$

با توجه به این که $E_n^{(0)} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$ است و با استفاده از رابطه‌های

$$\langle n+1 | \hat{X} | n \rangle = \sqrt{n+1} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}, \quad \langle n-1 | \hat{X} | n \rangle = \sqrt{n} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \quad (29-9)$$

$$E_n^{(0)} - E_{n-1}^{(0)} = \hbar \omega, \quad E_n^{(0)} - E_{n+1}^{(0)} = -\hbar \omega \quad (30-9)$$

می‌توانیم (۲۸-۹) را به رابطه‌ی زیر کاهش دهیم:

$$E_n^{(2)} = q^2 \mathcal{E}^2 \left[\frac{|\langle n+1 | \hat{X} | n \rangle|^2}{E_n^{(0)} + E_{n+1}^{(0)}} + \frac{|\langle n-1 | \hat{X} | n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_{n-1}^{(0)}} \right] = -\frac{q^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2} \quad (31-9)$$

از این رو انرژی تا مرتبه‌ی دوم از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega - \frac{q^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2} \quad (32-9)$$

که در توافق کامل با انرژی دقیق به دست آمده در (۲۷-۹) است.

به صورت مشابه، با استفاده از (۱۹-۹) همراه با (۲۹-۹) و (۳۰-۹) به آسانی می‌توانیم تحقیق کنیم که $|\psi_n^{(1)}\rangle$ از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \frac{q\mathcal{E}}{\hbar\omega} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[\sqrt{n} |n-1\rangle - \sqrt{n+1} |n+1\rangle \right] \quad (33-9)$$

از این رو حالت $|\psi_n\rangle$ تا مرتبه‌ی اول از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$|\psi_n\rangle = |n\rangle + \frac{q\mathcal{E}}{\hbar\omega} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[\sqrt{n} |n-1\rangle - \sqrt{n+1} |n+1\rangle \right] \quad (34-9)$$

که در آن $|n\rangle$ ویژه‌حالت دقیق n امین حالت برانگیخته‌ی یک نوسانگر هماهنگ یک بعدی است.

مثال ۹-۲ (اثر اشتراک)

(الف) اثر یک میدان الکتریکی یکنواخت ضعیف خارجی که در امتداد جهت مثبت محور z است ($\mathcal{E} = \mathcal{E}\mathbf{k}$) را روی حالت پایه‌ی یک اتم هیدروژن مورد مطالعه قرار دهید. از درجه‌های آزادی اسپین چشم‌پوشی کنید. (ب) مقداری تقریبی برای قطبش‌پذیری اتم هیدروژن بیابید.

حل

(الف) اثری که یک میدان الکتریکی خارجی روی ترازهای انرژی یک اتم دارد، اثر اشتراک نامیده می‌شود. در غیاب یک میدان الکتریکی، هامیلتونی (مختل نشده‌ی) اتم هیدروژن (در یکاهای CGS) برابر است با

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r} \quad (۳۵-۹)$$

ویژه‌تابع‌های $\psi_{nlm}(\mathbf{r})$ این هامیلتونی در فصل ۶ به دست آمدند. این ویژه‌تابع‌ها از رابطه‌ی زیر به دست می‌آیند:

$$\langle r\theta\varphi | nlm \rangle = \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (۳۶-۹)$$

هنگامی که میدان الکتریکی برقرار می‌شود، برهمکنش بین اتم و میدان جمله‌ی $\hat{H}_p = e\mathcal{E} \cdot \mathbf{r} = e\mathcal{E}\hat{Z}$ را تولید می‌کند که باید به \hat{H}_0 افزوده شود.

چون حالت‌های برانگیخته‌ی اتم هیدروژن واگن‌اند در حالی که حالت پایه اینطور نیست، نظریه‌ی اختلال غیرواگن تنها برای حالت پایه‌ی $\psi_{100}(\mathbf{r})$ به کار می‌رود. با چشم‌پوشی از درجه‌های آزادی اسپین، انرژی این سیستم تا اختلال مرتبه‌ی دوم به صورت زیر است ((۹-۲۳) را ببینید):

$$E_{100} = E_{100}^{(0)} + e\mathcal{E}\langle 100 | \hat{Z} | 100 \rangle + e^2\mathcal{E}^2 \sum_{nlm \neq 100} \frac{|\langle nlm | \hat{Z} | 100 \rangle|^2}{E_{100}^{(0)} - E_{nlm}^{(0)}} \quad (۳۷-۹)$$

جمله‌ی

$$\langle 100 | \hat{Z} | 100 \rangle = \int |\psi_{100}(\mathbf{r})|^2 z d^3r \quad (۳۸-۹)$$

صفر است زیرا \hat{Z} تحت پارته فرد است و $\psi_{100}(\mathbf{r})$ پارته‌ی معینی دارد. این بدان معنی است که جمله‌ی تصحیح برای انرژی که متناسب با میدان الکتریکی است، نمی‌تواند وجود داشته باشد. از این رو اثر اشتراک خطی وجود ندارد. فیزیک پشت پرده‌ی این موضوع این است که هنگامی که اتم هیدروژن در حالت پایه‌ی خود قرار دارد، دارای گشتاور دوقطبی الکتریکی دائمی نیست. آنگاه تنها یک وابستگی درجه‌ی دوم انرژی ((۹-۳۷) به میدان الکتریکی برای ما باقی می‌ماند که اثر اشتراک درجه‌ی دوم نامیده می‌شود. این تصحیح که به عنوان جابه‌جایی انرژی ΔE شناخته می‌شود، از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\Delta E = e^2 \mathcal{E}^2 \sum_{nlm \neq 100} \frac{|\langle nlm | \hat{Z} | 100 \rangle|^2}{E_{100}^{(0)} - E_{nlm}^{(0)}} \quad (39-9)$$

(ب) حال بیا باید مقدار قطبش‌پذیری اتم هیدروژن را تخمین می‌زنیم. قطبش‌پذیری α اتمی که تحت تأثیر میدان الکتریکی \mathcal{E} قرار دارد، برحسب جابه‌جایی انرژی ΔE به صورت زیر است:

$$\alpha = -2 \frac{\Delta E}{\mathcal{E}^2} \quad (40-9)$$

با جاگذاری (39-9) در (40-9)، قطبش‌پذیری اتم هیدروژن در حالت پایه‌اش را به دست می‌آوریم:

$$\alpha = -2e^2 \sum_{nlm \neq 100} \frac{|\langle nlm | \hat{Z} | 100 \rangle|^2}{E_{100}^{(0)} - E_{nlm}^{(0)}} \quad (41-9)$$

برای تخمین زدن این جمع، فرض می‌کنیم مخرج کسر ثابت است. چون $n \geq 2$ است، می‌توانیم بنویسیم:

$$E_{100}^{(0)} - E_{nlm}^{(0)} \leq E_{100} - E_{200} = \frac{e^2}{2a_0} \left(-1 + \frac{1}{4} \right) = -\frac{3e^2}{4a_0} \quad (42-9)$$

از این رو

$$\alpha \leq \frac{16a_0}{3} \sum_{nlm \neq 100} |\langle nlm | \hat{Z} | 100 \rangle|^2 \quad (43-9)$$

که در آن

$$\begin{aligned} \sum_{nlm \neq 100} |\langle nlm | \hat{Z} | 100 \rangle|^2 &= \sum_{\text{تمام } nlm\text{ها}} |\langle nlm | \hat{Z} | 100 \rangle|^2 \\ &= \langle 100 | \hat{Z} \left(\sum_{\text{تمام } nlm\text{ها}} |nlm\rangle \langle nlm| \right) \hat{Z} | 100 \rangle \quad (44-9) \\ &= \langle 100 | \hat{Z}^2 | 100 \rangle \end{aligned}$$

در به دست آوردن این رابطه از این واقعیت‌ها که $\langle 100 | \hat{Z} | 100 \rangle = 0$ و مجموعه‌ی حالت‌های $|nlm\rangle$ کامل است، استفاده کرده‌ایم. حال با توجه به این که $z = r \cos \theta$ و $\langle r\theta\varphi | 100 \rangle = R_{10}(r)Y_{00}(\theta, \varphi)$ است، بی‌درنگ رابطه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$\langle 100 | \hat{Z}^2 | 100 \rangle = \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty r^2 R_{10}^2(r) dr \int_0^\pi \sin \theta \cos^2 \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = a_0^2 \quad (45-9)$$

با جاگذاری (45-9) و (44-9) در (43-9) می‌بینیم که قطبش‌پذیری هیدروژن دارای حد بالای زیر است:

$$\alpha \leq \frac{16}{3} a_0^2 \quad (46-9)$$

این حد که از نظریه‌ی اختلال به دست آمد، در توافق با مقدار دقیق $\alpha = \frac{9}{4} a_0^2$ است.

۲-۲-۹ نظریه‌ی اختلال واگن

در بحث قبلی تنها سیستم‌های با \hat{H}_0 غیرواگن را بررسی کردیم. اکنون نظریه‌ی اختلال را برای تعیین طیف انرژی و حالت‌های سیستمی که هامیلتونی مختل نشده‌ی \hat{H}_0 آن واگن است، به کار می‌بریم:

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{H}_p)|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \quad (۴۷-۹)$$

به عنوان مثال، اگر تراز انرژی $E_n^{(0)}$ واگن f گانه باشد (یعنی مجموعه‌ای از f ویژه‌حالت متفاوت $|\phi_{n\alpha}\rangle$ وجود دارد که در آن $\alpha = 1, 2, \dots, f$ است که متناظر با ویژه‌مقدار انرژی یکسان $E_n^{(0)}$ هستند) آنگاه داریم:

$$\hat{H}_0|\phi_{n\alpha}\rangle = E_n^{(0)}|\phi_{n\alpha}\rangle \quad (\alpha = 1, 2, \dots, f) \quad (۴۸-۹)$$

که در آن α نشان دهنده‌ی یک یا چند عدد کوانتومی است و ویژه‌مقدارهای انرژی $E_n^{(0)}$ مستقل از α هستند. در تقریب مرتبه‌ی صفر، می‌توانیم ویژه‌تابع $|\psi_n\rangle$ را به صورت ترکیبی خطی برحسب $|\phi_{n\alpha}\rangle$ بنویسیم:

$$|\psi_n\rangle = \sum_{\alpha=1}^f a_{\alpha}|\phi_{n\alpha}\rangle \quad (۴۹-۹)$$

با متعامد بهنجار در نظر گرفتن حالت‌های $|\phi_{n\alpha}\rangle$ نسبت به برحسب α (یعنی $\langle\phi_{n\alpha}|\phi_{n\beta}\rangle = \delta_{\alpha,\beta}$) و بهنجار دانستن $|\psi_n\rangle$ ($\langle\psi_n|\psi_n\rangle = 1$)، می‌توانیم تحقیق کنیم که ضریب‌های a_{α} از رابطه‌ی زیر پیروی می‌کنند:

$$\langle\psi_n|\psi_n\rangle = \sum_{\alpha,\beta} a_{\alpha}^* a_{\beta} \delta_{\alpha,\beta} = \sum_{\alpha=1}^f |a_{\alpha}|^2 = 1 \quad (۵۰-۹)$$

در ادامه، قصد داریم نشان دهیم که چگونه این ضریب‌ها و تصحیح‌های مرتبه‌ی اول انرژی تعیین می‌شوند. برای این کار، بیایید (۴۸-۹) و (۴۹-۹) را در (۴۷-۹) جاگذاری کنیم:

$$\sum_{\alpha} \left[E_n^{(0)}|\phi_{n\alpha}\rangle + \hat{H}_p|\phi_{n\alpha}\rangle \right] a_{\alpha} = E_n \sum_{\alpha} a_{\alpha}|\phi_{n\alpha}\rangle \quad (۵۱-۹)$$

ضرب کردن هر دو طرف این معادله در $\langle\phi_{n\beta}|$ به

$$\sum_{\alpha} a_{\alpha} \left[E_n^{(0)}\delta_{\alpha,\beta} + \langle\phi_{n\beta}|\hat{H}_p|\phi_{n\alpha}\rangle \right] = E_n \sum_{\alpha} a_{\alpha}\delta_{\alpha,\beta} \quad (۵۲-۹)$$

یا به

$$a_{\beta}E_n = a_{\beta}E_n^{(0)} + \sum_{\alpha=1}^f a_{\alpha}\langle\phi_{n\beta}|\hat{H}_p|\phi_{n\alpha}\rangle \quad (۵۳-۹)$$

می‌انجامد که در آن از $\langle\phi_{n\beta}|\phi_{n\alpha}\rangle = \delta_{\beta,\alpha}$ استفاده کرده‌ایم. می‌توانیم (۵۳-۹) را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$\sum_{\alpha=1}^f \left(\hat{H}_{p\beta\alpha} - E_n^{(1)}\delta_{\alpha,\beta} \right) a_{\alpha} = 0 \quad (\beta = 1, 2, \dots, f) \quad (۵۴-۹)$$

که در آن $E_n^{(1)} = E_n - E_n^{(0)}$ و $\hat{H}_{p\beta\alpha} = \langle \phi_{n\beta} | \hat{H}_p | \phi_{n\alpha} \rangle$ معادله‌ی خطی همگن برای ضریب‌های a_α است. این ضریب‌ها تنها زمانی غیرصفرند که درمینان $|\hat{H}_{p\alpha\beta} - E_n^{(1)} \delta_{\alpha,\beta}|$ صفر باشد:

$$\begin{vmatrix} \hat{H}_{p_{11}} - E_n^{(1)} & \hat{H}_{p_{12}} & \hat{H}_{p_{1r}} & \dots & \hat{H}_{p_{1f}} \\ \hat{H}_{p_{21}} & \hat{H}_{p_{22}} - E_n^{(1)} & \hat{H}_{p_{2r}} & \dots & \hat{H}_{p_{2f}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{H}_{p_{f1}} & \hat{H}_{p_{f2}} & \hat{H}_{p_{fr}} & \dots & \hat{H}_{p_{ff}} - E_n^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \quad (55-9)$$

این معادله، یک معادله‌ی درجه‌ی f ام برحسب $E_n^{(1)}$ بوده و به‌صورت کلی دارای f ریشه‌ی حقیقی متفاوت $E_{n\alpha}^{(1)}$ است. این ریشه‌ها تصحیح مرتبه‌ی اول ویژه‌مقدارهای $E_{n\alpha}$ هامیلتونی \hat{H} هستند. برای یافتن ضریب‌های a_α تنها باید این ریشه‌ها را در (۵۴-۹) جاگذاری کنیم و سپس عبارت به‌دست آمده را حل کنیم. سپس با دانستن این ضریب‌ها، می‌توانیم ویژه‌تابع‌های $|\psi_n\rangle$ هامیلتونی \hat{H} را در تقریب صفرم از (۴۹-۹) تعیین کنیم.

ریشه‌های $E_{n\alpha}^{(1)}$ درمینان (۵۵-۹) به‌صورت کلی متفاوت از یکدیگرند. در این حالت ویژه‌مقدارهای \hat{H} واگن نیستند از این روتراز با واگنی f گانه‌ی $E_n^{(0)}$ مسأله‌ی مختل نشده به f تراز متفاوت $E_{n\alpha}$ شکافته می‌شود: $E_{n\alpha} = E_n^{(0)} + E_{n\alpha}^{(1)}$ با $\alpha = 1, 2, \dots, f$. در این صورت، اختلال واگنی را از بین می‌برد. بسته به این که تمام ریشه‌های (۵۵-۹) یا تنها برخی از آنها متفاوت باشند، از بین رفتن واگنی می‌تواند کلی یا جزئی باشد. به‌صورت خلاصه، برای تعیین ویژه‌مقدارها تا مرتبه‌ی نخست و ویژه‌حالت‌ها تا مرتبه‌ی صفرم برای یک

تراز با واگنی f گانه با استفاده از نظریه‌ی اختلال، به‌صورت زیر عمل می‌کنیم:

- ابتدا برای هر تراز با واگنی f گانه، ماتریس $f \times f$ اختلال \hat{H}_p را تعیین می‌کنیم:

$$\hat{H}_p = \begin{pmatrix} \hat{H}_{p_{11}} & \hat{H}_{p_{12}} & \dots & \hat{H}_{p_{1f}} \\ \hat{H}_{p_{21}} & \hat{H}_{p_{22}} & \dots & \hat{H}_{p_{2f}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{H}_{p_{f1}} & \hat{H}_{p_{f2}} & \dots & \hat{H}_{p_{ff}} \end{pmatrix} \quad (56-9)$$

که در آن $\hat{H}_{p\alpha\beta} = \langle \phi_{n\alpha} | \hat{H}_p | \phi_{n\beta} \rangle$ است.

- دوم این که این ماتریس را قطری می‌کنیم و f ویژه‌مقدار $E_{n\alpha}^{(1)}$ ($\alpha = 1, 2, \dots, f$) و ویژه‌بردارهای متناظر آنها را پیدا می‌کنیم:

$$a_\alpha = \begin{pmatrix} a_{\alpha 1} \\ a_{\alpha 2} \\ \vdots \\ a_{\alpha f} \end{pmatrix} \quad (\alpha = 1, 2, \dots, f) \quad (57-9)$$

- سرانجام، ویژه‌مقدارهای انرژی تا مرتبه‌ی اول از رابطه‌ی زیر به دست می‌آیند:

$$E_{n\alpha} = E_n^{(0)} + E_{n\alpha}^{(1)} \quad (\alpha = 1, 2, \dots, f) \quad (58-9)$$

و ویژه‌بردارهای متناظر تا مرتبه‌ی صفر از رابطه‌ی زیر:

$$|\psi_{n\alpha}\rangle = \sum_{\beta=1}^f a_{\alpha\beta} |\phi_{n\beta}\rangle \quad (59-9)$$

مثال ۳-۹ اثر اشتراک اتم هیدروژن

با استفاده از نظریه‌ی اختلال (واگن) مرتبه‌ی اول، ترازهای انرژی حالت‌های $n = 2$ یک اتم هیدروژن را که در یک میدان الکتریکی خارجی یکنواخت و ضعیف در امتداد مثبت محور z قرار دارد، محاسبه کنید.

حل

در غیاب میدان الکتریکی خارجی، نخستین حالت برانگیخته (یعنی $n = 2$) واگن چهارگانه است: حالت‌های $|nlm\rangle = |200\rangle, |210\rangle, |211\rangle, |21-1\rangle$ دارای انرژی یکسان $E_2 = -R_y/4$ هستند که در آن $R_y = \mu e^4 / (2\hbar^2) = 13.6 \text{ eV}$ ثابت ریذبرگ است.

هنگامی که میدان الکتریکی خارجی برقرار می‌شود، تعدادی از ترازهای انرژی شکافته می‌شوند. انرژی ناشی از برهمکنش بین گشتاور دوقطبی الکترون ($\mathbf{d} = -e\mathbf{r}$) و میدان الکتریکی خارجی ($\mathcal{E} = \mathcal{E}\mathbf{k}$) از رابطه‌ی

$$\hat{H}_p = -\mathbf{d} \cdot \mathcal{E} = e\mathbf{r} \cdot \mathcal{E} = e\mathcal{E}\hat{Z} \quad (60-9)$$

به دست می‌آید. برای محاسبه‌ی ویژه‌مقدارهای انرژی باید عنصرهای ماتریسی 4×4 $\langle 2l'm' | \hat{H}_p | 2lm \rangle = e\mathcal{E} \langle 2l'm' | \hat{Z} | 2lm \rangle$ هامیلتونی اختلال \hat{H}_p را تعیین و سپس قطری کنیم. می‌توان عنصرهای ماتریسی $\langle 2l'm' | \hat{Z} | 2lm \rangle$ را به صورت ساده‌تری و با استفاده از قاعده‌های گزینش و تقارن‌های مربوطه محاسبه کرد. ابتدا این که چون \hat{Z} به زاویه‌ی سمتی φ بستگی ندارد ($z = r \cos \theta$)، عنصرهای $\langle 2l'm' | \hat{Z} | 2lm \rangle$ تنها زمانی غیرصفرند که $m' = m$ باشد. دوم این که چون Z فرد است، حالت‌های $|2l'm'\rangle$ و $|2lm\rangle$ باید پارته‌های مخالف داشته باشند به طوری که $\langle 2l'm' | \hat{Z} | 2lm \rangle$ صفر نمی‌شود. بنابراین تنها عنصرهای ماتریسی غیرصفر آنهایی هستند که حالت‌های $2s$ و $2p$ را بهم جفت می‌کنند (با $m = 0$)؛ یعنی بین $|200\rangle$ و $|210\rangle$. در این حالت داریم:

$$\begin{aligned} \langle 200 | \hat{Z} | 210 \rangle &= \int_0^\infty R_{20}^*(r) R_{21}(r) r^2 dr \int Y_{00}^*(\Omega) z Y_{10}(\Omega) d\Omega \\ &= \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \int_0^\infty R_{20}^*(r) R_{21}(r) r^3 dr \int Y_{00}^*(\Omega) Y_{10}(\Omega) d\Omega \quad (61-9) \\ &= -3a_0. \end{aligned}$$

زیرا $\langle \mathbf{r} | 210 \rangle = R_{21}(r) Y_{10}(\Omega)$ ، $\langle \mathbf{r} | 200 \rangle = R_{20}(r) Y_{00}(\Omega)$ ، $z = r \cos \theta = \sqrt{4\pi/3} r Y_{10}(\Omega)$ و $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$ است و $a_0 = \hbar^2 / (me^2)$ شعاع بوهر. با استفاده از نمادگذاری های $|1\rangle = |200\rangle$ و $|2\rangle = |211\rangle$ ، $|3\rangle = |210\rangle$ و $|4\rangle = |21-1\rangle$ ، می توانیم ماتریس \hat{H}_p را به صورت

$$\hat{H}_p = \begin{pmatrix} \langle 1 | \hat{H}_p | 1 \rangle & \langle 1 | \hat{H}_p | 2 \rangle & \langle 1 | \hat{H}_p | 3 \rangle & \langle 1 | \hat{H}_p | 4 \rangle \\ \langle 2 | \hat{H}_p | 1 \rangle & \langle 2 | \hat{H}_p | 2 \rangle & \langle 2 | \hat{H}_p | 3 \rangle & \langle 2 | \hat{H}_p | 4 \rangle \\ \langle 3 | \hat{H}_p | 1 \rangle & \langle 3 | \hat{H}_p | 2 \rangle & \langle 3 | \hat{H}_p | 3 \rangle & \langle 3 | \hat{H}_p | 4 \rangle \\ \langle 4 | \hat{H}_p | 1 \rangle & \langle 4 | \hat{H}_p | 2 \rangle & \langle 4 | \hat{H}_p | 3 \rangle & \langle 4 | \hat{H}_p | 4 \rangle \end{pmatrix} = -3e\mathcal{E}a_0 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (۶۲-۹)$$

$$\hat{H}_p = -3e\mathcal{E}a_0 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{یا} \quad (۶۳-۹)$$

بنویسیم. قطری کردن این ماتریس به ویژه مقادیرهای زیر می انجامد:

$$E_{\psi_1}^{(1)} = -3e\mathcal{E}a_0, \quad E_{\psi_2}^{(1)} = E_{\psi_3}^{(1)} = 0, \quad E_{\psi_4}^{(1)} = 3e\mathcal{E}a_0. \quad (۶۴-۹)$$

بنابراین ترازهای انرژی حالت های $n = 2$ تا مرتبه اول از رابطه های زیر به دست می آیند:

$$E_{\psi_1} = -\frac{R_y}{4} - 3e\mathcal{E}a_0, \quad E_{\psi_2} = E_{\psi_3} = -\frac{R_y}{4}, \quad E_{\psi_4} = -\frac{R_y}{4} + 3e\mathcal{E}a_0. \quad (۶۵-۹)$$

ویژه بردارهای متناظر با مرتبه صفر عبارتند از

$$|\psi_2\rangle_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(|200\rangle + |210\rangle), \quad |\psi_2\rangle_2 = |211\rangle \quad (۶۶-۹)$$

$$|\psi_2\rangle_3 = |21-1\rangle, \quad |\psi_2\rangle_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}(|200\rangle - |210\rangle) \quad (۶۷-۹)$$

این اختلال تنها بخشی از واکنی تراز $n = 2$ را از بین برده است. حالت های $|211\rangle$ و $|21-1\rangle$ هنوز دارای انرژی یکسان $E_3 = E_4 = -R_y/4$ هستند.

۳-۲-۹ ساختار ریز و اثر نابهنجار زمین

یکی از مفیدترین کاربردهای نظریه اختلال، محاسبه تصحیح های انرژی اتم هیدروژن به خصوص تصحیح های ناشی از ساختار ریز و اثر زمین است. ساختار ریز به نوبه خود ناشی از دو اثر است: جفت شدگی اسپین-مدار و تصحیح نسبیتی. بیایید تا این دو اثر را جداگانه بررسی کنیم.

۹-۲-۳-۱ جفت‌شدگی اسپین-مدار

جفت‌شدگی اسپین-مدار در هیدروژن از برهمکنش بین گشتاور مغناطیسی اسپین الکترون ($\mu_S = -eS/(m_e c)$) و میدان مغناطیسی مداری \mathbf{B} پروتون ناشی می‌شود.

می‌توان منشأ میدان مغناطیسی تجربه شده به وسیله‌ی الکترون در حال حرکت با سرعت v در یک مدار دایره‌ای حول پروتون را از نظر کلاسیکی به صورتی که در ادامه می‌آید، توضیح داد. الکترون در چارچوب سکون خود، پروتون را در حال حرکت با سرعت $-v$ در یک مدار دایره‌ای حول خود می‌بیند (شکل ۹-۱). از الکتروپنایمیک کلاسیک می‌دانیم که میدان مغناطیسی تجربه شده به وسیله‌ی الکترون برابر است با

$$\mathbf{B} = -\frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{E} = -\frac{1}{m_e c} \mathbf{p} \times \mathbf{E} = \frac{1}{m_e c} \mathbf{E} \times \mathbf{p} \quad (۹-۶۸)$$

که در آن $\mathbf{p} = m_e \mathbf{v}$ تکانه‌ی خطی الکترون و \mathbf{E} میدان الکتریکی تولید شده توسط میدان کولنی پروتون است: $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = (e/r^2)(\mathbf{r}/r) = e\mathbf{r}/r^3$. برای مسأله‌ی کلی‌تر اتم‌های هیدروژن‌گونه (اتم‌هایی با یک الکترون ظرفیت در خارج از یک لایه‌ی بسته) که در آنها الکترون در پتانسیل کولنی (مرکزی) $V(r) = -e\phi(r)$ هسته حرکت می‌کند، میدان الکتریکی برابر است با

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla\phi(r) = \frac{1}{e} \nabla V(r) = \frac{1}{e r} \frac{dV}{dr} \mathbf{r} \quad (۹-۶۹)$$

بنابراین میدان مغناطیسی هسته که در چارچوب سکون الکترون محاسبه می‌شود، از وارد کردن (۹-۶۹) در (۹-۶۸) به دست می‌آید:

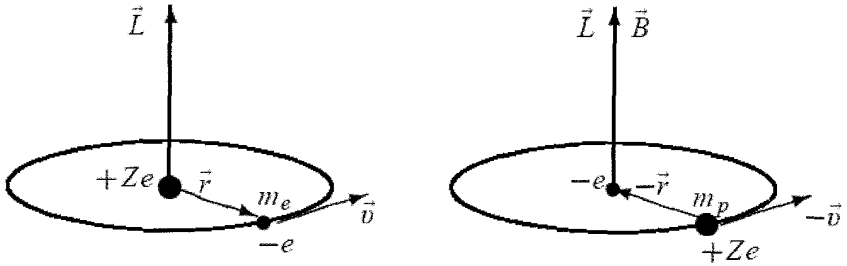
$$\mathbf{B} = \frac{1}{m_e c} \mathbf{E} \times \mathbf{p} = \frac{1}{e m_e c r} \frac{dV}{dr} \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \frac{1}{e m_e c r} \frac{dV}{dr} \mathbf{L} \quad (۹-۷۰)$$

که در آن $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ تکانه‌ی زاویه‌ای مداری الکترون است.

برهمکنش گشتاور دوقطبی μ_S اسپین الکترون با میدان مغناطیسی مداری \mathbf{B} هسته موجب انرژی برهمکنش زیر می‌شود:

$$\hat{H}_{SO} = -\mu_S \cdot \mathbf{B} = \frac{e}{m_e c} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} = \frac{1}{m_e^2 c^2 r} \frac{dV}{dr} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \quad (۹-۷۱)$$

این انرژی دو برابر انرژی برهمکنشی اسپین-مدار مشاهده شده از کار درآمد. این بدان دلیل است که (۹-۷۱) در چارچوب سکون الکترون محاسبه شده است. این چارچوب لخت نیست زیرا الکترون هنگام حرکت در یک مدار دایره‌ای حول هسته شتاب می‌گیرد. برای پرداختن به بحث درست، باید چارچوب سکون الکترون را به چارچوب سکون هسته (یعنی چارچوب آزمایشگاه) تبدیل کنیم. این تبدیل که شامل تبدیل نسبیتی سرعت‌ها است، موجب یک حرکت اضافی حاصل از حرکت تقدیمی μ_S می‌شود که به عنوان حرکت تقدیمی توماس شناخته می‌شود.



شکل ۱-۹ (چپ) یک الکترون در حال حرکت در یک مدار دایره‌ای آنطور که توسط هسته دیده می‌شود. (راست) همان حرکت آنطور که توسط الکترون در چارچوب ساکنش دیده می‌شود؛ الکترون هسته را در حال حرکت در یک مدار دایره‌ای حول خود می‌بیند.

حرکت تقدیمی گشتاور اسپین الکترون یک اثر نسبیتی است که حتی در غیاب یک میدان مغناطیسی خارجی روی می‌دهد. تبدیل به چارچوب سکون هسته به کاهش انرژی برهمکنش (۷۱-۹) با ضریب ۲ می‌انجامد:

$$\hat{H}_{SO} = \frac{1}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \hat{S} \cdot \hat{L} \quad (72-9)$$

چون این رابطه از بحث کلاسیکی به دست آمد، اکنون می‌توانیم عبارت کوانتومی متناظر را با جایگزینی متغیرهای دینامیکی با عملگرهای متناظرشان به دست آوریم:

$$\hat{H}_{SO} = \frac{1}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \hat{S} \cdot \hat{L} \quad (73-9)$$

این رابطه، انرژی اسپین-مدار است. برای الکترون اتم هیدروژن، $V(r) = -e^2/r$ و $dV/dr = e^2/r^2$ است و معادله‌ی (۷۳-۹) به معادله‌ی زیر کاهش می‌یابد:

$$\hat{H}_{SO} = \frac{e^2}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r^3} \hat{S} \cdot \hat{L} \quad (74-9)$$

حال می‌توانیم از نظریه‌ی اختلال برای محاسبه‌ی سهم برهمکنش اسپین-مدار در یک اتم هیدروژن استفاده کنیم:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{2m_e^2 c^2 r^3} \hat{S} \cdot \hat{L} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{SO} \quad (75-9)$$

که در آن \hat{H}_0 هامیلتونی مختل نشده و \hat{H}_{SO} اختلال است. برای به کار بردن نظریه‌ی اختلال، باید حالت‌های مختل نشده (ویژه‌حالت‌های \hat{H}_0) را مشخص کنیم. چون اسپین الکترون هیدروژن به حساب آورده می‌شود، تابع موج کل \hat{H} از ضرب مستقیم دو قسمت تشکیل شده است: یک قسمت فضایی و یک قسمت اسپینی. برای مشخص کردن ویژه‌حالت‌های \hat{H} ، دو انتخاب داریم: ابتدا، ویژه‌حالت‌های مشترک

$|nlm_l m_s\rangle$ عملگرهای $\hat{L}_z, \hat{S}_z, \hat{L}_z$ و \hat{S}_z و دوم، ویژه‌حالت‌های مشترک $|nljm\rangle$ عملگرهای \hat{L}^2, \hat{S}^2 ، \hat{J}_z و \hat{J}^2 است. \hat{H}_{SO} در هر دو نمایش قطری است ولی \hat{H}_{SO} در نمایش دوم قطری است ولی در نمایش نخست قطری نیست زیرا \hat{H}_{SO} (یا به عبارت دقیق‌تر $\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}}$) با \hat{L}_z و \hat{S}_z جابه‌جا نمی‌شود (فصل ۷). بنابراین اگر \hat{H}_{SO} در نظر گرفته شود آنگاه انتخاب نخست انتخاب خوبی نخواهد بود زیرا مجبور خواهیم شد ماتریس \hat{H}_{SO} را در چارچوب حالت‌های $|nlm_l m_s\rangle$ قطری کنیم که کاری وقت‌گیر و خسته‌کننده است. ولی انتخاب دوم برای مسأله‌ی ما ایده‌آل است زیرا تصحیح مرتبه‌ی اول انرژی به سادگی از مقدار چشمداشتی اختلال به دست می‌آید زیرا \hat{H}_{SO} از قبل در این نمایش قطری است. در فصل ۷ نشان دادیم که حالت‌های $|nljm\rangle$

$$\Psi_{n,l,j=l \pm \frac{1}{2}, m} = R_{nl}(r) \left[\sqrt{\frac{l \mp m + \frac{1}{2}}{2l+1}} Y_{l, m + \frac{1}{2}} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right. \\ \left. \pm \sqrt{\frac{l \pm m + \frac{1}{2}}{2l+1}} Y_{l, m - \frac{1}{2}} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right] \quad (۷۶-۹)$$

ویژه‌حالت‌های $\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}}$ هستند و ویژه‌مقدارهای متناظر از رابطه‌ی زیر به دست می‌آیند:

$$\langle nljm | \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} | nljm \rangle = \frac{\hbar^2}{4} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \quad (۷۷-۹)$$

$$\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = \frac{1}{4} [\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2]$$

آنگاه ویژه‌مقدارهای (۷۵-۹) تا تصحیح مرتبه‌ی اول از رابطه‌ی زیر به دست می‌آیند:

$$E_{nlj} = E_n^{(0)} + \langle nljm_j | \hat{H}_{SO} | nljm_j \rangle = -\frac{e^2}{4a_0 n^2} \frac{1}{4} + E_{SO}^{(1)} \quad (۷۸-۹)$$

که در آن $E_{SO}^{(1)}$ ترازهای انرژی هیدروژن هستند و $E_n^{(0)} = -e^2/(2a_0 n^2) = -13.6 \text{ eV}/n^2$ ناشی از برهمکنش اسپین-مدار است:

$$E_{SO}^{(1)} = \langle nljm_j | \hat{H}_{SO} | nljm_j \rangle = \frac{e^2 \hbar^2}{4 m_e^2 c^2} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \left\langle nl \left| \frac{1}{r^3} \right| nl \right\rangle \quad (۷۹-۹)$$

با استفاده از مقدار $\langle nl | r^{-3} | nl \rangle$ که در فصل ۶ محاسبه شد:

$$\left\langle nl \left| \frac{1}{r^3} \right| nl \right\rangle = \frac{2}{n^3 l(l+1)(2l+1) a_0^3} \quad (۸۰-۹)$$

می‌توانیم (۷۹-۹) را به صورت

$$E_{SO}^{(1)} = \frac{e^2 \hbar^2}{2m_e^2 c^2} \left[\frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{n^2 l(l+1)(2l+1) a_0^3} \right] \quad (۸۱-۹)$$

$$= \left(\frac{e^2}{2a_0} \frac{1}{n^2} \right) \left(\frac{\hbar}{m_e c a_0} \right)^2 \frac{1}{n} \left[\frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{l(l+1)(2l+1)} \right]$$

یا

$$E_{SO}^{(1)} = \frac{|E_n^{(0)}| \alpha^2}{n} \left[\frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{l(l+1)(2l+1)} \right] \quad (۸۲-۹)$$

بازنویسی کنیم که در آن α یک ثابت بدون بعد است و ثابت ساختار ریز نامیده می‌شود:

$$\alpha = \frac{\hbar}{m_e c a_0} = \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137} \quad (۸۳-۹)$$

چون $a_0 = \hbar^2 / (m_e e^2)$ و از این رو $(2n^2) m_e c^2 / (2n^2) = -e^2 / (2a_0 n^2) = E_n^{(0)}$ است، می‌توانیم (۸۲-۹) را به صورت زیر برحسب α بیان کنیم:

$$E_{SO}^{(1)} = \frac{\alpha^2 m_e c^2}{2n^2} \left[\frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{l(l+1)(2l+1)} \right] \quad (۸۴-۹)$$

۲-۳-۲-۹ تصحیح نسبیتی

اگرچه اثر نسبیتی در هیدروژن به دلیل حرکت الکترون کوچک است ولی با این حال می‌توان آن را به وسیله‌ی تکنیک‌های طیف‌نمایی آشکار کرد. انرژی جنبشی نسبیتی الکترون از رابطه‌ی $\hat{T} = \sqrt{\hat{p}^2 c^2 + m_e^2 c^4} - m_e c^2$ به دست می‌آید که در آن $m_e c^2$ انرژی سکون الکترون است. بسط این رابطه تا \hat{p}^4 نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\sqrt{\hat{p}^2 c^2 + m_e^2 c^4} - m_e c^2 \simeq \frac{\hat{p}^2}{2m_e} - \frac{\hat{p}^4}{8m_e^3 c^2} + \dots \quad (۸۵-۹)$$

هنگامی که این جمله در نظر گرفته شود، هامیلتونی هیدروژن به صورت زیر در می‌آید:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{r} - \frac{\hat{p}^4}{8m_e^3 c^2} = \hat{H}_0 + \hat{H}_R \quad (۸۶-۹)$$

که در آن $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/(2m_e) - e^2/r$ هامیلتونی مختل نشده و $\hat{H}_R = -\hat{p}^4/(\lambda m_e^3 c^2)$ تصحیح جرم نسبیتی است که به‌وسیله‌ی نظریه‌ی اختلال مرتبه‌ی اول می‌توان به آن پرداخت:

$$E_R^{(1)} = \langle nljm_j | \hat{H}_R | nljm_j \rangle = -\frac{1}{\lambda m_e^3 c^2} \langle nljm_j | \hat{p}^4 | nljm_j \rangle \quad (۸۷-۹)$$

مقدار $\langle nljm_j | \hat{p}^4 | nljm_j \rangle$ در آخرین مسأله‌ی حل‌شده‌ی فصل ۶ محاسبه شد (معادله‌ی (۳۳۱-۶) را ببینید):

$$\langle nljm_j | \hat{p}^4 | nljm_j \rangle = \frac{m_e^4 e^4}{\hbar^4 n^4} \left(\frac{\lambda n}{2l+1} - 3 \right) = \frac{\alpha^4 m_e^4 c^4}{n^4} \left(\frac{\lambda n}{2l+1} - 3 \right) \quad (۸۸-۹)$$

وارد کردن این مقدار در (۸۷-۹) به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$E_R^{(1)} = -\frac{\alpha^4 m_e c^2}{\lambda n^4} \left(\frac{\lambda n}{2l+1} - 3 \right) = -\frac{\alpha^2 |E_n^{(0)}|}{4n^2} \left(\frac{\lambda n}{2l+1} - 3 \right) \quad (۸۹-۹)$$

توجه کنید که مقدار تصحیح‌های اسپین-مدار و نسبیتی (۸۴-۹) و (۸۹-۹) مرتبه‌ی یکسانی دارند زیرا (10^{-2} eV) زیرا $\alpha^2 |E_n^{(0)}| \simeq 10^{-2} \text{ eV}$ است.

ملاحظات

برای یک اتم هیدروژن‌گونه که دارای Z الکترون است، اگر از برهمکنش اسپین-مدار چشم‌پوشی کنیم آنگاه می‌توانیم از (۸۹-۹) برای نتیجه‌گیری انرژی حالت پایه‌ی اتم استفاده کنیم:

$$E_n = Z^2 \left(E_n^{(0)} + E_R^{(1)} \right) = Z^2 E_n^{(0)} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n} \left(\frac{2}{2l+1} - \frac{3}{4n} \right) \right] \quad (۹۰-۹)$$

که در آن $E_n^{(0)} = -e^4 m_e / (2\hbar^2 n^2) = -\alpha^2 m_e c^2 / (2n^2) = -13.6 \text{ eV} / n^2$ بوهر است.

۹-۲-۳ ساختار ریزاتم هیدروژن

تصحیح ساختار ریزازافزودن عبارت‌های مربوط به تصحیح‌های اسپین-مدار و نسبیتی (۸۴-۹) و (۸۹-۹) به‌دست می‌آید:

$$E_{FS}^{(1)} = E_{SO}^{(1)} + E_R^{(1)} = \frac{\alpha^4 m_e c^2}{2n^3} \left[\frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{l(l+1)(2l+1)} \right] - \frac{\alpha^4 m_e c^2}{\lambda n^4} \left[\frac{\lambda n}{2l+1} - 3 \right] \quad (۹۱-۹)$$

که در آن $j = l \pm \frac{1}{4}$ است. اگر $j = l + \frac{1}{4}$ باشد آنگاه جاگذاری $l = j - \frac{1}{4}$ در (۹۱-۹) به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\begin{aligned}
 E_{FS}^{(1)} &= \frac{\alpha^f m_e c^2}{\lambda n^f} \left[\frac{4nj(j+1) - 4n \left(j - \frac{1}{4}\right) \left(j + \frac{1}{4}\right) - 3n}{\left(j - \frac{1}{4}\right) \left(j + \frac{1}{4}\right) (2j - 1 + 1)} - \frac{\lambda n}{2j - 1 + 1} + 3 \right] \\
 &= \frac{\alpha^f m_e c^2}{\lambda n^f} \left[\frac{4nj - 2n}{2j \left(j - \frac{1}{4}\right) \left(j + \frac{1}{4}\right)} - \frac{4n}{j} + 3 \right] \\
 &= \frac{\alpha^f m_e c^2}{\lambda n^f} \left[\frac{2n}{j \left(j + \frac{1}{4}\right)} - \frac{4n}{j} + 3 \right] \\
 &= \frac{\alpha^f m_e c^2}{\lambda n^f} \left[3 - \frac{4n}{j + \frac{1}{4}} \right] \tag{۹۲-۹}
 \end{aligned}$$

به صورت مشابه، اگر $j = l - \frac{1}{4}$ (و ازاین رو $l = j + \frac{1}{4}$) باشد آنگاه می‌توانیم (۹۱-۹) را به رابطه‌ی زیر کاهش دهیم:

$$\begin{aligned}
 E_{FS}^{(1)} &= \frac{\alpha^f m_e c^2}{\lambda n^f} \left[\frac{4nj(j+1) - 4n \left(j + \frac{1}{4}\right) \left(j + \frac{3}{4}\right) - 3n}{\left(j + \frac{1}{4}\right) \left(j + \frac{3}{4}\right) (2j + 1 + 1)} - \frac{\lambda n}{2j + 1 + 1} + 3 \right] \\
 &= \frac{\alpha^f m_e c^2}{\lambda n^f} \left[\frac{-4nj - 6n}{2 \left(j + \frac{1}{4}\right) \left(j + \frac{3}{4}\right) (j + 1)} - \frac{4n}{j + 1} + 3 \right] \\
 &= \frac{\alpha^f m_e c^2}{\lambda n^f} \left[\frac{-2n}{\left(j + \frac{1}{4}\right) (j + 1)} - \frac{4n}{j + 1} + 3 \right] \\
 &= \frac{\alpha^f m_e c^2}{\lambda n^f} \left[3 - \frac{4n}{j + \frac{1}{4}} \right] \tag{۹۳-۹}
 \end{aligned}$$

همانطور که معادله‌های (۹۲-۹) و (۹۳-۹) نشان می‌دهند، عبارت‌های مربوط به تصحیح ساختار ریز متناظر با $j = l + \frac{1}{4}$ و $j = l - \frac{1}{4}$ یکسان‌اند:

$$E_{FS}^{(1)} = E_{SO}^{(1)} + E_R^{(1)} = \frac{\alpha^2 m_e c^2}{\lambda n^2} \left(3 - \frac{4n}{j + \frac{1}{2}} \right) = \frac{\alpha^2 E_n^{(0)}}{4n^2} \left(\frac{4n}{j + \frac{1}{2}} - 3 \right) \quad (94-9)$$

که در آن $E_n^{(0)} = -\alpha^2 m_e c^2 / (2n^2)$ و $j = l \pm \frac{1}{2}$ است.

چون عبارت‌های داخل پرانتز در (۸۲-۹)، (۸۹-۹) و (۹۴-۹) از مرتبه‌ی یک هستند، نسبت تصحیح‌های اسپین-مدار، نسبیتی و ساختار ریز به انرژی اتم هیدروژن از مرتبه‌ی α^2 هستند:

$$\frac{E_{SO}^{(1)}}{|E_n^{(0)}|} \simeq \alpha^2, \quad \left| \frac{E_R^{(1)}}{E_n^{(0)}} \right| \simeq \alpha^2, \quad \frac{E_{FS}^{(1)}}{|E_n^{(0)}|} \simeq \alpha^2 \quad (95-9)$$

تمام این جمله‌ها از مرتبه‌ی 10^{-4} هستند زیرا $\alpha^2 = (1/137)^2 \simeq 10^{-4}$.

در مجموع، هامیلتونی هیدروژن (هنگامی که ساختار ریز در نظر گرفته شود)، از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{FS} = \hat{H}_0 + (\hat{H}_{SO} + \hat{H}_R) = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{r} + \left(\frac{e^2}{2m_e^2 c^2 r^3} \hat{S} \cdot \hat{L} - \frac{\hat{p}^4}{8m_e^3 c^2} \right) \quad (96-9)$$

محاسبه‌ی اختلال مرتبه‌ی اول ترازهای انرژی هیدروژن (هنگامی که ساختار ریز در نظر گرفته می‌شود) نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$E_{nj} = E_n^{(0)} + E_{FS}^{(1)} = E_n^{(0)} \left[1 + \frac{\alpha^2}{4n^2} \left(\frac{4n}{j + \frac{1}{2}} - 3 \right) \right] \quad (97-9)$$

که در آن $E_n^{(0)} = -13.6 \text{ eV} / n^2$ است. برخلاف $E_n^{(0)}$ که برحسب l واگن است، هر تراز انرژی E_{nj} به دو تراز $E_{n(l \pm \frac{1}{2})}$ شکافته می‌شود زیرا به‌ازای یک مقدار معلوم l ، دو مقدار j وجود دارد: $j = l \pm \frac{1}{2}$. علاوه بر ساختار ریز، هنوز اثر (کوچک‌تر) دیگری وجود دارد که به‌عنوان ساختار فوق ریز شناخته می‌شود. ساختار فوق ریز هیدروژن از برهمکنش اسپین الکترون با اسپین هسته نتیجه می‌شود. هنگامی که تصحیح‌های فوق ریز در نظر گرفته می‌شوند، هر تراز ساختار ریز به یک سری تراز فوق ریز شکافته می‌شود. به‌عنوان مثال، هنگامی که جفت‌شدگی فوق ریز در حالت پایه‌ی هیدروژن به حساب آورده شود، تراز $1S_{1/2}$ به دو تراز فوق ریز به اندازه‌ی انرژی $5.89 \times 10^{-6} \text{ eV}$ شکافته می‌شود و وقتی اتم از تراز فوق ریز بالاتر به تراز فوق ریز پایین‌تر گسیل خودبه‌خود انجام می‌دهد، متناظر با تابشی با بسامد $1.42 \times 10^9 \text{ Hz}$ و طول موج 21 cm است. باید یادآوری کنیم که منشاء بیشتر اطلاعاتی که پیرامون ابرهای هیدروژنی بین ستاره‌ای داریم، از مطالعات اخترشناسی رادیویی همین خط 21 cm است.

۹-۲-۳-۴ اثر نابهنجار زمین

حال اتم هیدروژنی را در نظر می‌گیریم که در میدان مغناطیسی یکنواخت خارجی \mathbf{B} قرار دارد. اثر میدان مغناطیسی خارجی روی اتم، جابه‌جایی ترازهای انرژی آن است که اثر زمین نامیده می‌شود. در فصل ۶ اثر زمین را مطالعه کردیم ولی در آنجا اسپین الکترون را نادیده گرفتیم. در این بخش قصد داریم آن را به حساب آوریم. برهمکنش میدان مغناطیسی با گشتاورهای دوقطبی مغناطیسی مداری و اسپینی الکترون (μ_S و μ_L) موجب ایجاد دو جمله‌ی مربوط به انرژی $-\mu_S \cdot \mathbf{B}$ و $-\mu_L \cdot \mathbf{B}$ می‌شود که جمع آنها را انرژی زمین می‌نامیم:

$$\begin{aligned} \hat{H}_Z &= -\mu_L \cdot \mathbf{B} - \mu_S \cdot \mathbf{B} = \frac{e}{2m_e c} \mathbf{L} \cdot \mathbf{B} + \frac{e}{m_e c} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} \\ &= \frac{e}{2m_e c} (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \cdot \mathbf{B} = \frac{eB}{2m_e c} (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) \end{aligned} \quad (9-98)$$

با $\mu_L = -eL/(2m_e c)$ و $\mu_S = -S/(m_e c)$ برای راحتی کار، می‌توانیم \mathbf{B} را در امتداد محور z در نظر بگیریم: $\mathbf{B} = B\hat{z}$.

هنگامی که اتم هیدروژن در یک میدان مغناطیسی خارجی قرار می‌گیرد، هامیلتونی آن از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{FS} + \hat{H}_Z \quad (9-99)$$

مانند \hat{H}_{FS} ، انتظار می‌رود که تصحیح ناشی از \hat{H}_Z رابطه‌ی (۹-۹۹) در مقایسه با \hat{H}_0 کوچک باشد، از این رو می‌توان به آن به عنوان یک اختلال پرداخت. اکنون به صورت جداگانه می‌توانیم حالت‌هایی را در نظر بگیریم که در آنها میدان مغناطیسی \mathbf{B} قوی یا ضعیف است. اما قوی یا ضعیف نسبت به چه چیزی؟ چون می‌توان \hat{H}_Z و $\hat{H}_{SO} = W\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ (۹-۷۴) و $\hat{H}_Z = B\mu_B(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z)/\hbar$ نوشت، داریم: $\hat{H}_Z/\hat{H}_{SO} \sim B\mu_B/W$ که در آن μ_B مگنتون بوهر ($\mu_B = e\hbar/(2m_e c)$) است. بنابراین حالت‌های $B \gg W/\mu_B$ و $B \ll W/\mu_B$ به ترتیب متناظر با میدان‌های مغناطیسی ضعیف و قوی هستند.

اثر زمین در میدان مغناطیسی قوی

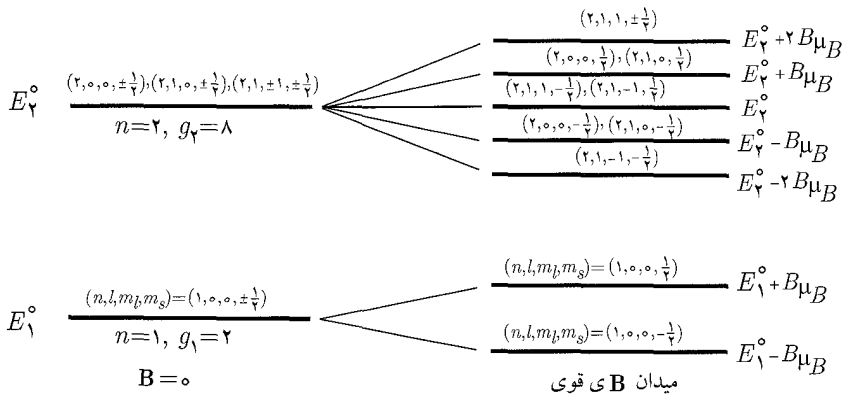
اثر یک میدان مغناطیسی خارجی قوی روی اتم هیدروژن، اثر پاشن-بک^۱ نامیده می‌شود. اگر \mathbf{B} قوی باشد ($B \gg W/\mu_B$) آنگاه جمله‌ی $eB(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z)/(2m_e c)$ بسیار بزرگ‌تر از ساختار ریز می‌شود. با چشم‌پوشی از \hat{H}_{FS} می‌توانیم (۹-۹۹) را به رابطه‌ی زیر کاهش دهیم:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_Z = \hat{H}_0 + \frac{eB}{2m_e c} (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) \quad (9-100)$$

چون \hat{H}_0 با \hat{H}_Z جابه‌جا می‌شود (زیرا \hat{H}_0 با \hat{L}_z و \hat{S}_z جابه‌جا می‌شود)، می‌توان آنها را با مجموعه‌ی حالت‌های مشترک $|nlm_l m_s\rangle$ قطری کرد:

$$\hat{H}|nlm_l m_s\rangle = \left[\hat{H}_0 + \frac{eB}{2m_e c} (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) \right] |nlm_l m_s\rangle = E_{nlm_l m_s} |nlm_l m_s\rangle \quad (9-101)$$

1) Paschen-Back



شکل ۹-۲ شکافتگی ترازهای انرژی $n=1$ و $n=2$ اتم هیدروژن هنگامی که در یک میدان مغناطیسی خارجی قوی قرار می‌گیرد؛ $\mu_B = e\hbar/(2m_e c)$.

که در آن

$$E_{nlm_l m_s} = E_n^{(0)} + \frac{eB\hbar}{2m_e c} (m_l + 2m_s) = -\frac{e^2}{2a_0 n^2} + \frac{eB\hbar}{2m_e c} (m_l + 2m_s) \quad (9-10)$$

بنابراین ترازهای انرژی $E_n^{(0)}$ به اندازه‌ی $\Delta E = B\mu_B(m_l + 2m_s)$ با $\mu_B = e\hbar/(2m_e c)$ جابه‌جا می‌شوند که به‌عنوان جابه‌جایی باشن-بک شناخته می‌شود (شکل ۹-۲). هنگامی که $\mathbf{B} = 0$ است، واگنی هر تراز هیدروژن از رابطه‌ی $g_n = 2 \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2n^2$ بدست می‌آید. هنگامی که $\mathbf{B} \neq 0$ است، حالت‌های با مقدار یکسان $(m_l + 2m_s)$ هنوز واگن‌اند.

اثر زمین در میدان مغناطیسی ضعیف

اگر \mathbf{B} کوچک باشد ($B \ll W/\mu_B$) آنگاه باید تمام جمله‌های هامیلتونی (۹-۹۹) را در نظر بگیریم. جمله‌ی \hat{H}_{FS} مربوط به ساختار رین، اختلال غالب خواهد بود. در حالتی که در آن هامیلتونی همزمان شامل چندین اختلال است، باید به صورت منفرد به آنها پردازیم و از غالب‌ترین آنها شروع کنیم و سپس بعدی و به‌همین ترتیب. در این حالت باید ویژه‌حالتی را انتخاب کنیم که هامیلتونی مختل نشده و اختلال غالب را قطری می‌کند^۲. در اثر زمین در میدان مغناطیسی ضعیف، چون \hat{H}_{FS} اختلال غالب است، بهترین ویژه‌حالت‌ها برای استفاده عبارتند از $|nljm_j\rangle$ زیرا به صورت همزمان \hat{H} و \hat{H}_{FS} را قطری می‌کنند. با نوشتن $\hat{L}_z + 2\hat{S}_z$ به صورت $\hat{J}_z + \hat{S}_z$ که در آن $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$ تکانه‌ی زاویه‌ای کل الکترون

(۲) هنگامی که اختلال‌های مختلف اندازه‌ی تقریباً یکسانی دارند، حالتی که ویژه‌حالت مشترک \hat{H} و هر یک از اختلال‌ها است، انتخاب قابل قبولی خواهد بود.

را نمایش می‌دهد، می‌توانیم (۹-۹۹) را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{FS} + \hat{H}_Z = \hat{H}_0 + \hat{H}_{FS} + \frac{eB}{\sqrt{m_e c}} (\hat{J}_z + \hat{S}_z) \quad (۹-۱۰۳)$$

در محاسبه‌ی اختلال مرتبه‌ی اول، سهم \hat{H}_Z از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$E_Z^{(1)} = \langle nljm_j | \hat{H}_Z | nljm_j \rangle = \frac{eB}{\sqrt{m_e c}} \langle nljm_j | \hat{J}_z + \hat{S}_z | nljm_j \rangle \quad (۹-۱۰۴)$$

چون $\langle nljm_j | \hat{J}_z | nljm_j \rangle = \hbar m_j$ است و با استفاده از عبارت $\langle nljm_j | \hat{S}_z | nljm_j \rangle$ که در فصل ۷ محاسبه شد:

$$\begin{aligned} \langle nljm_j | \hat{S}_z | nljm_j \rangle &= \frac{\langle nljm_j | \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{S}} | nljm_j \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle nljm_j | \hat{J}_z | nljm_j \rangle \\ &= \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \hbar m_j \end{aligned} \quad (۹-۱۰۵)$$

می‌توانیم (۹-۱۰۴) را به رابطه‌ی زیر کاهش دهیم:

$$E_Z^{(1)} = \frac{eB\hbar}{\sqrt{m_e c}} \left[1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \right] m_j = \frac{eB\hbar}{\sqrt{m_e c}} g_j m_j = B \mu_B m_j g_j \quad (۹-۱۰۶)$$

که در آن $\mu_B = e\hbar/(2m_e c)$ مگنتون بوهر الکترون و g_j عامل لانده یا نسبت ژیرومغناطیسی است:

$$g_j = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \quad (۹-۱۰۷)$$

این رابطه نشان می‌دهد که وقتی $l = 0$ و $s = j$ است، داریم: $g_s = 2$ و هنگامی که $s = 0$ و $l = j$ است، داریم: $g_l = 1$. به عنوان مثال، برای یک حالت اتمی^۳ مانند ${}^2P_{3/2}$ رابطه‌ی (۹-۱۰۷) نشان می‌دهد که عامل آن از $g_j = 3/2 = \frac{4}{3}$ بدست می‌آید زیرا $1 + \frac{1}{3} = \frac{4}{3}$ و $j = l + s = 1 + \frac{1}{2}$ است. بدین ترتیب می‌توانیم عامل هر حالت را نتیجه بگیریم:

حالت	${}^2S_{1/2}$	${}^2P_{1/2}$	${}^2P_{3/2}$	${}^2D_{3/2}$	${}^2D_{5/2}$	${}^2F_{5/2}$	${}^2F_{7/2}$	(۹-۱۰۸)
g_j	۲	$\frac{2}{3}$	$\frac{4}{3}$	$\frac{4}{5}$	$\frac{6}{5}$	$\frac{6}{7}$	$\frac{8}{7}$	

(۳) در اینجا از نمادگذاری طیفی استفاده می‌کنیم که در آن $L_j^{(s+1)}$ یک حالت اتمی را نشان می‌دهد که اسپین آن s ، تکانه‌ی زاویه‌ای کل آن j و تکانه‌ی زاویه‌ی مداری آن L است که در آن مقدارهای $0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots$ به ترتیب با حروف بزرگ P, S, D, F, G, H, ... نمایش داده شده‌اند (فصل ۸ را ببینید).

از (۹-۱۰۷) می‌بینیم که عامل‌های لاندهی متناظر با l یکسان ولی مقدارهای متفاوت j (ناشی از اسپین) مساوی نیستند زیرا به‌ازای $s = \frac{1}{2}$ و $j = l \pm \frac{1}{2}$ داریم:

$$g_{j=l \pm \frac{1}{2}} = 1 \pm \frac{1}{2l+1} = \begin{cases} \frac{2l+2}{2l+1} & j = l + \frac{1}{2} \text{ به‌ازای} \\ \frac{2l}{2l+1} & j = l - \frac{1}{2} \text{ به‌ازای} \end{cases} \quad (9-109)$$

با ترکیب (۹-۹۷)، (۹-۱۰۳) و (۹-۱۰۶) می‌توانیم انرژی یک اتم هیدروژن در یک میدان مغناطیسی خارجی ضعیف را به‌صورت زیر بنویسیم:

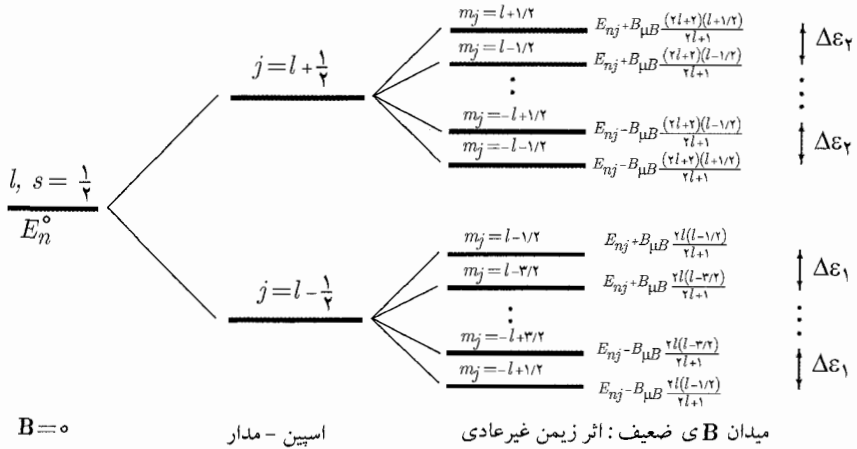
$$E_{nj} = E_n^{(0)} + E_{FS}^{(1)} + E_Z^{(1)} = E_n^{(0)} + \frac{\alpha^2 E_n^{(0)}}{4n^2} \left(\frac{4n}{j + \frac{1}{2}} - 3 \right) + \frac{eB\hbar}{2m_e c} m_j g_j \quad (9-110)$$

بنابراین اثر میدان مغناطیسی روی اتم شکافته شدن ترازهای انرژی به فاصله $\Delta E = B\mu_B m_j g_j$ است. برخلاف ترازهای انرژی به‌دست آمده در فصل ۶ که در آن اسپین الکترون را نادیده گرفتیم، ترازهای انرژی (۹-۱۱۰) برحسب l واگن نیستند. هر تراز انرژی j به تعداد زوج $(2j + 1)$ زیرتراز متناظر با $(2j + 1)$ مقدار m_j شکافته می‌شود: $j - 1, j, \dots, j - 1, -j, -j + 1, \dots, -j$. همانطور که در شکل ۹-۳ نشان داده شده است، شکافتگی‌های بین زیرترازهای متناظر با j یکسان ثابت‌اند: فاصله‌ی بین زیرترازهای متناظر با $j = l - 1/2$ و $j = l + 1/2$ همگی برابر با $\Delta\epsilon_1 = B\mu_B(2l)/(2l + 1)$ و فاصله‌ی بین زیرترازهای متناظر با $j = l + 1/2$ برابر با $\Delta\epsilon_2 = B\mu_B(2l + 2)/(2l + 1)$ است. برخلاف اثر بهنجار زمین، فاصله‌ی بین ترازهای شکافته شده با l یکسان (و مقدارهای متفاوت j) دیگر ثابت نیست ($\Delta\epsilon_1 \neq \Delta\epsilon_2$) زیرا به عامل لانده g_j بستگی دارند. به‌ازای یک مقدار معلوم j ، دو مقدار متفاوت g_j متناظر با $j = l \pm \frac{1}{2}$ وجود دارد: $g_{j=l+1/2} = (2l+2)/(2l+1)$ و $g_{j=l-1/2} = (2l)/(2l+1)$ (۹-۱۰۹) را ببینید. این فاصله‌ی نامساوی بین ترازهای شکافته شده، اثر نابهنجار زمین نامیده می‌شود.

۹-۳ روش وردشی

سیستم‌هایی وجود دارند که هامیلتونی آنها معلوم است ولی نمی‌توان آنها را به‌صورت دقیق یا با پرداختن به بحث اختلال حل کرد. یعنی هامیلتونی دقیقاً مرتبطی وجود ندارد که بتوان آن را به‌صورت دقیق یا به‌صورت تقریبی توسط نظریه‌ی اختلال حل کرد زیرا تقریب مرتبه‌ی نخست به اندازه‌ی کافی دقیق نیست. یکی از روش‌های تقریبی که برای حل چنین مسأله‌هایی مناسب است، روش وردشی است که روش ریلی-ریس^۴ نیز نامیده می‌شود. در این روش نیازی به دانستن هامیلتونی‌های ساده‌تری که بتوان دقیقاً آنها را حل کرد،

4) Rayleigh-Ritz



شکل ۳-۹ شکافتگی یک تراز l ناشی از برهمکنش اسپین-مدار و میدان مغناطیسی خارجی ضعیف با $E_{nj} = E_n^0 + E_{SO}^{(1)}$. تمام زیرترازهای پایین تر فاصله‌های یکسانی دارند: $\Delta\epsilon_1 = B\mu_B(2l+1)$ و زیرترازهای بالایی نیز فاصله‌های یکسانی دارند: $\Delta\epsilon_2 = B\mu_B(2l+2)/(2l+1)$ با $\mu_B = e\hbar/(2m_e c)$.

نداریم. روش وردشی برای تعیین مقادارهای حد بالا برای ویژه‌مقدارهای انرژی سیستمی که هامیلتونی آن معلوم است ولی ویژه‌مقدارها و ویژه‌حالت‌های آن معلوم نیستند، مفید است. این روش به‌خصوص برای تعیین حالت پایه مفید است اما برای تعیین ترازهای انرژی حالت‌های برانگیخته روشی وقت‌گیر و دشوار است. در چارچوب روش وردشی، مسأله‌ی ویژه‌مقداری زیر حل نمی‌شود:

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{۱۱۱-۹}$$

بلکه به جای آن از طرحی وردشی برای یافتن ویژه‌مقدارهای انرژی و ویژه‌تابع‌های تقریبی از معادله‌ی وردشی زیر استفاده می‌شود:

$$\delta E(\psi) = 0 \tag{۱۱۲-۹}$$

که در آن $E(\psi)$ مقدار چشمداشتی انرژی در حالت $|\psi\rangle$ است:

$$E(\psi) = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \tag{۱۱۳-۹}$$

اگر $|\psi\rangle$ به یک پارامتر α بستگی داشته باشد آنگاه $E(\psi)$ نیز به α بستگی خواهد داشت. جواب‌های وردشی (۱۱۲-۹) ما را قادر می‌سازد تا α را به منظور کمینه کردن $E(\psi)$ تغییر دهیم. مقدار کمینه‌ی $E(\psi)$ یک تقریب حد بالا را برای انرژی واقعی سیستم فراهم می‌کند.

روش وردشی به‌خصوص برای تعیین انرژی حالت پایه و ویژه‌حالت آن بدون حل صریح معادله‌ی شرودینگر مفید است. توجه کنید که برای هر تابع آزمون (دلخواه) $|\psi\rangle$ که انتخاب می‌کنیم، انرژی E که از

(۹-۱۱۳) به دست می‌آید، همیشه بزرگ‌تر از انرژی دقیق E_0 است:

$$E = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0. \quad (9-114)$$

شرط تساوی تنها زمانی روی می‌دهد که $|\psi\rangle$ متناسب با حالت پایه‌ی واقعی $|\psi_0\rangle$ باشد. برای اثبات این مطلب، به سادگی تابع آزمون $|\psi\rangle$ را برحسب ویژه‌حالت‌های دقیق \hat{H} بسط می‌دهیم:

$$|\psi\rangle = \sum_n a_n |\phi_n\rangle \quad (9-115)$$

با

$$\hat{H}|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle \quad (9-116)$$

و چون برای سیستم‌های مقید یک بعدی غیرواگن $E_0 \geq E_n$ است، داریم:

$$E = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\sum_n |a_n|^2 E_n}{\sum_n |a_n|^2} \geq \frac{E_0 \sum_n |a_n|^2}{\sum_n |a_n|^2} = E_0. \quad (9-117)$$

که (۹-۱۱۴) را ثابت می‌کند.

برای محاسبه‌ی انرژی حالت پایه، باید چهار مرحله‌ی زیر را انجام دهیم:

- ابتدا بر مبنای شهود فیزیکی، تابع آزمون مناسبی را حدس بزنید که تمام ویژگی‌های فیزیکی حالت پایه (تقارن‌ها، تعداد گره‌ها، هموار بودن، رفتار در بی‌نهایت و ...) را به حساب آورد. برای ویژگی‌هایی که در مورد آنها مطمئن نیستید، در تابع آزمون پارامترهای قابل تنظیم $\alpha_1, \alpha_2, \dots$ را در نظر بگیرید (یعنی $|\psi_0\rangle = |\psi_0(\alpha_1, \alpha_2, \dots)\rangle$) که امکان‌های مختلف این ویژگی‌های نامعلوم را توضیح می‌دهد.
- دوم این که با استفاده از (۹-۱۱۳) انرژی را محاسبه کنید. این محاسبه عبارتی را نتیجه می‌دهد که به پارامترهای $\alpha_1, \alpha_2, \dots$ بستگی دارد:

$$E_0(\alpha_1, \alpha_2, \dots) = \frac{\langle \psi_0(\alpha_1, \alpha_2, \dots) | \hat{H} | \psi_0(\alpha_1, \alpha_2, \dots) \rangle}{\langle \psi_0(\alpha_1, \alpha_2, \dots) | \psi_0(\alpha_1, \alpha_2, \dots) \rangle} \quad (9-118)$$

در بسیاری از حالت‌ها فرض می‌شود که $|\psi_0(\alpha_1, \alpha_2, \dots)\rangle$ بهنجار است از این رو مخرج کسر این عبارت برابر با ۱ است.

- سوم این که با استفاده از (۹-۱۱۸) و با تغییر پارامترهای قابل تنظیم α_i تا زمانی که E_0 کمینه شود، به دنبال کمینه‌ی $E_0(\alpha_1, \alpha_2, \dots)$ بگردید. یعنی $E_0(\alpha_1, \alpha_2, \dots)$ را نسبت به $\alpha_1, \alpha_2, \dots$ کمینه کنید:

$$\frac{\partial E_0(\alpha_1, \alpha_2, \dots)}{\partial \alpha_i} = \frac{\partial \langle \psi_0(\alpha_1, \alpha_2, \dots) | \hat{H} | \psi_0(\alpha_1, \alpha_2, \dots) \rangle}{\partial \alpha_i \langle \psi_0(\alpha_1, \alpha_2, \dots) | \psi_0(\alpha_1, \alpha_2, \dots) \rangle} = 0. \quad (9-119)$$

با $i = 1, 2, \dots$ این کار مقدارهای $(\alpha_1, \alpha_2, \dots)$ را نتیجه می‌دهد که E_0 را کمینه می‌کنند.

- چهارم این که مقدارهای $(\alpha_1, \alpha_2, \dots)$ را در (۹-۱۱۸) جاگذاری کنید تا مقدار تقریبی انرژی به دست آید. بنابراین مقدار $E_0(\alpha_1, \alpha_2, \dots)$ به دست آمده، قید بالایی برای انرژی حالت پایه دقیق E_0 فراهم می‌کند. آنگاه ویژه حالت دقیق $|\phi_0\rangle$ حالت پایه با حالت $|\psi_0(\alpha_1, \alpha_2, \dots)\rangle$ تقریب زده می‌شود.

اما در مورد انرژی حالت‌های برانگیخته چه می‌توان گفت؟ می‌توان روش وردشی را برای یافتن مقدارهای تقریبی انرژی چند حالت برانگیختهی نخست نیز به کار برد. به عنوان مثال، برای یافتن انرژی و ویژه حالت نخستین حالت برانگیخته که E_1 و $|\phi_1\rangle$ را تقریب خواهند زد، باید تابع آزمون $|\psi_1\rangle$ را، که نسبت به $|\psi_0\rangle$ متعامد باشد، انتخاب کنیم:

$$\langle \psi_1 | \phi_0 \rangle = 0 \quad (۹-۱۲۰)$$

سپس مانند روشی که در مورد حالت پایه انجام دادیم، عمل می‌کنیم. یعنی معادله‌ی وردشی (۹-۱۱۲) را برای $|\psi_1\rangle$ حل می‌کنیم:

$$\frac{\partial \langle \psi_1(\alpha_1, \alpha_2, \dots) | \hat{H} | \psi_1(\alpha_1, \alpha_2, \dots) \rangle}{\partial \alpha_i \langle \psi_1(\alpha_1, \alpha_2, \dots) | \psi_1(\alpha_1, \alpha_2, \dots) \rangle} = 0 \quad (i = 1, 2, \dots) \quad (۹-۱۲۱)$$

به صورت مشابه، برای محاسبه‌ی دومین حالت برانگیخته، (۹-۱۱۲) را برای $|\psi_2\rangle$ حل می‌کنیم و دو شرط زیر را به حساب می‌آوریم:

$$\langle \psi_2 | \psi_0 \rangle = 0 \quad \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle = 0 \quad (۹-۱۲۲)$$

در مسئله‌ی وردشی می‌توانیم این شرط‌ها را با کمک ضرایب لاگرانژ لحاظ کنیم؛ یعنی به وسیله‌ی یک اصل وردشی مقید.

در این روش، اصولاً می‌توانیم هر حالت برانگیخته‌ی دیگری را محاسبه هم کنیم. اما هرچه با حالت‌های برانگیخته‌ی بالاتری سروکار داشته باشیم، روند وردشی پیچیده‌تر می‌شود. در نتیجه، اساساً این روش برای تعیین حالت پایه مورد استفاده قرار می‌گیرد.

ملاحظات

در مسائلی که در آنها مشتق اول تابع موج در مقدار معلوم x ناپیوسته است، هنگام استفاده از عبارت زیر باید مراقب بود:

$$-\left\langle \psi \left| \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right| \psi \right\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} dx \quad (۹-۱۲۳)$$

بی‌توجهی و استفاده‌ی سراسر از این عبارت، گاهی وقت‌ها به یک جمله‌ی انرژی جنبشی منفی می‌انجامد (مسئله‌ی حل شده‌ی ۹-۶). شخص به جای آن می‌تواند از رابطه‌ای به شکل زیر استفاده کند:

$$-\left\langle \psi \left| \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right| \psi \right\rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{d\psi(x)}{dx} \right|^2 dx \quad (۹-۱۲۴)$$

توجه کنید که (۹-۱۲۳) و (۹-۱۲۴) یکسان‌اند. انتگرال‌گیری جزء به جزء به نتیجه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{d\psi(x)}{dx} \right|^2 dx &= \psi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx} \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} dx \\ &= - \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} dx \end{aligned} \quad (۹-۱۲۵)$$

زیرا هنگامی که $x \rightarrow \pm\infty$ میل می‌کند، $\psi^*(x)d\psi(x)/dx$ به صفر میل می‌کند (این مطلب هنگامی درست است که $\psi(x)$ یک حالت مقید باشد ولی هنگامی که $\psi(x)$ یک موج تخت باشد، درست نیست). اما در مورد محاسبه‌ی $\langle \psi | -(\hbar^2/(2m)\Delta) | \psi \rangle$ در سه بعد چه می‌توان گفت؟ می‌توانیم (۹-۱۲۴) را تعمیم دهیم. برای این کار، تنها باید از قضیه‌ی گاوس^۵ بهره ببریم تا نشان دهیم که

$$\int (\nabla\psi^*(\mathbf{r})) \cdot (\nabla\psi(\mathbf{r})) d^3r = - \int \psi^*(\mathbf{r}) \nabla^2\psi(\mathbf{r}) d^3r \quad (۹-۱۲۶)$$

برای دیدن این مطلب، انتگرال‌گیری جزء به جزء به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\int_S \psi^*(\mathbf{r}) \nabla\psi(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{A} = \int_V [(\nabla\psi^*(\mathbf{r})) \cdot (\nabla\psi(\mathbf{r})) + \psi^*(\mathbf{r}) \nabla^2\psi(\mathbf{r})] d^3r \quad (۹-۱۲۷)$$

و با توجه به این که اگر $\psi(\mathbf{r})$ یک حالت مقید باشد آنگاه (هنگامی که $S \rightarrow \infty$ میل می‌کند) انتگرال سطحی $\int_S \psi^*(\mathbf{r}) \nabla\psi(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{S}$ صفر می‌شود، به همان رابطه‌ی (۹-۱۲۶) می‌رسیم. بنابراین جمله‌ی مربوط به انرژی جنبشی (۹-۱۲۴) در سه بعد از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$-\left\langle \psi \left| \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right| \psi \right\rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \int (\nabla\psi^*(\mathbf{r})) \cdot (\nabla\psi(\mathbf{r})) d^3r \quad (۹-۱۲۸)$$

مثال ۹-۴

نشان دهید که (۹-۱۱۲) معادل با معادله‌ی شرودینگر (۹-۱۱۱) است.

حل

با استفاده از (۹-۱۱۳) می‌توانیم (۹-۱۱۲) را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$\delta(\langle \psi | \hat{H} - E | \psi \rangle) = 0 \quad (۹-۱۲۹)$$

۵) قضیه‌ی گاوس بیان می‌کند که انتگرال سطحی بردار \mathbf{B} روی سطح بسته‌ی S برابر است با انتگرال حجمی واگرایی آن بردار روی حجم V محاط شده به وسیله‌ی سطح S : $\int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = \int_V \nabla \cdot \mathbf{B} dV$

چون $|\psi\rangle$ یک تابع مختلط است، می‌توانیم $|\psi\rangle$ و $\langle\psi|$ را به صورت دو تابع مستقل در نظر بگیریم از این رو می‌توانیم وردش‌های روی $|\delta\psi\rangle$ و $\langle\delta\psi|$ را مستقل از هم انجام دهیم. با وردش نخست روی $|\delta\psi\rangle$ ، معادله‌ی (۹-۱۲۹) نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\langle\delta\psi|\hat{H} - E|\psi\rangle = 0 \quad (9-130)$$

چون $|\psi\rangle$ دلخواه است آنگاه (۹-۱۳۰) معادل با $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ است. وردش روی $|\delta\psi\rangle$ به همان نتیجه می‌انجامد. یعنی با وردش (۹-۱۲۹) روی $\langle\delta\psi|$ ، به دست می‌آوریم:

$$\langle\psi|\hat{H} - E|\delta\psi\rangle = 0 \quad (9-131)$$

که از آن معادله‌ی مزدوج مختلط $\langle\psi|\hat{H} = E\langle\psi|$ را به دست می‌آوریم زیرا \hat{H} هرمیتی است.

مثال ۹-۵

یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی را در نظر بگیرید. از روش وردشی برای تخمین انرژی‌های (الف) حالت پایه (ب) نخستین حالت برانگیخته و (پ) دومین حالت برانگیخته استفاده کنید.

حل

این مسأله‌ی ساده ما را قادر می‌کند که جنبه‌های گوناگون روش وردشی را (در یک وضعیت قابل پیش‌بینی) بررسی کنیم زیرا جواب‌های دقیق، معلوم‌اند: $E_0 = \hbar\omega/2$ ، $E_1 = 3\hbar\omega/2$ و $E_2 = 5\hbar\omega/2$.

(الف) تابع آزمونی که برای حالت پایه انتخاب می‌کنیم باید زوج و در همه جا هموار باشد و با میل کردن $x \rightarrow \pm\infty$ صفر شود و گرهی هم نداشته باشد. یک تابع گاوسی این لازمه‌ها را برآورده می‌کند. ولی چیزی که در مورد آن مطمئن نیستیم، پهنای آن است. برای توضیح مطلب، در تابع آزمون پارامتر مقیاس قابل تنظیم α را می‌گنجانیم:

$$\psi_0(x, \alpha) = A e^{-\alpha x^2} \quad (9-132)$$

که در آن A ثابت بهنجارش است. با استفاده از (۲n - از استفاده از $\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\pi/a} \cdot 1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (2n-1)$) می‌توانیم نشان دهیم که $A = (\frac{2\alpha}{\pi})^{1/4}$ از رابطه‌ی $A = (\frac{2\alpha}{\pi})^{1/4}$ بنا بر این عبارت مربوط به $E_0(\alpha)$ از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} \langle\psi_0|\hat{H}|\psi_0\rangle &= A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) e^{-\alpha x^2} dx \\ &= A^2 \frac{\hbar^2 \alpha}{m} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\alpha x^2} dx + A^2 \left(\frac{1}{2} m \omega^2 - \frac{2\hbar^2 \alpha^2}{m} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-2\alpha x^2} dx \\ &= \frac{\hbar^2 \alpha}{m} + \frac{1}{4\alpha} \left(\frac{1}{2} m \omega^2 - \frac{2\hbar^2 \alpha^2}{m} \right) = \frac{\hbar^2}{2m} \alpha + \frac{m\omega^2}{4\alpha} \quad (9-133) \end{aligned}$$

یا

$$E_0(\alpha) = \frac{\hbar^2}{2m}\alpha + \frac{m\omega^2}{\lambda\alpha} \quad (۱۳۴-۹)$$

این رابطه در شکل ۹-۴ نمایش داده شده است. می‌توان مقدار α (متناظر با پایین‌ترین نقطه‌ی منحنی) را از کمینه کردن $E(\alpha)$ نسبت به α به دست آورد:

$$\frac{\partial E_0(\alpha)}{\partial \alpha} = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m\omega^2}{\lambda\alpha^2} = 0 \quad (۱۳۵-۹)$$

که رابطه‌ی $\alpha_0 = m\omega/(2\hbar)$ را نتیجه می‌دهد و زمانی که در (۹-۱۳۴) و (۹-۱۳۲) وارد شود، به رابطه‌های زیر می‌انجامد:

$$E_0(\alpha_0) = \frac{\hbar\omega}{2} \quad \text{و} \quad \psi_0(x, \alpha_0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-m\omega x^2/2\hbar} \quad (۱۳۶-۹)$$

انرژی و تابع موج حالت پایه‌ی به دست آمده از روش وردشی با همتهای دقیق خود یکسان‌اند. (ب) حال بیاید تا انرژی تقریبی E_1 را برای نخستین حالت برانگیخته بیابیم. تابع آزمون $\psi_1(x, \alpha)$ باید فرد باشد و هنگامی که $x \rightarrow \pm\infty$ میل می‌کند، باید صفر شود و تنها باید یک گره داشته باشد و نسبت به $\psi_0(x, \alpha_0)$ رابطه‌ی (۹-۱۳۶) متعامد باشد. تابعی که این لازمه‌ها را برآورده می‌کند، به صورت زیر است:

$$\psi_1(x, \alpha) = Bx e^{-\alpha x^2} \quad (۱۳۷-۹)$$

که در آن B ثابت بهنجارش است. می‌توانیم نشان دهیم که $B = (32\alpha^3/\pi)^{1/4}$ است. توجه کنید که $\langle \psi_0 | \psi_1 \rangle$ صفر است:

$$\langle \psi_0 | \psi_1 \rangle = B \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-\alpha x^2} e^{-m\omega x^2/2\hbar} dx = 0 \quad (۱۳۸-۹)$$

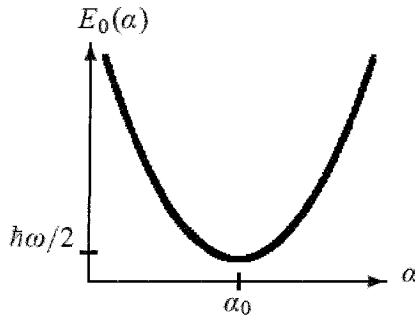
زیرا انتگرال متقارن یک تابع فرد، صفر است ($\psi_0(x)$ زوج و $\psi_1(x)$ فرد است).

با انجام روش مشابهی که برای $E_0(\alpha)$ انجام شد و با توجه به این که $\psi_1(x, \alpha)$ بهنجار است، می‌توانیم نشان دهیم که

$$\begin{aligned} E_1(\alpha) &= \langle \psi_1(\alpha) | \hat{H} | \psi_1(\alpha) \rangle = B^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-\alpha x^2} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right] x e^{-\alpha x^2} dx \\ &= \frac{3\hbar^2}{2m}\alpha + \frac{3m\omega^2}{\lambda\alpha} \end{aligned} \quad (۱۳۹-۹)$$

کمینه کردن $E_1(\alpha)$ نسبت به α (یعنی $\partial E_1(\alpha)/\partial \alpha = 0$) به $\alpha_0 = m\omega/2\hbar$ می‌انجامد. از این رو انرژی و حالت نخستین حالت برانگیخته از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$E_1(\alpha_0) = \frac{3\hbar\omega}{2}, \quad \psi_1(x, \alpha_0) = \left(\frac{4m^3\omega^3}{\pi\hbar^3}\right)^{1/4} x e^{-m\omega x^2/2\hbar} \quad (۱۴۰-۹)$$



شکل ۹-۴ شکل $E_0(\alpha) = \hbar^2 \alpha^2 / (2m) + m\omega^2 / (4\alpha)$

که در توافقی کامل با عبارت‌های دقیق هستند.

(پ) تابع آزمون

$$\psi_2(x, \alpha, \beta) = C(\beta x^2 - 1)e^{-\alpha x^2} \quad (۱۴۱-۹)$$

که شامل دو پارامتر قابل تنظیم α و β است، تمام ویژگی‌های دومین حالت برانگیخته را برآورده می‌کند: تحت پارامتر زوج است، هنگامی که $x \rightarrow \pm\infty$ میل می‌کند، صفر می‌شود و دارای دو گره است. جمله $(\beta x^2 - 1)$ تضمین می‌کند که $\psi_2(x, \alpha, \beta)$ دارای دو گره در $x = \pm 1/\sqrt{\beta}$ است و ثابت بهنجارش C از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$C = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \left[\frac{3\beta^2}{16\alpha^2} - \frac{\beta}{2\alpha} + 1\right]^{-1/2} \quad (۱۴۲-۹)$$

تابع آزمون $\psi_2(x, \alpha, \beta)$ نسبت به $\psi_0(x)$ و $\psi_1(x)$ باید متعامد باشد. ابتدا توجه کنید که در واقع این تابع نسبت به $\psi_1(x)$ متعامد است زیرا $\psi_2(x, \alpha, \beta)$ زوج است در حالی که $\psi_1(x)$ فرد است:

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = C \left(\frac{2m^3 \omega^3}{\pi \hbar^3}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{+\infty} x(\beta x^2 - 1)e^{-\alpha x^2} e^{-m\omega x^2 / 2\hbar} dx = 0 \quad (۱۴۳-۹)$$

در رابطه با شرط متعامد بودن $\psi_2(x)$ نسبت به $\psi_0(x)$ باید گفت که می‌توان آن را به صورت زیر نوشت:

$$\begin{aligned} \langle \psi_0 | \psi_2 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0(x) \psi_2(x, \alpha, \beta) dx \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar}\right)^{1/4} C \int_{-\infty}^{+\infty} (\beta x^2 - 1) e^{-(m\omega/2\hbar + \alpha)x^2} dx \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar}\right)^{1/4} C \left[\frac{\beta}{2(m\omega/2\hbar + \alpha)} - 1 \right] \sqrt{\frac{\pi}{m\omega/2\hbar + \alpha}} = 0 \quad (۱۴۴-۹) \end{aligned}$$

این رابطه به شرط مفیدی بین α و β می‌انجامد:

$$\beta = \frac{m\omega}{\hbar} + 2\alpha \quad (۱۴۵-۹)$$

حال بیابید بر روی تعیین انرژی $E_{\Psi}(\alpha, \beta) = \langle \psi_{\Psi} | \hat{H} | \psi_{\Psi} \rangle$ متمرکز شویم:

$$E_{\Psi}(\alpha, \beta) = C^2 \int_{-\infty}^{+\infty} (\beta x^2 - 1) e^{-\alpha x^2} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right] (\beta x^2 - 1) e^{-\alpha x^2} dx \quad (۱۴۶-۹)$$

پس از انجام محاسباتی طولانی ولی سراسر، رابطه‌های زیر را به دست می‌آوریم:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\langle \psi_{\Psi} \left| \frac{d^2}{dx^2} \right| \psi_{\Psi} \right\rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\alpha + \frac{\beta}{2} + \frac{7\beta^2}{16\alpha} \right) C^2 \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \quad (۱۴۷-۹)$$

$$\frac{1}{2} m \omega^2 \langle \psi_{\Psi} | x^2 | \psi_{\Psi} \rangle = m \omega^2 \left(\frac{15\beta^2}{128\alpha^3} - \frac{3\beta}{16\alpha^2} + \frac{1}{8\alpha} \right) C^2 \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \quad (۱۴۸-۹)$$

ازاین رو

$$E_{\Psi}(\alpha, \beta) = C^2 \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \left(\frac{\hbar^2 \alpha}{2m} + \frac{\hbar^2 \beta}{4m} + \frac{7\hbar^2 \beta^2}{32m\alpha} + \frac{15m\beta^2 \omega^2}{128\alpha^3} - \frac{3m\beta \omega^2}{16\alpha^2} + \frac{m\omega^2}{8\alpha} \right) \quad (۱۴۹-۹)$$

برای به دست آوردن مقدار تقریبی E_{Ψ} ، باید $E_{\Psi}(\alpha, \beta)$ را نسبت به α و β کمینه کنیم: $\partial E_{\Psi}(\alpha, \beta) / \partial \alpha = 0$ و $\partial E_{\Psi}(\alpha, \beta) / \partial \beta = 0$. دو عبارتی که به دست می‌آوریم ما را قادر می‌سازد تا (با حل دستگاهی از دو معادله‌ی خطی با دو مجهول) مقدارهای α_0 و β_0 که $E_{\Psi}(\alpha, \beta)$ را کمینه می‌کنند، به دست آوریم. این روش طولانی و کاملاً خسته کننده است. α_0 و β_0 باید در شرط (۱۴۵-۹) صدق کنند. می‌توانیم از این شرط برای ایجاد رهیافتی بسیار کوتاه‌تر بهره ببریم: این رهیافت از جاگذاری مقدار β از (۱۴۵-۹) در رابطه‌ی انرژی (۱۴۹-۹) تشکیل شده است که عبارتی را نتیجه می‌دهد که به تک پارامتر α بستگی دارد:

$$E_{\Psi}(\alpha) = \left(\frac{15\hbar^2 \alpha}{8m} + \frac{9\hbar\omega}{8} + \frac{7m\omega^2}{16\alpha} + \frac{15m^2 \omega^2}{128\hbar^2 \alpha^2} + \frac{9m^2 \omega^3}{32\hbar \alpha^2} \right) \left(\frac{3m^2 \omega^2}{16\hbar^2 \alpha^2} + \frac{m\omega}{4\hbar \alpha} + \frac{3}{4} \right)^{-1} \quad (۱۵۰-۹)$$

در به دست آوردن این رابطه، (۱۴۵-۹) را در عبارت مربوط به C که با (۱۴۲-۹) داده می‌شود، جاگذاری کرده‌ایم که به نوبه‌ی خود در (۱۴۹-۹) وارد شده است. در این صورت تنها باید E_{Ψ} را نسبت به یک پارامتر (α) کمینه کنیم. این کار $\alpha_0 = m\omega / (2\hbar)$ را نتیجه می‌دهد که هنگامی که در (۱۴۵-۹) وارد شود، به رابطه‌ی $\beta_0 = 2m\omega / \hbar$ می‌انجامد. بنابراین انرژی و تابع موج از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$E_{\Psi}(\alpha_0, \beta_0) = \frac{5}{4} \hbar \omega, \quad \psi_{\Psi}(x, \alpha_0, \beta_0) = \left(\frac{m\omega}{4\pi\hbar} \right)^{1/4} \left(\frac{2m\omega}{\hbar} x^2 - 1 \right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \quad (۱۵۱-۹)$$

این عبارتها با عبارتهای دقیق مربوط به انرژی و تابع موج یکسان‌اند.

مثال ۹-۶

از روش وردشی برای تخمین انرژی حالت پایه ی اتم هیدروژن استفاده کنید.

حل

تابع موج حالت پایه گرهی ندارد و در بی نهایت صفر می شود. بیاید تا تابع زیر را امتحان کنیم:

$$\psi(r, \theta, \phi) = e^{-r/\alpha} \quad (۱۵۲-۹)$$

که در آن α یک پارامتر مقیاس است. $\psi(r)$ هیچ وابستگی زاویه ای ندارد زیرا تابع موج حالت پایه متقارن کروی است. انرژی از رابطه ی زیر به دست می آید:

$$E(\alpha) = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = - \frac{\langle \psi | (\hbar^2 / 2m) \nabla^2 + e^2 / r | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (۱۵۳-۹)$$

که در آن

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int_0^{+\infty} r^2 e^{-2r/\alpha} dr \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi = \pi \alpha^3 \quad (۱۵۴-۹)$$

و

$$- \left\langle \psi \left| \frac{e^2}{r} \right| \psi \right\rangle = -4\pi e^2 \int_0^{+\infty} r e^{-2r/\alpha} dr = -\pi e^2 \alpha^2 \quad (۱۵۵-۹)$$

است. برای محاسبه ی جمله ی مربوط به انرژی جنبشی، می توانیم از (۱۲۸-۹) استفاده کنیم:

$$- \left\langle \psi \left| \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right| \psi \right\rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \int (\nabla \psi^*(r)) \cdot (\nabla \psi(r)) d^3r \quad (۱۵۶-۹)$$

که در آن

$$\nabla \psi^*(r) = \nabla \psi(r) = \frac{d\psi(r)}{dr} \hat{r} = -\frac{1}{\alpha} e^{-r/\alpha} \hat{r} \quad (۱۵۷-۹)$$

ازاین رو

$$- \left\langle \psi \left| \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right| \psi \right\rangle = \frac{4\pi}{\alpha^2} \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^{+\infty} r^2 e^{-2r/\alpha} dr = \frac{\hbar^2 \pi}{2m} \alpha \quad (۱۵۸-۹)$$

با وارد کردن (۱۵۴-۹)، (۱۵۵-۹) و (۱۵۸-۹) در (۱۵۳-۹)، به دست می آوریم:

$$E(\alpha) = \frac{\hbar^2}{2m\alpha^2} - \frac{e^2}{\alpha} \quad (۱۵۹-۹)$$

با کمینه کردن این رابطه نسبت به α ($\alpha = 0$) $\frac{dE(\alpha)}{d\alpha} = -\hbar^2 / (m\alpha^3) + e^2 / \alpha^2 = 0$ ، رابطه ی $\alpha_0 = \hbar^2 / (me^2)$ را به دست می آوریم که هنگامی که در (۱۵۹-۹) وارد شود، به انرژی حالت پایه می انجامد:

$$E(\alpha_0) = -\frac{me^2}{2\hbar^2} \quad (۱۶۰-۹)$$

این انرژی، انرژی حالت پایه ی درست برای اتم هیدروژن است. روش وردشی درست را داده است زیرا تابع آزمون (۱۵۲-۹) به صورت اتفاقی با تابع موج دقیق حالت پایه یکسان است. توجه کنید که پارامتر مقیاس $\alpha_0 = \hbar^2 / (me^2)$ دارای ابعاد طول و برابر با شعاع بوهر است.

۴-۹ روش وِنتزل-کرامرز-بریلوئن

روش وِنتزل-کرامرز-بریلوئن (WKB) برای بحث‌های تقریبی سیستم‌های با پتانسیل‌های آرام-تغییر یعنی پتانسیل‌هایی که در ناحیه‌ای از مرتبه‌ی طول موج دوبروی تقریباً ثابت باقی می‌مانند، مفید است. در مورد سیستم‌های کلاسیکی این ویژگی همیشه برآورده می‌شود زیرا طول موج یک سیستم کلاسیکی به صفر میل می‌کند. بنابراین می‌توان روش WKB را به صورت یک تقریب نیمه‌کلاسیکی در نظر گرفت.

۱-۴-۹ صورت‌بندی عمومی

حرکت یک ذره در پتانسیل مستقل از زمان $V(\mathbf{r})$ را در نظر بگیرید. معادله‌ی شرودینگر برای حالت مانای متناظر برابر است با

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (۱۶۱-۹)$$

یا

$$\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + \frac{1}{\hbar^2}p^2(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (۱۶۲-۹)$$

که در آن $p(\mathbf{r})$ تکانه‌ی کلاسیکی \mathbf{r} است: $p(\mathbf{r}) = \sqrt{2m(E - V(\mathbf{r}))}$. اگر ذره در ناحیه‌ای حرکت کند که در آن $V(\mathbf{r})$ ثابت است آنگاه جواب (۱۶۲-۹) به شکل $\psi(\mathbf{r}) = Ae^{\pm i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}$ است. اما چگونه می‌توان به حالت‌هایی پرداخت که در آنها $V(\mathbf{r})$ ثابت نیست؟ روش WKB بحثی تقریبی برای سیستم‌هایی فراهم می‌کند که پتانسیل آنها (در حالی که ثابت نیستند) تابع‌های آرام-تغییری از \mathbf{r} است. یعنی $V(\mathbf{r})$ در ناحیه‌ای که روی چند طول موج دوبروی گسترش می‌یابد، تقریباً ثابت است. به یاد بیاورید که طول موج دوبروی ذره‌ای به جرم m و انرژی E که در پتانسیل $V(\mathbf{r})$ حرکت می‌کند، از رابطه‌ی $\lambda = h/p = h/\sqrt{2m(E - V(\mathbf{r}))}$ به دست می‌آید.

اساس روش WKB یافتن جوابی برای معادله‌ی (۱۶۲-۹) است به شکل زیر:

$$\psi(\mathbf{r}) = A(\mathbf{r})e^{iS(\mathbf{r})/\hbar} \quad (۱۶۳-۹)$$

که در آن دامنه‌ی $A(\mathbf{r})$ و فاز $S(\mathbf{r})$ (که تابعی حقیقی‌اند) باید تعیین شوند. با جاگذاری (۱۶۳-۹) در (۱۶۲-۹)، معادله‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$A \left[\frac{\hbar^2}{A} \nabla^2 A - (\nabla S)^2 + p^2(\mathbf{r}) \right] - i\hbar \left[2(\nabla A) \cdot (\nabla S) + A \nabla^2 S \right] = 0 \quad (۱۶۴-۹)$$

قسمت‌های حقیقی و موهومی این معادله باید جداگانه صفر شوند:

$$(\nabla S)^2 = p^2(\mathbf{r}) = 2m(E - V(\mathbf{r})) \quad (۱۶۵-۹)$$

$$2(\nabla A) \cdot (\nabla S) + A \nabla^2 S = 0 \quad (۱۶۶-۹)$$

در به دست آوردن (۹-۱۶۵) جمله‌ای که شامل \hbar است (یعنی $(\hbar^2/A)\nabla^2 A$) را نادیده گرفته‌ایم زیرا در مقایسه با $(\nabla S)^2$ و $p^2(\mathbf{r})$ کوچک است. \hbar برای سیستم‌های کلاسیکی بسیار کوچک در نظر گرفته می‌شود. برای روشن شدن جنبه‌های گوناگون روش WKB، بیایید تا حالت ساده‌ی حرکت یک بعدی یک تک‌ذره را بررسی کنیم. بنابراین می‌توانیم (۹-۱۶۵) و (۹-۱۶۶) را به ترتیب به معادله‌های زیر کاهش دهیم:

$$\frac{dS}{dx} = \pm \sqrt{2m(E - V)} = \pm p(x) \quad (۹-۱۶۷)$$

$$2 \left(\frac{d}{dx} \ln A \right) p(x) + \frac{d}{dx} p(x) = 0 \quad (۹-۱۶۸)$$

جواب‌های (۹-۱۶۷) و (۹-۱۶۸) را می‌یابیم. انتگرال‌گیری از (۹-۱۶۷) نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$S(x) = \pm \int dx \sqrt{2m(E - V(x))} = \pm \int p(x) dx \quad (۹-۱۶۹)$$

و می‌توانیم (۹-۱۶۸) را به معادله‌ی زیر کاهش دهیم:

$$\frac{d}{dx} [2 \ln A + \ln p(x)] = 0 \quad (۹-۱۷۰)$$

که به نوبه‌ی خود به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$A(x) = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \quad (۹-۱۷۱)$$

که در آن C یک ثابت دلخواه است. بنابراین (۹-۱۶۹) و (۹-۱۷۱) به ترتیب، فاز $S(x)$ و دامنه‌ی $A(x)$ تابع موج WKB (۹-۱۶۳) را به دست می‌دهند.

با وارد کردن (۹-۱۷۱) و (۹-۱۶۹) در (۹-۱۶۳)، دو جواب تقریبی برای معادله‌ی (۹-۱۶۲) به دست می‌آوریم:

$$\psi_{\pm}(x) = \frac{C_{\pm}}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left[\pm \frac{i}{\hbar} \int^x p(x') dx' \right] \quad (۹-۱۷۲)$$

دامنه‌ی این تابع موج متناسب با $1/\sqrt{p(x)}$ است از این رو احتمال یافتن ذره بین x و $x + dx$ متناسب با $1/p(x)$ است. این همان چیزی است که برای یک ذره‌ی «کلاسیکی» انتظار داریم زیرا زمانی که طول می‌کشد تا ذره مسافت dx را طی کند، متناسب با وارون سرعت (یا تکانه‌ی) آن است.

حال می‌توانیم دو حالت مجزای متناظر با $E > V(x)$ و $E < V(x)$ را بررسی کنیم. ابتدا حالت $E > V(x)$ که ناحیه‌ی مجاز کلاسیکی نامیده می‌شود را بررسی می‌کنیم. در اینجا $p(x)$ یک تابع حقیقی است. عمومی‌ترین جواب (۹-۱۶۲) ترکیبی از $\psi_+(x)$ و $\psi_-(x)$ است:

$$\psi(x) = \frac{C_+}{\sqrt{p(x)}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int^x p(x') dx' \right] + \frac{C_-}{\sqrt{p(x)}} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int^x p(x') dx' \right] \quad (۹-۱۷۳)$$

دوم این که در حالتی که در آن $E < V(x)$ است و به‌عنوان ناحیه ممنوع کلاسیکی نامیده می‌شود، تکانه‌ی $p(x)$ موهومی است و نماهای (۹-۱۷۲) حقیقی می‌شوند:

$$\psi(x) = \frac{C'_-}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_x |p(x')| dx' \right] + \frac{C'_+}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left[\frac{1}{\hbar} \int_x |p(x')| dx' \right] \quad (9-174)$$

معادله‌های (۹-۱۷۳) و (۹-۱۷۴) تابع موج سیستم را به ترتیب در ناحیه‌های مجاز و ممنوع به‌دست می‌دهند. اما در مورد ساختار تابع موج در نزدیکی ناحیه‌های $E \simeq V(x)$ چه می‌توان گفت؟ در نقاط x_i داریم: $E = V(x_i)$ از این رو تکانه‌ی (۹-۱۶۷) صفر می‌شود ($p(x_i) = 0$). این نقاط، نقاط بازگشت کلاسیکی نامیده می‌شوند زیرا از نظر کلاسیکی، ذره در x_i متوقف می‌شود و سپس از آنجا بر می‌گردد تا حرکت خود در جهت مخالف را از سر بگیرد. در این نقاط، تابع موج (۹-۱۷۲) نامتناهی می‌شود زیرا $p(x_i) = 0$ است. سپس باید بررسی کنیم که چگونه تابع موج در نقاط بازگشت را بیابیم. پیش از پرداختن به این موضوع، ابتدا بیایید شرط اعتبار تقریب WKB را مطالعه کنیم.

اعتبار تقریب WKB

برای به‌دست آوردن شرط اعتبار روش WKB بیایید تا اندازه‌ی جمله‌های مختلف (۹-۱۶۴) به‌خصوص $A(\nabla S)$ و $i\hbar A \nabla^2 S$ را بررسی کنیم. چون کمیت‌های از مرتبه‌ی \hbar در حد کلاسیکی بسیار کوچک‌اند، انتظار می‌رود ناحیه‌ی شبه‌کلاسیکی با شرط زیر^۶ داده شود:

$$\left| \hbar \nabla^2 S \right| \ll (\nabla S)^2 \quad (9-175)$$

که در یک بعد می‌توان آن را به‌صورت زیر نوشت:

$$\hbar \left| \frac{S''}{S'^2} \right| \ll 1 \quad (9-176)$$

یا

$$\left| \frac{d}{dx} \left(\frac{\hbar}{S'} \right) \right| \ll 1 \quad (9-177)$$

زیرا $\nabla^2 S = d^2 S / dx^2 = S''$ و $|\nabla S| = dS(x)/dx = S'$. در ادامه قصد داریم ثابت کنیم که این رابطه شرط اعتبار تقریب WKB را نتیجه می‌دهد.

۶ می‌توان شرط (۹-۱۷۵) را به‌صورتی که در ادامه می‌آید، یافت. با جاگذاری $\psi(\mathbf{r}) e^{iS(\mathbf{r})/\hbar}$ در (۹-۱۶۴) و ضرب آن در \hbar^2 ، معادله‌ی $i\hbar \nabla^2 S(\mathbf{r}) - (\nabla S)^2 + p^2(\mathbf{r}) = 0$ را به‌دست می‌آوریم. در حد کلاسیکی، جمله‌ی شامل \hbar ($i\hbar \nabla^2 S(\mathbf{r})$) باید در مقایسه با جمله‌هایی که شامل آن نیستند ($(\nabla S)^2$) کوچک باشد یعنی $|i\hbar \nabla^2 S(\mathbf{r})| \ll (\nabla S)^2$.

چون $S' = \pm p(x)$ است (۹-۱۶۷) را ببینید)، می‌توانیم (۹-۱۷۷) را به رابطه‌ی زیر کاهش دهیم:

$$\left| \frac{d\bar{\lambda}(x)}{dx} \right| \ll 1 \quad (9-178)$$

که در آن $\bar{\lambda}(x) = \lambda(x)/(2\pi)$ و $\lambda(x)$ طول موج دوپروی ذره است:

$$\bar{\lambda}(x) = \frac{\hbar}{p(x)} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(E - V(x))}} \quad (9-179)$$

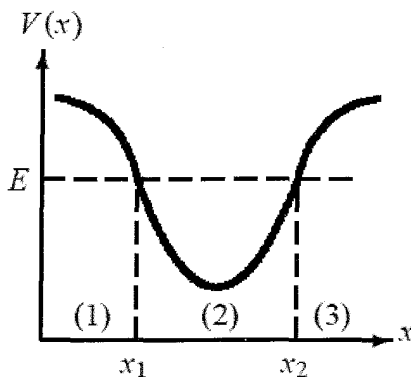
شرط (۹-۱۷۸) به این معنی است که آهنگ تغییر طول موج دوپروی کوچک است (یعنی طول موج ذره باید روی مسافت‌هایی که از مرتبه‌ی این طول موج هستند، به آرامی تغییر کند). ولی این شرط در مورد سیستم‌های کلاسیکی همیشه برقرار است. بنابراین شرط اعتبار روش WKB با رابطه‌ی زیر داده می‌شود:

$$\left| \frac{d\bar{\lambda}(x)}{dx} \right| = \left| \frac{d}{dx} \left(\frac{\hbar}{p(x)} \right) \right| \ll 1 \quad (9-180)$$

به وضوح این شرط در نقطه‌های بازگشت کلاسیکی ($E = V(x_i)$) دیگر برقرار نیست زیرا $p(x_i) = 0$ است. از نظر کلاسیکی، ذره در $x = x_i$ متوقف می‌شود و سپس در جهت مخالف حرکت می‌کند. با کوچک شدن $p(x)$ ، طول موج (۹-۱۷۹) بزرگ می‌شود و از این رو این لازمه را که کوچک باقی می‌ماند به آرامی تغییر می‌کند را نقض می‌کند. هنگامی که $p(x)$ بسیار کوچک است، شرط (۹-۱۸۰) دیگر برقرار نیست. بنابراین تقریب WKB در هر دو ناحیه‌ی مجاز و ممنوع برقرار است ولی در نقطه‌های بازگشت کلاسیکی برقرار نیست.

اما چگونه می‌توان تابع موج ذره در $x = x_i$ را مشخص کرد؟ یا چگونه می‌توان حالت‌های مجاز (۹-۱۷۳) را با همتهای ممنوع (۹-۱۷۴) آنها مرتبط کرد؟ با عبور از نقطه‌های بازگشت کلاسیکی از ناحیه‌ی مجاز به ناحیه‌ی ممنوع و برعکس، باید بررسی کنیم که چگونه تابع موج ذره را در همه جا و به خصوص در نقطه‌های بازگشت تعیین کنیم. این کار مشکل‌ترین مسأله در روش WKB است زیرا در نقطه‌های بازگشت با مشکل مواجه می‌شود. در بخش بعد، قصد داریم تا با حل معادله‌ی شرودینگر در نزدیکی $x = x_i$ و در خود این نقطه‌ها، به این مسأله بپردازیم. این کار را با استفاده از یک تقریب انجام خواهیم داد: فرض می‌کنیم پتانسیل در نزدیکی نقطه‌های بازگشت با خط راستی که شیب آن برابر با شیب پتانسیل در نقطه‌ی بازگشت است، داده می‌شود.

در ادامه، می‌خواهیم تقریب WKB را برای یافتن ترازهای انرژی و تابع موج ذره‌ای که در یک چاه پتانسیل حرکت می‌کند، به کار ببریم. می‌خواهیم نشان دهیم فرمول‌هایی که ترازهای انرژی را می‌دهند به این چاه پتانسیل دیواره‌های صلب دارد یا خیر، بستگی دارند. در واقع، این فرمول‌ها حتی به تعداد دیواره‌های صلبی که پتانسیل دارد، نیز بستگی دارند. بدین منظور، قصد داریم تا سه حالت جداگانه‌ی مربوط به چاه پتانسیل: بدون دیواره‌های صلب، با یک دیواره‌ی صلب و دو دیواره‌ی صلب را در نظر بگیریم.



شکل ۹-۵ چاه پتانسیل بدون دیواره: ناحیه‌های (۱) و (۳) از نظر کلاسیکی ممنوع‌اند در حالی که ناحیه (۲) مجاز است.

۹-۴-۲ حالت‌های مقید چاه‌های پتانسیل بدون دیواره‌های صلب

همانطور که در شکل ۹-۵ نشان داده است، چاه پتانسیلی را در نظر بگیرید که هیچ دیواره‌ی صلبی ندارد. در اینجا ناحیه‌های ممنوع کلاسیکی با $x < x_1$ و $x > x_2$ و ناحیه‌ی مجاز کلاسیکی با $x_1 < x < x_2$ مشخص شده است و x_1 و x_2 نقطه‌های بازگشت کلاسیکی‌اند. این مثال، یک مثال مناسب و ساده برای نشان دادن جنبه‌های مختلف روش WKB به خصوص چگونگی تعیین تابع موج ذره در نقطه‌های بازگشت است. خواهیم دید که چگونه این روش از انرژی‌های حالت مقیدی که به دست خواهند آمد، قاعده‌ی کوانتس بوه-زومرفیلد را نتیجه می‌دهد.

روش WKB در همه‌جای سه ناحیه (۱)، (۲) و (۳) به جز در نزدیکی دو نقطه‌ی بازگشت $x = x_1$ و $x = x_2$ که در آنها $E = V(x_1) = V(x_2)$ است، به کار می‌رود. می‌توان تقریب WKB برای تابع موج در ناحیه‌های (۱) و (۳) را از (۹-۱۷۴) و تقریب در ناحیه (۲) را از (۹-۱۷۳) نتیجه گرفت: تابع موج باید به ترتیب با میل کردن به $x \rightarrow -\infty$ و $x \rightarrow +\infty$ به صورت نمایی در ناحیه‌های (۱) و (۳) کاهش پیدا کند ولی در ناحیه (۲) باید نوسانی باشد:

$$\psi_{1\text{WKB}}(x) = \frac{C_1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} |p(x')| dx' \right] \quad x < x_1 \quad (9-181)$$

$$\psi_{2\text{WKB}}(x) = \frac{C_2'}{\sqrt{p(x)}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_1} p(x') dx' \right] + \frac{C_2''}{\sqrt{p(x)}} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' \right] \quad x_1 < x < x_2 \quad (9-182)$$

$$\psi_{3\text{WKB}}(x) = \frac{C_3}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x |p(x')| dx' \right] \quad x > x_2 \quad (9-183)$$

ضریب‌های C_1 ، C_2' ، C_2'' و C_3 باید تعیین شوند. برای این کار، باید جواب‌های $\psi_1(x)$ ، $\psi_2(x)$ و $\psi_3(x)$ را

هنگام عبور از یک ناحیه به ناحیه‌ی دیگر از طریق نقطه‌های بازگشت $x = x_1$ و $x = x_2$ که در آنها تقریب شبه‌کلاسیکی معتبر نیست، به هم مرتبط کنیم. یعنی باید هنگام عبور از ناحیه‌ی (۳) به ناحیه‌ی (۲)، $\psi_3(x)$ را به $\psi_2(x)$ و هنگام عبور از ناحیه‌ی (۱) به ناحیه‌ی (۲)، $\psi_1(x)$ را به $\psi_2(x)$ مرتبط کنیم. چون تقریب WKB در x_1 و x_2 برقرار نیست، باید به دنبال جواب‌های دقیق معادله‌ی شرودینگر در نزدیکی x_1 و x_2 بگردیم.

۱-۲-۴-۹ ارتباط $\psi_{\text{WKB}}(x)$ با $\psi_{\text{WKB}}(x)$

می‌توان تقریب WKB برای تابع موج ناحیه‌ی (۲) را از (۹-۱۸۲) نتیجه گرفت:

$$\psi_{\text{WKB}}(x) = \frac{C_2'}{\sqrt{p(x)}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx'\right] + \frac{C_2''}{\sqrt{p(x)}} \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx'\right] \quad x_1 < x < x_2 \quad (۹-۱۸۴)$$

که می‌توان آن را به صورت زیر نوشت:

$$\psi_{\text{WKB}}(x) = \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \alpha\right) \quad x_2 < x < x_1 \quad (۹-۱۸۵)$$

که در آن α فازی است که باید تعیین شود. چون تقریب WKB در نزدیکی نقطه‌ی بازگشت x_2 (یعنی در هر دو طرف $x = x_2$) برقرار نیست، باید طرحی را برای تعیین تابع موج در نزدیکی x_2 بیابیم.

برای این کار، بیایید به دنبال جواب دقیق معادله‌ی شرودینگر در نزدیکی $x = x_2$ بگردیم. همانطور که در بالا اشاره شد، اگر $|x - x_2|$ به اندازه‌ی کافی کوچک باشد آنگاه در داخل ناحیه‌ی $|x - x_2|$ به صورت تقریبی می‌توانیم پتانسیل را با یک خط راست که شیب آن برابر با شیب پتانسیل در نقطه‌ی بازگشت کلاسیکی $x = x_2$ است، نمایش دهیم. یعنی با بسط $V(x)$ تا مرتبه‌ی اول حول $x = x_2$ ، رابطه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$V(x) \simeq V(x_2) + (x - x_2) \left. \frac{dV(x)}{dx} \right|_{x=x_2} = E + (x - x_2) F_0 \quad (۹-۱۸۶)$$

که در آن از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که $V(x_2) = E$ است و F_0 از رابطه‌ی $F_0 = \left. \frac{dV(x)}{dx} \right|_{x=x_2}$ به دست می‌آید. معادله‌ی (۹-۱۸۶) به این معنی است که $V(x)$ با خط راست $(x - x_2) F_0$ تقریب زده می‌شود که در آن F_0 شیب $V(x)$ در $x = x_2$ است. می‌توان معادله‌ی شرودینگر برای پتانسیل (۹-۱۸۶) را به صورت زیر نوشت:

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} - \frac{2mF_0}{\hbar^2} (x - x_2) \psi(x) = 0 \quad (۹-۱۸۷)$$

با استفاده از تغییر متغیر

$$y = \left(\frac{2mF_0}{\hbar^2} \right)^{1/3} (x - x_2) \quad (۹-۱۸۸)$$

می‌توانیم (۹-۱۸۷) را به معادله‌ی زیر تبدیل کنیم:

$$\left(\frac{2mF_0}{\hbar^2}\right)^{2/3} \left[\frac{d^2 \psi(y)}{dy^2} - y\psi(y) \right] = 0 \quad (9-189)$$

یا

$$\frac{d^2 \psi(y)}{dy^2} - y\psi(y) = 0 \quad (9-190)$$

این یک معادله‌ی دیفرانسیل کاملاً مشخص است که جواب‌های آن معمولاً برحسب تابع‌های ایری $\text{Ai}(y)$ بیان می‌شوند^۷:

$$\psi(y) = A' \text{Ai}(y) = \frac{A'}{\pi} \int_0^\infty \cos\left(\frac{z^3}{3} + yz\right) dz \quad (9-191)$$

که در آن A' یک ثابت بهنجارش است.

از ویژگی‌های تابع ایری $\text{Ai}(y) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \cos(z^3/3 + yz) dz$ ، رفتار مجانبی $\text{Ai}(y)$ به‌ازای مقدارهای y بزرگ مثبت و منفی از رابطه‌های زیر به‌دست می‌آید:

$$\text{Ai}(y) \sim \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi}|y|^{1/4}} \sin\left[\frac{2}{3}(-y)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right] & y \ll 0 \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}y^{1/4}} \exp\left[-\frac{2}{3}y^{3/2}\right] & y \gg 0 \end{cases} \quad (9-192)$$

بنابراین عبارت مجانبی (۹-۱۹۱) به‌ازای مقدارهای بزرگ مثبت و منفی y از رابطه‌های زیر به‌دست می‌آید:

$$\psi(y) = \begin{cases} \frac{A'}{\sqrt{\pi}|y|^{1/4}} \sin\left[\frac{2}{3}(-y)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right] & y \ll 0 \\ \frac{A'}{\sqrt{\pi}y^{1/4}} \exp\left[-\frac{2}{3}y^{3/2}\right] & y \gg 0 \end{cases} \quad (9-193)$$

چون $F_0 > 0$ است، معادله‌ی (۹-۱۸۸) بیان می‌کند که حالت‌های $y \ll 0$ و $y \gg 0$ به ترتیب متناظر با $x \ll x_2$ و $x \gg x_2$ هستند.

اکنون در نزدیکی نقطه‌ی بازگشت $x = x_2$ (۹-۱۸۶) نشان می‌دهد که $E - V(x) = -(x - x_2)F_0$ است، از این رو مجذور تکانه‌ی کلاسیکی $p^2(x)$ از رابطه‌ی زیر به‌دست می‌آید:

$$p^2(x) = 2m(E - V(x)) = -2m(x - x_2)F_0 \quad (9-194)$$

که به‌ازای $x > x_2$ منفی و به‌ازای $x < x_2$ مثبت است. با ترکیب معادله‌های (۹-۱۸۸) و (۹-۱۹۴)، رابطه‌ی زیر را به‌دست می‌آوریم:

$$p^2(x) = -(2m\hbar F_0)^{2/3} y \quad (9-195)$$

(۷) جواب معادله‌ی دیفرانسیل $d^2 \phi(y)/dy^2 = y\phi(y)$ از تابع ایری $\phi(y) = \text{Ai}(y) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \cos(z^3/3 + yz) dz$ به دست می‌آید.

اکنون با توجه به این که $dx = (\hbar^2/(2mF_0))^{1/2} dy$ است ((۱۸۸-۹) را ببینید)، از (۱۹۵-۹) برای نتیجه گرفتن عبارت زیر استفاده می‌کنیم:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' &= \frac{1}{\hbar} (2m\hbar F_0)^{1/2} \left(\frac{\hbar^2}{2mF_0} \right)^{1/2} \int_y^0 \sqrt{-y'} dy' \\ &= \int_y^0 \sqrt{-y'} dy' = \frac{2}{3} (-y)^{3/2} \end{aligned} \quad (196-9)$$

با وارد کردن این رابطه در (۱۹۳-۹)، رابطه‌های زیر را به دست می‌آوریم:

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right) & x \ll x_2 \quad (\text{الف}) \\ \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} |p(x')| dx' \right] & x \gg x_2 \quad (\text{ب}) \end{cases} \quad (197-9)$$

که در آن $A = (2m\hbar F_0)^{1/6} A'/\sqrt{\pi}$ است. مقایسه‌ی (۱۹۷-۹) الف) با (۱۸۵-۹) و (۱۹۷-۹) ب) با (۱۸۳-۹) معلوم می‌کند که

$$A = 2C_2, \quad C_2 = A, \quad \alpha = \frac{\pi}{4} \quad (198-9)$$

این عبارت‌ها به عنوان فرمول‌های همبندی شناخته می‌شوند زیرا جواب‌های WKB در هر یک از دو طرف یک نقطه‌ی بازگشت را به هم مربوط می‌کنند. چون $\alpha = \pi/4$ است، $\psi_{2\text{WKB}}(x)$ رابطه‌ی (۱۸۵-۹) به صورت زیر در می‌آید:

$$\psi_{2\text{WKB}}(x) = \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right) \quad (199-9)$$

۲-۲-۴-۹ ارتباط $\psi_{1\text{WKB}}(x)$ با $\psi_{2\text{WKB}}(x)$

تابع موج WKB به ازای $x < x_1$ از (۱۸۱-۹) به دست می‌آید. می‌توان جواب WKB به ازای $x > x_1$ را از (۱۸۲-۹) نتیجه گرفت:

$$\psi_{2\text{WKB}}(x) = \frac{C_2'}{\sqrt{p(x)}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' \right] + \frac{C_2''}{\sqrt{p(x)}} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_1} p(x') dx' \right] \quad x_1 < x < x_2 \quad (200-9)$$

که می‌توان آن را به صورت زیر نوشت:

$$\psi_{2\text{WKB}}(x) = \frac{D}{\sqrt{p}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' + \beta \right) \quad (201-9)$$

به یاد بیاورید که در نزدیکی $x = x_1$ تقریب WKB برقرار نیست.

می‌توان شکل تابع موج در نزدیکی $x = x_1$ را از جواب دقیق معادله‌ی شرودینگر یافت. برای این کار، به صورتی که برای $x = x_2$ انجام دادیم، عمل می‌کنیم. یعنی به دنبال جواب دقیق معادله‌ی شرودینگر به ازای مقدارهای کوچک $|x - x_1|$ می‌گردیم. با بسط $V(x)$ در نزدیکی $x = x_1$ ، معادله‌ی شرودینگری مشابه با (۹-۱۹) را به دست می‌آوریم. جواب‌های این معادله به ازای $x < x_1$ و $x > x_1$ از عبارت‌هایی به دست می‌آیند که به ترتیب مشابه با (۹-۱۹ ب) و (۹-۱۹ الف) هستند:

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{E}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x |p(x')| dx' \right] & x \ll x_1 \quad (\text{الف}) \\ \frac{E}{\sqrt{p(x)}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right) & x \gg x_1 \quad (\text{ب}) \end{cases} \quad (202-9)$$

دوباره، با مقایسه‌ی (۲۰۲-۹ الف) با (۹-۱۸۱) و (۲۰۲-۹ ب) با (۲۰۱-۹)، مجموعه‌ی دیگری از فرمول‌های همبندی را به دست می‌آوریم:

$$E = 2C_1, \quad E = D, \quad \beta = \frac{\pi}{4} \quad (203-9)$$

از این رو $\psi_2(x)$ از رابطه‌ی (۲۰۱-۹) به صورت زیر در می‌آید:

$$\psi_{2\text{WKB}}(x) = \frac{D}{\sqrt{p(x)}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right) \quad (204-9)$$

۹-۲-۳-۴ کوانتس ترازهای انرژی حالت‌های مقید

چون دو جواب (۹-۱۹۹) و (۲۰۴-۹) یک تابع موج را در یک ناحیه نمایش می‌دهند، بنابراین باید با هم برابر باشند:

$$\begin{aligned} \psi_{2\text{WKB}}(x) &= \frac{D}{\sqrt{p(x)}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right) \\ &= \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right) \end{aligned} \quad (205-9)$$

که معادله‌ای به شکل $D \sin \theta_1 = C_2 \sin \theta_2$ است. جواب‌های این معادله باید در دو رابطه‌ی زیر صدق کنند. رابطه‌ی نخست، رابطه‌ی $\theta_1 + \theta_2 = (n+1)\pi$ است یعنی

$$\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right) + \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right) = (n+1)\pi \quad (206-9)$$

یا

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (207-9)$$

و رابطه‌ی دوم، رابطه‌ی زیر است:

$$D = (-1)^n C_2 \quad (208-9)$$

چون انتگرال بین نقطه‌های بازگشت $\int_{x_1}^{x_2} p(x) dx$ برابر با نصف انتگرال روی دوره‌ی کامل حرکت شبه‌کلاسیکی ذره است (یعنی $\oint p(x) dx = \frac{1}{2} \oint p(x) dx$)، می‌توانیم (۹-۲۰۷) را به رابطه‌ی زیر کاهش دهیم:

$$\oint p(x) dx = 2 \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = \left(n + \frac{1}{4} \right) h \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (9-209)$$

این رابطه، ترازهای انرژی (WKB) کوانتیده‌ی E_n حالت‌های مقید یک سیستم نیمه‌کلاسیکی را تعیین می‌کند و مشابه با قاعده‌ی کوانتس بوهر-زومرفیلد است که به نوبه‌ی خود به‌عنوان نسخه‌ی بهبود یافته‌ی قاعده‌ی ویلسون-زومرفیلد $\oint p(x) dx = nh$ شناخته می‌شود زیرا قاعده‌ی ویلسون-زومرفیلد شامل جمله‌ی انرژی نقطه‌ی صفر $h/2$ نیست (در حالت مقادیرهای بزرگ n که در آن تقریب کلاسیکی قابل اعتماد می‌شود، داریم: $n + 1/2 \simeq n$ از این رو (۹-۲۰۹) به $\oint p(x) dx = nh$ کاهش می‌یابد). می‌توانیم این رابطه را به صورتی که در ادامه می‌آید، تفسیر کنیم: چون انتگرال $\oint p(x) dx$ مساحت سطح محصور توسط مسیر بسته‌ی ذره در فضای فاز xp را می‌دهد، شرط (۹-۲۰۹) سازوکاری را برای انتخاب تنها آن دسته از انرژی‌های E_n فراهم می‌کند (از پیوستار مقادیرهای انرژی سیستم نیمه‌کلاسیکی) که به‌ازای آنها مساحت پربندهای $p(x, E_n) = \sqrt{2m(E_n - V(x))}$ برابر با $(n + \frac{1}{4})h$ است.

$$\oint p(x, E_n) dx = 2 \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(E_n - V(x))} dx = \left(n + \frac{1}{4} \right) h \quad (9-210)$$

با $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ بنابراین در فضای فاز xp ، ناحیه‌ی بین دو حالت مقید متوالی برابر با h است: $\oint p(x, E_{n+1}) dx - \oint p(x, E_n) dx = h$ بنابراین هر تک‌حالت متناظر با مساحت h در فضای فاز است. توجه کنید که عدد n حاضر در این رابطه برابر با تعداد حالت‌های مقید یعنی تعداد گره‌های تابع موج $\psi(x)$ است.

به‌صورت خلاصه، برای یک ذره‌ی در حال حرکت در چاه پتانسیلی شبیه به چاه پتانسیل نشان داده شده در شکل ۹-۵، می‌توان انرژی‌های حالت مقید را از قاعده‌ی کوانتس (۹-۲۱۰) به‌دست آورد و تابع موج در ناحیه‌های (۱) و (۳) به ترتیب از (۹-۱۸۱) و (۹-۱۸۳) و در ناحیه‌ی (۲) از (۹-۱۹۹) یا (۹-۲۰۴) به‌دست می‌آید. با ترکیب رابطه‌های همبندی (۹-۱۹۸)، (۹-۲۰۳) و (۹-۲۰۸) با تابع‌های موج (۹-۱۸۱)، (۹-۱۸۳)، (۹-۱۹۹) و (۹-۲۰۴)، تقریب WKB برای تابع موج را به‌دست می‌آوریم:

$$\psi_{\text{WKB}}(x) = \begin{cases} \psi_{\text{WKB}}(x) = \frac{(-1)^n C_T}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} |p(x')| dx' \right] & x < x_1 \\ \psi_{\text{WKB}}(x) = \frac{C_T}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x |p(x')| dx' \right] & x > x_2 \end{cases} \quad (9-211)$$

در ناحیه‌ی $x_1 < x < x_2$ ، $\psi_{\text{WKB}}(x)$ از هر یک از رابطه‌های (۹-۱۹۹) یا (۹-۲۰۴) به دست می‌آید:

$$\psi_{\text{WKB}}(x) = \begin{cases} \frac{\sqrt{(-1)^n C_1}}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) & x_1 < x < x_2 \\ \frac{\sqrt{C_2}}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) & x_1 < x < x_2 \end{cases} \quad (9-212)$$

ضریب C_2 باید از بهنجارش $\psi_{\text{WKB}}(x)$ به دست آید. این رابطه، تابع موج n امین حالت مقید است.

ملاحظات

یک کاربرد مهم روش WKB استفاده از قاعده‌ی کوانتس (۹-۲۱۰) برای محاسبه‌ی ترازهای انرژی پتانسیل‌های مرکزی است. انرژی ذره‌ای به جرم m که در پتانسیل مرکزی $V(r)$ مقید است، از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$E = \frac{p_r^2}{2m} + V_{\text{eff}}(r) = \frac{p_r^2}{2m} + V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} \quad (9-213)$$

ذره مقید است بین نقطه‌های بازگشت r_1 و r_2 که مقدارهای آنها از $E = V_{\text{eff}}(r_1) = V_{\text{eff}}(r_2)$ به دست می‌آید، حرکت کند و می‌توان ترازهای انرژی حالت مقید آن را از رابطه‌ی زیر به دست آورد:

$$\int_{r_1}^{r_2} dr p_r(E, r) = \int_{r_1}^{r_2} dr \sqrt{2m \left(E - V(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} \right)} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi \hbar \quad (9-214)$$

که در آن $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ است.

مثال ۹-۷

از روش WKB برای تخمین ترازهای انرژی یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی استفاده کنید.

حل

انرژی کلاسیکی نوسانگر هماهنگ

$$E(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (9-215)$$

به $p(E, x) = \pm \sqrt{2mE - m^2 \omega^2 x^2}$ می‌انجامد. در نقطه‌های بازگشت x_{\min} و x_{\max} ، انرژی از رابطه‌ی $E = V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$ به دست می‌آید که در آن $x_{\min} = -a$ و $x_{\max} = a$ با $a = \sqrt{2E/(m\omega^2)}$ است. برای به دست آوردن عبارت مربوط به انرژی کوانتیده‌ی نوسانگر هماهنگ باید از قاعده‌ی کوانتس بوهر-زومرفیلد (۹-۲۱۰) استفاده کنیم:

$$\oint p dx = 2 \int_{-a}^a \sqrt{2mE - m^2 \omega^2 x^2} dx = 4m\omega \int_0^a \sqrt{a^2 - x^2} dx \quad (9-216)$$

با استفاده از تغییر متغیر $x = a \sin \theta$ داریم:

$$\int_0^a \sqrt{a^2 - x^2} dx = a^2 \int_0^{\pi/2} \cos^2 \theta d\theta = \frac{a^2}{2} \int_0^{\pi/2} (1 + \cos 2\theta) d\theta = \frac{\pi a^2}{4} = \frac{\pi E}{2m\omega^2} \quad (217-9)$$

از این رو

$$\oint p dx = \frac{2\pi E}{\omega} \quad (218-9)$$

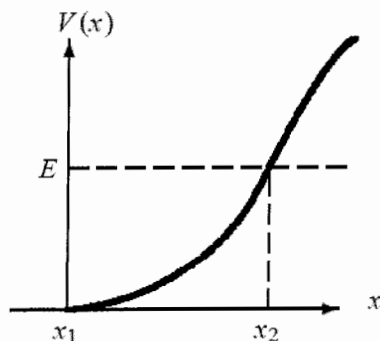
چون $\oint p dq = \left(n + \frac{1}{2}\right) h$ یا $2\pi E/\omega = (n + 1/2)h$ است، رابطه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$E_n^{\text{WKB}} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (219-9)$$

این عبارت با عبارت مربوط به انرژی دقیق نوسانگر هماهنگ، یکسان است.

۳-۴-۹ حالت‌های مقید چاه‌های پتانسیل با یک دیواره‌ی صلب

ذره‌ای را در نظر بگیرید که در یک چاه پتانسیل با دیواره‌ای صلب در $x = x_1$ حرکت می‌کند (شکل ۹-۶). این پتانسیل با رابطه‌ی $V(x) = +\infty$ به ازای $x < x_1$ و یک تابع مشخص $V(x)$ به ازای $x > x_1$ داده می‌شود. ناحیه‌ی مجاز کلاسیکی به وسیله‌ی $x_1 < x < x_2$ مشخص می‌شود که x_1 و x_2 نقطه‌های بازگشت هستند.



شکل ۹-۶ چاه پتانسیل با یک دیواره‌ی صلب واقع در $x = x_1$.

برای به دست آوردن قاعده‌ی کوانتشی که ترازهای انرژی حالت مقید برای این پتانسیل را می‌دهد، به صورتی که در به دست آوردن (۹-۲۱۰) انجام دادیم، عمل می‌کنیم. تابع موج WKB در ناحیه‌ی $x_1 < x < x_2$ به شکل نوسانی است و می‌توان آن را از (۹-۲۰۱) نتیجه گرفت:

$$\psi_{\text{WKB}}(x) = \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int p(x') dx' + \alpha\right) \quad x_1 \leq x \leq x_2 \quad (220-9)$$

که در آن α یک عامل فاز است که باید مشخص شود. برای این کار، باید تابع موج WKB در نزدیکی دو نقطه‌ی بازگشت x_1 و x_2 را بیابیم.

ابتدا این که در نزدیکی x_2 (یعنی به‌ازای $x \leq x_2$) می‌توانیم مقدار α را به صورتی که (۹-۱۹۹) را به‌دست آوریم، تعیین کنیم. یعنی $V(x)$ را حول $(x - x_2)$ بسط دهیم و سپس جواب‌های WKB را در $x = x_2$ با هم مطابقت می‌دهیم که به عامل فاز $\alpha = \pi/4$ می‌انجامد و ازاین‌رو به

$$\psi_{\text{WKB}}(x) = \frac{B}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) \quad x_1 \leq x \leq x_2 \quad (9-221)$$

دوم این که چون باید تابع موج در دیواره‌ی صلب صفر شود ($\psi_{\text{WKB}}(x_1) = 0$)، عامل فاز α نیز باید صفر شود، آنگاه (۹-۲۲۰) نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\psi_{\text{WKB}}(x) = \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx'\right) \quad x_1 \leq x \leq x_2 \quad (9-222)$$

حال با توجه به این که (۹-۲۲۱) و (۹-۲۲۲) تابع موج یکسانی را در یک ناحیه نمایش می‌دهند، مجموع آرگومان‌های آنها باید برابر با $(n+1)\pi$ و $A = (-1)^n B$ باشد (معادله‌ی (۹-۲۰۸) را ببینید):

$$\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx'\right) + \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) = (n+1)\pi \quad (9-223)$$

بنابراین قاعده‌ی کوانتشی که ترازهای انرژی حالت مقید را برای چاه‌های پتانسیل با یک دیواره‌ی صلب می‌دهد، به‌صورت زیر است:

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = \left(n + \frac{3}{4}\right) \pi \hbar \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (9-224)$$

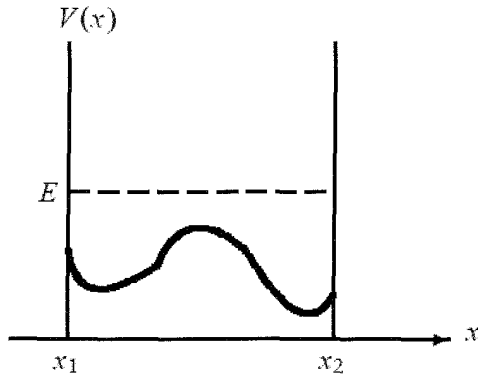
ملاحظات

با توجه به مطالعه‌ای که در بالا انجام شد، می‌توان گفت که به‌صورت کلی، عامل فاز α ی جواب WKB (۹-۲۲۰) برابر است با

- صفر، برای نقطه‌های بازگشت واقع در دیواره‌های صلب.
- $\pi/4$ ، برای نقطه‌های بازگشتی که در دیواره‌های صلب واقع نشده‌اند.

۹-۴-۴ حالت‌های مقید چاه‌های پتانسیل با دو دیواره‌ی صلب

چاه پتانسیلی را در نظر بگیرید که دارای دو دیواره در $x = x_1$ و $x = x_2$ است. یعنی همانطور که در شکل ۹-۷ نشان داده شده است، $V(x)$ به‌ازای $x \leq x_1$ و $x \geq x_2$ نامتناهی و به‌ازای $x_1 < x < x_2$



شکل ۹-۷ چاه پتانسیل با دو دیواره‌ی صلب واقع در x_1 و x_2 .

تابع مشخصی است. تابع موج ذره‌ای که به حرکت بین دو دیواره محدود است، باید در دیواره‌ها صفر شود:
 $\psi(x_1) = \psi(x_2) = 0$

برای به دست آوردن قاعده‌ی کوانتشی که ترازهای انرژی حالت مقید را برای این پتانسیل به دست می‌دهد، به همان صورتی که در به دست آوردن (۹-۲۲۴) انجام شد، عمل می‌کنیم. تابع موج WKB در $x_1 < x < x_2$ دارای شکلی نوسانی است و در x_1 و x_2 صفر می‌شود. عامل فاز در x_1 و x_2 صفر است. در تشابه با روندی که به (۹-۲۲۲) انجامید، می‌توانیم نشان دهیم که تابع موج WKB در مجاورت x_1 (یعنی در ناحیه‌ی $x > x_1$ از رابطه‌ی

$$\psi_{\text{WKB}}(x) = \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx'\right) \quad x_1 < x < x_2 \quad (9-225)$$

و در مجاورت x_2 (یعنی در ناحیه‌ی $x < x_2$ از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\psi_{\text{WKB}}(x) = \frac{B}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx'\right) \quad x_1 < x < x_2 \quad (9-226)$$

توجه کنید که دو معادله‌ی آخر شرایط مرزی صحیحی را در x_1 و x_2 برآورده می‌کنند:

$$\psi_{\text{WKB}}(x_1) = \psi_{\text{WKB}}(x_2) = 0$$

چون معادله‌های (۹-۲۲۵) و (۹-۲۲۶) تابع‌های موج یکسانی را در یک ناحیه نمایش می‌دهند، آنگاه مجموع آرگومان‌ها باید برابر با $(n+1)\pi$ و $A = (-1)^n B$ باشد (معادله‌ی (۹-۲۰۸) را ببینید):

$$\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx'\right) + \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx'\right) = (n+1)\pi \quad (9-227)$$

از این رو قاعده‌ی کوانتشی چاه‌های پتانسیل با دو دیواره‌ی صلب از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x') dx' = (n+1)\pi\hbar \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (228-9)$$

یا

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = n\pi\hbar \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (229-9)$$

تنها تفاوت بین (۲۲۸-۹) و (۲۲۹-۹) در مقدار کمینگی عدد کوانتومی n است: پایین‌ترین مقدار n در (۲۲۸-۹) برابر با $n = 0$ و در (۲۲۹-۹) برابر با $n = 1$ است.

ملاحظات

در این بخش، سه قاعده‌ی کوانتشی (۲۱۰-۹)، (۲۲۴-۹) و (۲۲۹-۹) را به دست آوردیم. این رابطه‌ها به ترتیب نسخه‌ی درستی برای مشخص کردن ترازهای انرژی چاه‌های پتانسیل با صفر، یک و دو دیواره‌ی صلب فراهم می‌کنند. این قاعده‌ها تنها در عددهای $\frac{1}{4}$ ، $\frac{3}{4}$ و 0 تفاوت دارند که به n اضافه می‌شوند. در حالت‌هایی که در آنها n بزرگ است (و متناظر با دامنه‌ی کلاسیکی‌اند)، این سه قاعده‌ی کوانتشی یکسان می‌شوند. تقریب نیمه‌کلاسیکی به‌ازای مقدارهای بزرگ n بسیار دقیق است.

مثال ۹-۸

از تقریب WKB برای محاسبه‌ی ترازهای انرژی یک ذره‌ی بدون اسپین به جرم m که در یک جعبه‌ی یک‌بعدی با دیواره‌هایی در $x = L$ و $x = 0$ حرکت می‌کند، استفاده کنید.

حل

این پتانسیل دارای دو دیواره، یکی در $x = 0$ و دیگری در $x = L$ است. برای یافتن ترازهای انرژی، از قاعده‌ی کوانتشی (۲۲۹-۹) استفاده می‌کنیم. چون تکانه در داخل چاه ثابت است $(p(E, x) = \sqrt{2mE})$ ، به آسانی می‌توانیم عبارت WKB مربوط به انرژی ذره در داخل چاه را نتیجه بگیریم. محاسبه‌ی انتگرال کاملاً ساده است:

$$\int_0^L p dx = \sqrt{2mE} \int_0^L dx = L\sqrt{2mE} \quad (230-9)$$

حال با توجه به این که $\int_0^L p dx = n\pi\hbar$ است، رابطه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$L\sqrt{2mE_n^{\text{WKB}}} = n\pi\hbar \quad (231-9)$$

از این رو

$$E_n^{\text{WKB}} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 \quad (232-9)$$

که مقدار دقیق انرژی یک ذره در یک چاه نامتناهی است.

مثال ۹-۹ (روش WKB برای پتانسیل کولنی)

از تقریب WKB برای محاسبه‌ی ترازهای انرژی حالت‌های s الکترونی که مقید به هسته‌ی Ze است، استفاده کنید.

حل

الکترون در میدان کولنی هسته‌ی Ze حرکت می‌کند: $V(r) = -Ze^2/r$. چون الکترون مقید به هسته است، می‌توان آن را به این صورت که بین دو دیواره‌ی $0 \leq r \leq a$ با $E = V(a)$ و $a = -Ze^2/E$ حرکت می‌کند در نظر گرفت. انرژی الکترون منفی است ($E < 0$).

بنابراین می‌توان ترازهای انرژی حالت‌های s (یعنی $l = 0$) را از (۹-۲۲۹) به دست آورد:

$$\int_0^a \sqrt{2m \left(E + \frac{Ze^2}{r} \right)} dr = n\pi\hbar \quad (9-233)$$

با استفاده از تغییر متغیر $x = a/r$ ، رابطه‌ی زیر را داریم:

$$\begin{aligned} \int_0^a \sqrt{2m \left(E + \frac{Ze^2}{r} \right)} dr &= \sqrt{-2mE} \int_0^a \sqrt{\frac{a}{r} - 1} dr = a\sqrt{-2mE} \int_0^1 \sqrt{\frac{1}{x} - 1} dx \\ &= \frac{\pi}{2} a\sqrt{-2mE} = -\pi Ze^2 \sqrt{-\frac{m}{2E}} \end{aligned} \quad (9-234)$$

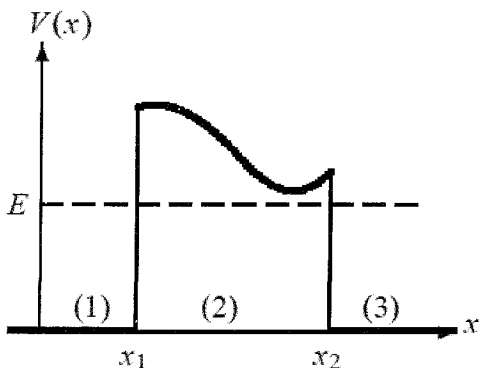
در به دست آوردن این رابطه از انتگرال $\int_0^1 \sqrt{1/x - 1} dx = \pi/2$ استفاده کرده‌ایم. با به کار بردن قضیه‌ی مانده‌ها، به آسانی می‌توان این انتگرال را به دست آورد. با ترکیب (۹-۲۳۳) و (۹-۲۳۴) به نتیجه‌ی زیر می‌رسیم:

$$E_n = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{Z^2e^2}{2a_0 n^2} \quad (9-235)$$

که در آن $a_0 = \hbar^2/(me^2)$ شعاع بوهر است. این عبارت، عبارت درست (بوهر) برای ترازهای انرژی است.

۹-۴-۵ تونل زنی از یک سد پتانسیل

حرکت ذره‌ای با تکانه‌ی $p_0 = \sqrt{2mE}$ را در نظر بگیرید که از سمت چپ روی سد پتانسیل $V(x)$ نشان داده شده در شکل ۹-۸ فرود می‌آید و انرژی آن کوچک‌تر از مقدار بیشینه‌ی پتانسیل V_{\max} است. از نظر کلاسیکی، ذره به هیچ صورتی نمی‌تواند به درون سد نفوذ کند از این رو به عقب بازتابیده خواهد شد. از نظر مکانیک کوانتومی، احتمال متناظر با تونل زنی ذره از داخل سد و «ظاهر شدن» در طرف راست سد، صفر نیست. در ادامه می‌خواهیم از تقریب WKB برای تخمین احتمال عبور ذره از سد استفاده کنیم.



شکل ۸-۹ سد پتانسیلی که ناحیه‌ی مجاز کلاسیکی آن با $x < x_1$ و $x > x_2$ و ناحیه‌ی ممنوع آن با $x_1 < x < x_2$ مشخص می‌شود.

در ناحیه‌های (۱) و (۳) شکل ۸-۹، ذره آزاد است:

$$\psi_1(x) = \psi_{\text{فرودی}}(x) + \psi_{\text{بازتابیده}}(x) = Ae^{ip \cdot x/\hbar} + Be^{-ip \cdot x/\hbar} \quad (۲۳۶-۹)$$

$$\psi_3(x) = \psi_{\text{عبوری}}(x) = Ee^{ip \cdot x/\hbar} \quad (۲۳۷-۹)$$

که در آنها A ، B و E به ترتیب دامنه‌ی موج‌های فرودی، بازتابیده و عبوری هستند. در ناحیه‌ی (۳) تنها موج‌های خروجی را داریم.

اما در مورد تابع موج در ناحیه‌ی ممنوع کلاسیکی (۲) چه می‌توان گفت؟ روش WKB پاسخ را فراهم می‌کند. چون انرژی ذره کوچک‌تر از V_{max} است (یعنی $E < V_{\text{max}}$) و هرگاه پتانسیل $V(x)$ تابع آرام-تغییری از x باشد آنگاه تابع موج در ناحیه‌ی (۲) از تقریب WKB به دست می‌آید (۹-۱۷۴) را ببینید:

$$\psi_2(x) = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x |p(x')| dx'\right] + \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x |p(x')| dx'\right] \quad (۲۳۸-۹)$$

که در آن $p(x) = i\sqrt{2m(V(x) - E)}$ است. هنگامی که سد بسیار پهن باشد، جمله‌ی $D/\sqrt{|p(x)|} \exp[1/\hbar \int_{x_1}^x |p(x')| dx']$ به صورت نمایی افزایش می‌یابد و بنابراین غیرفیزیکی است. حالتی را در نظر خواهیم گرفت که سد به اندازه‌ی کافی پهن باشد به طوری که تقریب $D \simeq 0$ معتبر باشد، از این رو $\psi_2(x)$ به صورت زیر در می‌آید:

$$\psi_2(x) = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x |p(x')| dx'\right] \quad (۲۳۹-۹)$$

احتمال متناظر با عبور ذره از سد، از ضریب عبور به دست می‌آید:

$$T = \frac{v_{\text{عبوری}} |\psi_{\text{عبوری}}(x)|^2}{v_{\text{فرودی}} |\psi_{\text{فرودی}}(x)|^2} = \frac{|E|^2}{|A|^2} \quad (۲۴۰-۹)$$

زیرا $v_{\text{فرودی}} = v_{\text{عبوری}}$ است (سرعت ذره‌های فرودی و عبوری با هم برابرند). در ادامه قصد داریم تا ضریب E را برحسب A محاسبه کنیم. برای این کار، باید از پیوستگی تابع موج و مشتق آن در x_1 و x_2 استفاده کنیم. ابتدا با استفاده از (۲۳۶-۹) و (۲۳۹-۹) رابطه‌های پیوستگی $\psi_1(x_1) = \psi_2(x_1)$ و $\psi'_1(x_1) = \psi'_2(x_1)$ به ترتیب به رابطه‌های زیر می‌انجامد:

$$Ae^{ip_0 x_1/\hbar} + Be^{-ip_0 x_1/\hbar} = \frac{C}{\sqrt{a_1}} \quad (۲۴۱-۹)$$

$$\frac{i}{\hbar} p_0 (Ae^{ip_0 x_1/\hbar} - Be^{-ip_0 x_1/\hbar}) = -\frac{a_1}{\hbar \sqrt{a_1}} C \quad (۲۴۲-۹)$$

که در آنها $a_1 = i\sqrt{2m(V(x_1) - E)}$ است. پیوستگی تابع موج و مشتق آن در x_2 ($\psi_2(x_2) = \psi_3(x_2)$ و $\psi'_2(x_2) = \psi'_3(x_2)$) به رابطه‌های زیر می‌انجامد:

$$\frac{C}{\sqrt{a_2}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} |p(x)| dx\right] = Ee^{ip_0 x_2/\hbar} \quad (۲۴۳-۹)$$

$$-\frac{a_2}{\hbar \sqrt{a_2}} C \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} |p(x)| dx\right] = \frac{ip_0}{\hbar} Ee^{ip_0 x_2/\hbar} \quad (۲۴۴-۹)$$

که در آنها $a_2 = i\sqrt{2m(V(x_2) - E)}$ است.

با جمع (۲۴۱-۹) و (۲۴۲-۹)، رابطه‌ی $C = 2A\sqrt{a_1}e^{ip_0 x_1/\hbar}/(1 - a_1/ip_0)$ را به دست می‌آوریم

که هنگامی که در (۲۴۳-۹) وارد شود، نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\frac{E}{A} = \frac{2}{1 - a_1/ip_0} \sqrt{\frac{a_1}{a_2}} e^{ip_0(x_1 - x_2)/\hbar} \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} |p(x)| dx\right] \quad (۲۴۵-۹)$$

که به نوبه‌ی خود به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\frac{|E|^2}{|A|^2} = \frac{4}{a_2/a_1 + a_1 a_2/p_0^2} \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} |p(x)| dx\right] \quad (۲۴۶-۹)$$

سرانجام جاگذاری این رابطه در (۲۴۰-۹) مقداری تقریبی برای ضریب عبور از سد پتانسیل $V(x)$ را نتیجه می‌دهد:

$$T \sim e^{-2\gamma}, \quad \gamma = \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(V(x) - E)} dx \quad (۲۴۷-۹)$$

پدیده‌ی تونل زنی در مقیاس میکروسکوپی، پدیده‌ای رایج است. این پدیده در داخل هسته‌ها، اتم‌ها و در جامدات روی می‌دهد. به عنوان مثال، در فیزیک هسته‌ای، هسته‌هایی وجود دارند که به یک ذره‌ی α (هسته‌ی هلیوم با $Z = 2$) و یک هسته‌ی دختر واپاشیده می‌شوند. می‌توان این پدیده را به صورت تونل زنی یک ذره‌ی α از سد پتانسیل (کولنی) بین ذره‌ی α و هسته‌ی دختر در نظر گرفت. هنگامی که ذره‌ی α درون هسته تشکیل شد، نمی‌تواند از هسته بگریزد مگر آن که از سد کولنی اطراف خود تونل بزند (نفوذ کند). تونل زنی در فلزات نیز روی می‌دهد. هنگامی که فلز تحت تأثیر یک میدان الکتریکی خارجی قرار می‌گیرد، الکترون‌ها می‌توانند از فلز گسیل شوند. این پدیده به عنوان گسیل سرد نامیده می‌شود که آن را در مثال ۹-۱۰ مطالعه خواهیم کرد.

مثال ۹-۱۰

از تقریب WKB برای تخمین ضریب عبور ذره‌ای به جرم m و انرژی E که در سد پتانسیل زیر حرکت می‌کند، استفاده کنید:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 - \lambda x & x > 0 \end{cases}$$

حل

ضریب عبور از (۹-۲۴۷) به دست می‌آید که در آن $x_1 = 0$ و مقدار x_2 (که می‌توان آن را از رابطه‌ی $E = V_0 - \lambda x_2$ به دست آورد) با $x_2 = (V_0 - E)/\lambda$ داده می‌شود. قرار دادن مقادیرهای x_1 و x_2 در (۹-۲۴۷) و با توجه به این که $V(x) - E = (V_0 - E) - \lambda x$ است، رابطه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} \gamma &= \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(V(x) - E)} dx = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \int_0^{(V_0 - E)/\lambda} \sqrt{V_0 - E - \lambda x} dx \\ &= \frac{2\sqrt{2m}}{3\hbar\lambda} (V_0 - E)^{3/2} \end{aligned} \quad (۹-۲۴۸)$$

بنابراین ضریب عبور از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$T \sim e^{-2\gamma} = \exp \left[-\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar\lambda} (V_0 - E)^{3/2} \right] \quad (۹-۲۴۹)$$

این مسأله برای مطالعه‌ی گسیل سرد الکترون‌ها از فلزات مفید است. در غیاب میدان الکتریکی خارجی، الکترون‌ها توسط پتانسیلی از نوع $V(x) = V_0$ به ازای $x > 0$ مقیدند که به عنوان تابع کار فلز شناخته می‌شود. هنگامی که میدان الکتریکی خارجی \mathcal{E} را برقرار می‌کنیم، پتانسیل مشاهده شده به وسیله‌ی الکترون دیگر V_0 نیست بلکه $V(x) = V_0 - e\mathcal{E}x$ است. این سد پتانسیل پهنایی دارد که الکترون‌ها می‌توانند از آن بگریزند: هر الکترون با انرژی $E \geq e\mathcal{E}x$ می‌تواند فرار کند. کمیت $e\mathcal{E}x_2$ که در آن $x_2 = (V_0 - E)/\lambda$ است، به عنوان تابع کار فلز شناخته می‌شود. پهنای سد پتانسیل فلز با $x_2 < x < 0$ داده می‌شود.

۵-۹ ملاحظات پایانی

در این فصل سه روش تقریب را مطالعه کردیم که در مورد هامیلتونی‌های مانا به کار می‌روند. همانطور که دیدیم، روش‌های تقریب روش‌های کارآمد و کوتاهی برای به دست آوردن ترازهای انرژی ارائه می‌کنند تا گاهی وقت‌ها با نتیجه‌های دقیق یکسان‌اند. به عنوان مثال، در محاسبه‌ی ترازهای انرژی نوسانگر هماهنگ و اتم هیدروژن، در تعدادی از مثال‌های حل شده دیدیم که چگونه روش وردشی و روش WKB بدون بهره‌گیری از حل معادله‌ی شرودینگر، به انرژی‌های درست می‌انجامند. روش‌های تقریبی صرفاً به حل چند انتگرال ساده می‌پردازند. در فصل‌های ۴ و ۷ دیدیم که برای حل معادله‌ی شرودینگر نوسانگر هماهنگ و اتم هیدروژن، شخص باید محاسبات وقت‌گیر و خسته‌کننده‌ای را انجام دهد.

به صورت کلی، روش‌های تقریب نسخه‌های قدرتمند و باصرفه‌ای را برای تعیین نتیجه‌های قابل اعتماد برای سیستم‌هایی که نمی‌توان آنها را به صورت دقیق حل کرد، فراهم می‌کنند. در فصل بعد، قصد داریم تا روش‌های تقریبی که برای فرآیندهای وابسته به زمان مانند گذارهای اتمی، واپاشی‌ها و ... به کار می‌روند را مطالعه کنیم.

۶-۹ مسأله‌های حل شده

موضوع روش‌های تقریب تقریباً به تمام حوزه‌های مکانیک کوانتومی، از مسأله‌های یک‌بعدی گرفته تا مسأله‌های سه‌بعدی و همچنین به جنبه‌های مختلف صورت‌بندی مکانیک کوانتومی ارتباط پیدا می‌کند.

مسأله‌ی ۱-۹

با استفاده از نظریه‌ی اختلال مرتبه‌ی اول، انرژی n امین حالت برانگیخته را برای یک ذره‌ی بدون اسپین با جرم m که در یک چاه پتانسیل نامتناهی به طول $2L$ با دیواره‌هایی در $x = 0$ و $x = 2L$ حرکت می‌کند، محاسبه کنید:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq 2L \\ \infty & \text{در جاهای دیگر} \end{cases}$$

که توسط دو اختلال زیر اصلاح می‌شود:

$$\text{الف) } V_p(x) = \lambda V_0 \sin(\pi x / 2L) \quad \text{ب) } V_p(x) = \lambda V_0 \delta(x - L) \quad \text{که در آنها } \lambda \ll 1 \text{ است.}$$

حل

عبارت‌های دقیق ترازهای انرژی و تابع‌های موج این پتانسیل از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{\lambda m L^2} n^2, \quad \psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{2L}\right) \quad (250-9)$$

مطابق با نظریه‌ی اختلال، انرژی حالت n ام تا مرتبه‌ی نخست از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{\lambda m L^2} n^2 + E_n^{(1)} \quad (251-9)$$

که در آن

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n | V_p(x) | \psi_n \rangle = \frac{1}{L} \int_0^{2L} \sin^2 \left(\frac{n\pi x}{2L} \right) V_p(x) dx \quad (252-9)$$

(الف) با استفاده از رابطه‌ی

$$\int \cos nx \sin mx dx = -\frac{\cos(m-n)x}{2(m-n)} - \frac{\cos(m+n)x}{2(m+n)} \quad m \neq \pm n \quad (253-9)$$

همراه با (۲۵۲-۹)، می‌توانیم $E_n^{(1)}$ را به صورت زیر برای $V_p(x) = \lambda V_0 \sin(\pi x/2L)$ محاسبه کنیم:

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= \frac{\lambda V_0}{L} \int_0^{2L} \sin^2 \left(\frac{n\pi x}{2L} \right) \sin \left(\frac{\pi x}{2L} \right) dx \\ &= \frac{\lambda V_0}{2L} \int_0^{2L} \left[1 - \cos \left(\frac{n\pi x}{L} \right) \right] \sin \left(\frac{\pi x}{2L} \right) dx \\ &= \frac{\lambda V_0}{\pi} \left[-\cos \left(\frac{\pi x}{2L} \right) + \frac{\cos[(1-2n)\pi x/(2L)]}{2(1-2n)} + \frac{\cos[(1+2n)\pi x/(2L)]}{2(1+2n)} \right] \Big|_0^{2L} \\ &= \frac{2\lambda V_0}{\pi} \frac{4n^2}{4n^2 - 1} \quad (254-9) \end{aligned}$$

بنابراین انرژی (۲۵۱-۹) به صورت زیر در می‌آید:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{\lambda m L^2} n^2 + \frac{2\lambda V_0}{\pi} \frac{4n^2}{4n^2 - 1} \quad (255-9)$$

(ب) در حالت $V_p(x) = \lambda V_0 \delta(x-L)$ ، رابطه‌ی (۲۵۲-۹) به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$E_n^{(1)} = \frac{\lambda V_0}{L} \int_0^{2L} \sin^2 \left(\frac{n\pi x}{2L} \right) \delta(x-L) dx = \frac{\lambda V_0}{L} \sin^2 \left(\frac{n\pi}{2} \right) \quad (256-9)$$

ازاین رو بسته به این که عدد کوانتومی n زوج یا فرد باشد، داریم:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{\lambda m L^2} n^2 + \begin{cases} 0 & \text{اگر } n \text{ زوج باشد} \\ \lambda V_0 / L & \text{اگر } n \text{ فرد باشد} \end{cases} \quad (257-9)$$

مسأله‌ی ۲-۹

$$\hat{H} = E_0 \begin{pmatrix} 1+\lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & -2\lambda \\ 0 & 0 & -2\lambda & 7 \end{pmatrix}$$

سیستمی را در نظر بگیرید که هامیلتونی آن از رابطه‌ی

به دست می‌آید که در آن $\lambda \ll 1$ است.

(الف) با تجزیه این هامیلتونی به $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_p$ ، ویژه‌مقدارها و ویژه‌حالت‌های هامیلتونی مختل نشده‌ی \hat{H} را بیابید.

(ب) \hat{H} را برای یافتن ویژه‌مقدارهای دقیق \hat{H} قطری کنید. هر ویژه‌مقدار را تا توان دوم λ بسط دهید.
 (پ) با استفاده از نظریه‌ی اختلال غیرواکن مرتبه‌ی اول و دوم، ویژه‌مقدارهای انرژی تقریبی \hat{H} و ویژه‌حالت‌ها را تا مرتبه‌ی اول بیابید و آنها را با مقدارهای دقیق به‌دست آمده در (ب) مقایسه کنید.

حل

(الف) به صورت زیر می‌توان ماتریس \hat{H} را جدا کرد:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_p = E_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 8 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 7 \end{pmatrix} + E_0 \begin{pmatrix} \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2\lambda \\ 0 & 0 & -2\lambda & 0 \end{pmatrix} \quad (258-9)$$

توجه کنید که \hat{H}_0 از قبل قطری است از این رو ویژه‌مقدارها و ویژه‌حالت‌های آن عبارتند از

$$E_1^{(0)} = E_0, \quad E_2^{(0)} = 8E_0, \quad E_3^{(0)} = 3E_0, \quad E_4^{(0)} = 7E_0. \quad (259-9)$$

$$|\phi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\phi_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\phi_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\phi_4\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (260-9)$$

(ب) قطری کردن \hat{H} به معادله‌ی مشخصه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\begin{vmatrix} (1 + \lambda)E_0 - E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 8E_0 - E & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3E_0 - E & -2\lambda E_0 \\ 0 & 0 & -2\lambda E_0 & 7E_0 - E \end{vmatrix} = 0 \quad (261-9)$$

یا

$$(E_0 + \lambda E_0 - E)(8E_0 - E) \left[(3E_0 - E)(7E_0 - E) - 4\lambda^2 E_0^2 \right] = 0 \quad (262-9)$$

که به نوبه‌ی خود به ویژه‌مقدارهای انرژی دقیق زیر می‌انجامد:

$$E_1 = (1 + \lambda)E_0, \quad E_2 = 8E_0, \quad E_3 = (5 - 2\sqrt{1 + \lambda^2})E_0, \quad E_4 = (5 + 2\sqrt{1 + \lambda^2})E_0. \quad (263-9)$$

چون $\lambda \ll 1$ است، می‌توانیم $\sqrt{1 + \lambda^2}$ را تا مرتبه‌ی دوم λ بسط دهیم: $\sqrt{1 + \lambda^2} \simeq 1 + \lambda^2/2$.
از این رو E_3 و E_4 تا مرتبه‌ی دوم بر حسب λ از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$E_3 \simeq (3 - \lambda^2)E_0, \quad E_4 \simeq (7 + \lambda^2)E_0. \quad (264-9)$$

(پ) از نظریه‌ی اختلال غیرواگن می‌توانیم تصحیح‌های مرتبه‌ی اول انرژی را به صورت زیر بنویسیم:

$$E_1^{(1)} = \langle \phi_1 | \hat{H}_p | \phi_1 \rangle = E_0 \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2\lambda \\ 0 & 0 & -2\lambda & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \lambda E_0. \quad (265-9)$$

به صورت مشابه، می‌توانیم ثابت کنیم که ویژه‌مقدارهای دوم، سوم و چهارم تصحیح مرتبه‌ی اول ندارند:

$$E_2^{(1)} = \langle \phi_2 | \hat{H}_p | \phi_2 \rangle = 0, \quad E_3^{(1)} = \langle \phi_3 | \hat{H}_p | \phi_3 \rangle = 0, \quad E_4^{(1)} = \langle \phi_4 | \hat{H}_p | \phi_4 \rangle = 0. \quad (266-9)$$

حال بیاید تصحیح مرتبه‌ی دوم انرژی را بررسی کنیم. از نظریه‌ی اختلال غیرواگن داریم:

$$E_1^{(2)} = \sum_{m=2,3,4} \frac{|\langle \phi_m | \hat{H}_p | \phi_1 \rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_m^{(0)}} = 0. \quad (267-9)$$

زیرا $\langle \phi_2 | \hat{H}_p | \phi_1 \rangle = \langle \phi_3 | \hat{H}_p | \phi_1 \rangle = \langle \phi_4 | \hat{H}_p | \phi_1 \rangle = 0$. به صورت مشابه، می‌توانیم ثابت کنیم که

$$E_2^{(2)} = \sum_{m=1,3,4} \frac{|\langle \phi_m | \hat{H}_p | \phi_2 \rangle|^2}{E_2^{(0)} - E_m^{(0)}} = 0. \quad (268-9)$$

و

$$E_3^{(2)} = \sum_{m=1,2,4} \frac{|\langle \phi_m | \hat{H}_p | \phi_3 \rangle|^2}{E_3^{(0)} - E_m^{(0)}} = \frac{|\langle \phi_4 | \hat{H}_p | \phi_3 \rangle|^2}{E_3^{(0)} - E_4^{(0)}} = \frac{(-2\lambda E_0)^2}{(3 - 7)E_0} = -\lambda^2 E_0. \quad (269-9)$$

زیرا

$$\langle \phi_4 | \hat{H}_p | \phi_3 \rangle = E_0 \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2\lambda \\ 0 & 0 & -2\lambda & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = -2\lambda E_0.$$

(270-9)

به صورت مشابه، چون

$$\langle \phi_3 | \hat{H}_p | \phi_3 \rangle = E_3 \cdot \begin{pmatrix} \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2\lambda \\ 0 & 0 & -2\lambda & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -2\lambda E_3 \quad (271-9)$$

می‌توانیم تحقیق کنیم که

$$E_\varphi^{(2)} = \sum_{m=1,2,3} \frac{|\langle \phi_m | \hat{H}_p | \phi_\varphi \rangle|^2}{E_\varphi^{(0)} - E_m^{(0)}} = \frac{|\langle \phi_3 | \hat{H}_p | \phi_\varphi \rangle|^2}{E_\varphi^{(0)} - E_3^{(0)}} = \frac{(-2\lambda E_3)^2}{(7-3)E_3} = \lambda^2 E_3 \quad (272-9)$$

حال با ترکیب (۲۶۵-۹) تا (۲۷۲-۹) نتیجه می‌گیریم که مقادیر انرژی تا اختلال غیرواکن مرتبه‌ی دوم از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$E_1 = E_1^{(0)} + E_1^{(1)} + E_1^{(2)} = (1 + \lambda)E_3 \quad (273-9)$$

$$E_2 = E_2^{(0)} + E_2^{(1)} + E_2^{(2)} = 8E_3 \quad (274-9)$$

$$E_3 = E_3^{(0)} + E_3^{(1)} + E_3^{(2)} = (3 - \lambda^2)E_3 \quad (275-9)$$

$$E_4 = E_4^{(0)} + E_4^{(1)} + E_4^{(2)} = (7 + \lambda^2)E_3 \quad (276-9)$$

تمام این مقادیر با عبارت‌های دقیق متناظرشان در (۲۶۳-۹) و (۲۶۴-۹) مشابهند. سرانجام، تصحیح‌های مرتبه‌ی اول ویژه‌حالت‌ها از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m | \hat{H}_p | \phi_n \rangle}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} |\phi_m\rangle \quad (277-9)$$

و از این رو

$$|\psi_3^{(1)}\rangle = \sum_{m=1,2,4} \frac{\langle \phi_m | \hat{H}_p | \phi_3 \rangle}{E_m^{(0)} - E_3^{(0)}} |\phi_m\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (278-9)$$

به صورت مشابه، می‌توانیم نشان دهیم که $|\psi_\varphi^{(1)}\rangle$ نیز با یک ماتریس ستونی صفر داده می‌شود ولی در مورد $|\psi_3^{(1)}\rangle$ و $|\psi_\varphi^{(1)}\rangle$ اینطور نیست:

$$|\psi_\varphi^{(1)}\rangle = \sum_{m=1,2,4} \frac{\langle \phi_m | \hat{H}_p | \phi_\varphi \rangle}{E_m^{(0)} - E_\varphi^{(0)}} |\phi_m\rangle = \frac{\langle \phi_\varphi | \hat{H}_p | \phi_\varphi \rangle}{E_\varphi^{(0)} - E_\varphi^{(0)}} |\phi_\varphi\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -\lambda/2 \end{pmatrix} \quad (279-9)$$

$$|\psi_{\varphi}^{(1)}\rangle = \sum_{m=1,2,3} \frac{\langle \phi_m | \hat{H}_p | \phi_{\varphi} \rangle}{E_m^{(0)} - E_{\varphi}^{(0)}} |\phi_m\rangle = \frac{\langle \phi_3 | \hat{H}_p | \phi_{\varphi} \rangle}{E_3^{(0)} - E_{\varphi}^{(0)}} |\phi_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \lambda/2 \end{pmatrix} \quad (280-9)$$

سرانجام، حالت‌های تا مرتبه‌ی اول از $|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + |\psi_n^{(1)}\rangle$ به دست می‌آیند:

$$|\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\psi_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -\lambda/2 \end{pmatrix}, \quad |\psi_4\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \lambda/2 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (281-9)$$

مسئله‌ی ۳-۹

(الف) انرژی‌های دقیق و تابع‌های موج حالت پایه و نخستین حالت برانگیخته را برای چاه پتانسیل مکعبی نامتناهی زیر بیابید و همچنین واگنی آنها را مشخص کنید:

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 & \text{اگر } 0 < x < L, 0 < y < L, 0 < z < L \\ \infty & \text{در جاهای دیگر} \end{cases}$$

حال اختلال زیر را به چاه مکعبی نامتناهی اضافه کنید:

$$\hat{H}_p = V_0 L^3 \delta\left(x - \frac{L}{4}\right) \delta\left(y - \frac{3L}{4}\right) \delta\left(z - \frac{L}{4}\right)$$

(ب) با استفاده از نظریه‌ی اختلال مرتبه‌ی اول، انرژی حالت پایه را محاسبه کنید.

(پ) با استفاده از نظریه‌ی اختلال (واگن) مرتبه‌ی نخست، انرژی نخستین حالت برانگیخته را محاسبه کنید.

حل

انرژی و تابع موج یک چاه پتانسیل مکعبی نامتناهی به اندازه‌ی L از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$E_{n_x, n_y, n_z}^{\text{دقیق}} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad (282-9)$$

$$\phi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = \sqrt{\frac{\Lambda}{L^3}} \sin\left(\frac{\pi n_x}{L} x\right) \sin\left(\frac{\pi n_y}{L} y\right) \sin\left(\frac{\pi n_z}{L} z\right) \quad (283-9)$$

(الف) حالت پایه واگن نیست و تابع موج و انرژی دقیق آن عبارتند از

$$E_{111}^{\text{دقیق}} = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}, \quad \phi_{111}(x, y, z) = \sqrt{\frac{\Lambda}{L^3}} \sin\left(\frac{\pi}{L} x\right) \sin\left(\frac{\pi}{L} y\right) \sin\left(\frac{\pi}{L} z\right) \quad (284-9)$$

نخستین حالت برانگیخته واگن سه‌گانه است: $\phi_{112}(x, y, z)$, $\phi_{121}(x, y, z)$ و $\phi_{211}(x, y, z)$ متناظر با انرژی یکسان $E_{\sqrt{112}}^{\text{دقیق}} = E_{\sqrt{121}}^{\text{دقیق}} = E_{\sqrt{211}}^{\text{دقیق}} = 3\pi^2 \hbar^2 / (mL^2)$ هستند. (ب) تصحیح مرتبه‌ی اول انرژی حالت پایه از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} E_{\sqrt{}}^{(1)} &= \langle \phi_{111} | \hat{H}_p | \phi_{111} \rangle \\ &= 8V_0 \int_0^L \delta\left(x - \frac{L}{4}\right) \sin^2\left(\frac{\pi}{L}x\right) dx \int_0^L \delta\left(y - \frac{3L}{4}\right) \sin^2\left(\frac{\pi}{L}y\right) dy \\ &\quad \times \int_0^L \delta\left(z - \frac{L}{4}\right) \sin^2\left(\frac{\pi}{L}z\right) dz = 8V_0 \sin^2\left(\frac{\pi}{4}\right) \sin^2\left(\frac{3\pi}{4}\right) \sin^2\left(\frac{\pi}{4}\right) \\ &= V_0. \end{aligned} \tag{۲۸۵-۹}$$

بنابراین انرژی حالت پایه تا اختلال مرتبه‌ی اول از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$E_0 = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} + V_0. \tag{۲۸۶-۹}$$

(پ) برای محاسبه‌ی انرژی نخستین حالت برانگیخته تا مرتبه‌ی اول، باید از نظریه‌ی اختلال واگن استفاده کنیم. مقادیرهای این انرژی برابرند با $3\pi^2 \hbar^2 / (mL^2)$ به اضافه‌ی ویژه‌مقادیرهای ماتریس

$$\begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} & V_{13} \\ V_{21} & V_{22} & V_{23} \\ V_{31} & V_{32} & V_{33} \end{pmatrix} \tag{۲۸۷-۹}$$

با $V_{nm} = \langle n | \hat{H}_p | m \rangle$ که در آن از نمادگذاری‌های زیر استفاده شده است:

$$|1\rangle = \phi_{211}(x, y, z) = \sqrt{\frac{\Lambda}{L^3}} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{\pi}{L}y\right) \sin\left(\frac{\pi}{L}z\right) \tag{۲۸۸-۹}$$

$$|2\rangle = \phi_{121}(x, y, z) = \sqrt{\frac{\Lambda}{L^3}} \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{2\pi}{L}y\right) \sin\left(\frac{\pi}{L}z\right) \tag{۲۸۹-۹}$$

$$|3\rangle = \phi_{112}(x, y, z) = \sqrt{\frac{\Lambda}{L^3}} \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{\pi}{L}y\right) \sin\left(\frac{2\pi}{L}z\right) \tag{۲۹۰-۹}$$

محاسبه‌ی جمله‌ی V_{nm} وقت‌گیر ولی سراسر است. بیایید چگونگی محاسبه‌ی دو جمله را نشان دهیم. ابتدا این که می‌توان V_{11} را به صورت مشابه با (۲۸۵-۹) محاسبه کرد:

$$V_{11} = 8V_0 \int_0^L \delta\left(x - \frac{L}{4}\right) \sin^2\left(\frac{2\pi}{L}x\right) dx \int_0^L \delta\left(y - \frac{3L}{4}\right) \sin^2\left(\frac{\pi}{L}y\right) dy$$

$$\begin{aligned} & \times \int_0^L \delta\left(z - \frac{L}{4}\right) \sin^2\left(\frac{\pi}{L}z\right) dz = 8V_0 \sin^2\left(\frac{\pi}{4}\right) \sin^2\left(\frac{3\pi}{4}\right) \sin^2\left(\frac{\pi}{4}\right) \\ & = 2V_0. \end{aligned} \quad (291-9)$$

V_{12} و V_{13} از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$\begin{aligned} V_{12} &= 8V_0 \int_0^L \delta\left(x - \frac{L}{4}\right) \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) dx \int_0^L \delta\left(y - \frac{3L}{4}\right) \sin\left(\frac{\pi}{L}y\right) \\ & \times \sin\left(\frac{2\pi}{L}y\right) dy \int_0^L \delta\left(z - \frac{L}{4}\right) \sin^2\left(\frac{\pi}{L}z\right) dz = -2V_0. \end{aligned} \quad (292-9)$$

$$\begin{aligned} V_{13} &= 8V_0 \int_0^L \delta\left(x - \frac{L}{4}\right) \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right) \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) dx \int_0^L \delta\left(y - \frac{3L}{4}\right) \sin^2\left(\frac{\pi}{L}y\right) dy \\ & \times \int_0^L \delta\left(z - \frac{L}{4}\right) \sin\left(\frac{\pi}{L}z\right) \sin\left(\frac{2\pi}{L}z\right) dz = 2V_0. \end{aligned} \quad (293-9)$$

با دنباله‌روی از این روش، می‌توانیم جمله‌های باقیمانده را به دست آوریم:

$$V = 2V_0 \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (294-9)$$

قطری کردن این ماتریس، یک ویژه‌مقدار با واگنی دوگانه و یک ویژه‌مقدار غیرواگن را نتیجه می‌دهد:

$$E_1^{(1)} = E_2^{(1)} = 0, \quad E_3^{(1)} = 6V_0. \quad (295-9)$$

که به انرژی‌های نخستین حالت برانگیخته می‌انجامند:

$$E_1 = E_2 = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{mL^2}, \quad E_3 = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{mL^2} + 6V_0. \quad (296-9)$$

بنابراین اختلال تنها بخشی از واگنی نخستین حالت برانگیخته را از بین برده است.

مسئله ۴-۹

اتم هیدروژنی را در نظر بگیرید که تحت تأثیر دو میدان ایستای ضعیف قرار می‌گیرد: یک میدان الکتریکی $\mathcal{E} = \mathcal{E}(\mathbf{i} + \mathbf{j})$ در صفحه‌ی xy و یک میدان مغناطیسی $\mathbf{B} = B\mathbf{k}$ در امتداد محور z که در آنها \mathcal{E} و B ثابت‌اند. با چشم‌پوشی از برهمکنش اسپین-مدار، ترازهای انرژی حالت‌های $n = 2$ را تا اختلال مرتبه‌ی اول محاسبه کنید.

حل

در غياب میدان خارجی و با چشم‌پوشی از برهمکنش‌های اسپین-مدار، انرژی حالت $n = 2$ واگن چهارگانه است: چهار حالت متفاوت $|nlm\rangle = |200\rangle, |211\rangle, |210\rangle, |21-1\rangle$ متناظر با انرژی یکسان $E_2 = -R/4$ هستند که در آن $R = m_e e^4 / (2\hbar^2) = 13.6\text{eV}$ ثابت ریذبرگ است. هنگامی که اتم در میدان الکتريکی خارجی $\mathcal{E} = \mathcal{E}(\mathbf{i} + \mathbf{j})$ قرار می‌گیرد، انرژی برهمکنش بین گشتاور دوقطبی الکترون $(\mathbf{d} = -e\mathbf{r})$ و \mathcal{E} از رابطه $e\mathcal{E}(x+y) = e\mathcal{E}r \sin\theta(\cos\phi + \sin\phi)$ به دست می‌آید. از سوی دیگر، هنگامی که اتم در معرض میدان مغناطیسی خارجی $\mathbf{B} = B\mathbf{k}$ قرار می‌گیرد، تکانه‌ی خطی الکترون به صورت $\mathbf{p} \rightarrow (\mathbf{p} - e\mathbf{A}/c)$ در آن پتانسیل برداری متناظر با \mathbf{B} است. بنابراین هنگامی که یک اتم هیدروژن تحت تأثیر هر دو میدان \mathcal{E} و \mathbf{B} قرار می‌گیرد، هامیلتونی آن از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2\mu} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 - \frac{e^2}{r} + e\mathcal{E}r \sin\theta(\cos\phi + \sin\phi) \\ &= \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r} - \frac{e}{2\mu c} \mathbf{B} \cdot \mathbf{L} + \frac{e}{2\mu c} A^2 + e\mathcal{E}r \sin\theta(\cos\phi + \sin\phi) \end{aligned} \quad (297-9)$$

چون میدان مغناطیسی ضعیف است، می‌توانیم از جمله‌ی $eA^2/(2\mu c)$ چشم‌پوشی کنیم، از این رو می‌توانیم \hat{H} را به صورت $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_p$ بنویسیم که در آن \hat{H}_0 هامیلتونی اتم هیدروژن مختل نشده است و می‌توان \hat{H}_p را به صورت یک اختلال در نظر گرفت:

$$\hat{H}_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r}, \quad \hat{H}_p = -\frac{eB}{2\mu c} \hat{L}_z + e\mathcal{E}r \sin\theta(\cos\phi + \sin\phi) \quad (298-9)$$

برای محاسبه‌ی ترازهای انرژی حالت $n = 2$ ، باید از نظریه‌ی اختلال واگن استفاده کنیم زیرا حالت $n = 2$ واگن چهارگانه است. برای این کار، باید ماتریس زیر را قطری کنیم:

$$\begin{pmatrix} \langle 1|\hat{H}_p|1\rangle & \langle 1|\hat{H}_p|2\rangle & \langle 1|\hat{H}_p|3\rangle & \langle 1|\hat{H}_p|4\rangle \\ \langle 2|\hat{H}_p|1\rangle & \langle 2|\hat{H}_p|2\rangle & \langle 2|\hat{H}_p|3\rangle & \langle 2|\hat{H}_p|4\rangle \\ \langle 3|\hat{H}_p|1\rangle & \langle 3|\hat{H}_p|2\rangle & \langle 3|\hat{H}_p|3\rangle & \langle 3|\hat{H}_p|4\rangle \\ \langle 4|\hat{H}_p|1\rangle & \langle 4|\hat{H}_p|2\rangle & \langle 4|\hat{H}_p|3\rangle & \langle 4|\hat{H}_p|4\rangle \end{pmatrix} \quad (299-9)$$

که در آن $|1\rangle = |200\rangle, |2\rangle = |211\rangle, |3\rangle = |210\rangle, |4\rangle = |21-1\rangle$ است. بنابراین باید جمله‌ی زیر را محاسبه کنیم:

$$\langle 2'l'm'|\hat{H}_p|2lm\rangle = -\frac{eB}{2\mu c} m\hbar\delta_{l',l}\delta_{m',m} + e\mathcal{E}\langle 2'l'm'|r \sin\theta(\cos\phi + \sin\phi)|2lm\rangle \quad (300-9)$$

چون $x = r \sin \theta \cos \phi$ و $y = r \sin \theta \sin \phi$ هر دو فردند، تنها جمله‌هایی که بین $\langle 2l'm' | x | 2lm \rangle$ و $\langle 2l'm' | y | 2lm \rangle$ باقی می‌مانند، عبارتند از $\langle 200 | x | 21 \pm 1 \rangle$ ، $\langle 200 | y | 21 \pm 1 \rangle$ و مزدوج مختلط آنها. یعنی x و y تنها می‌توانند حالت‌های با پاریته‌های متفاوت ($l' - l = \pm 1$) و حالت‌هایی که عددهای کوانتومی سمتی آنها در شرط $m' - m = \pm 1$ صدق می‌کنند، با هم جفت کنند. بنابراین تنها باید جمله‌های زیر را حساب کنیم:

$$\langle 200 | x | 21 \pm 1 \rangle = \int_0^{+\infty} R_{\Psi_0}^*(r) R_{\Psi_1}(r) r^3 dr \int Y_{00}^*(\Omega) \sin \theta \cos \phi Y_{1\pm 1}(\Omega) d\Omega \quad (301-9)$$

$$\langle 200 | y | 21 \pm 1 \rangle = \int_0^{+\infty} R_{\Psi_0}^*(r) R_{\Psi_1}(r) r^3 dr \int Y_{00}^*(\Omega) \sin \theta \sin \phi Y_{1\pm 1}(\Omega) d\Omega \quad (302-9)$$

$$\int_0^{+\infty} R_{\Psi_0}^*(r) R_{\Psi_1}(r) r^3 dr = -3\sqrt{3}a_0 \quad (303-9)$$

که داریم

که a_0 شعاع بوهر است ($a_0 = \hbar^2 / (m_e e^2)$). با استفاده از رابطه‌های

$$\sin \theta \cos \phi = \sqrt{\frac{2\pi}{3}} [Y_{1-1}(\Omega) - Y_{11}(\Omega)], \quad \sin \theta \sin \phi = i\sqrt{\frac{2\pi}{3}} [Y_{1-1}(\Omega) + Y_{11}(\Omega)] \quad (304-9)$$

همراه با

$$\int Y_{l'm'}^*(\Omega) Y_{lm}(\Omega) d\Omega = \delta_{l',l} \delta_{m',m} \quad (305-9)$$

رابطه‌های زیر را به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} \int Y_{00}^*(\Omega) \sin \theta \cos \phi Y_{11}(\Omega) d\Omega &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \int \sin \theta \cos \phi Y_{11}(\Omega) d\Omega \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}} \int Y_{1-1}(\Omega) Y_{11}(\Omega) d\Omega \\ &= -\frac{1}{\sqrt{6}} \end{aligned} \quad (306-9)$$

$$\int Y_{00}^*(\Omega) \sin \theta \sin \phi Y_{11}(\Omega) d\Omega = \frac{i}{\sqrt{6}} \int Y_{1-1}(\Omega) Y_{11}(\Omega) d\Omega = -\frac{i}{\sqrt{6}} \quad (307-9)$$

به صورت مشابه، داریم:

$$\int Y_{00}^*(\Omega) \sin \theta \cos \phi Y_{1-1}(\Omega) d\Omega = \frac{1}{\sqrt{6}} \quad (308-9)$$

$$\int Y_{00}^*(\Omega) \sin \theta \sin \phi Y_{1-1}(\Omega) d\Omega = -\frac{i}{\sqrt{6}} \quad (309-9)$$

حال با جاگذاری (۳۰۳-۹)، (۳۰۶-۹) و (۳۰۸-۹) در (۳۰۱-۹) به نتیجه‌های زیر می‌رسیم:

$$\langle 200 | x | 21 \pm 1 \rangle = \pm \frac{3}{\sqrt{2}} a_0, \quad \langle 200 | y | 21 \pm 1 \rangle = \frac{3i}{\sqrt{2}} a_0. \quad (310-9)$$

از این رو

$$\langle 21 \pm 1 | x | 200 \rangle = \pm \frac{3}{\sqrt{2}} a_0, \quad \langle 21 \pm 1 | y | 200 \rangle = -\frac{3i}{\sqrt{2}} a_0. \quad (311-9)$$

بنابراین ماتریس (۲۹۹-۹) به صورت زیر در می‌آید:

$$\begin{pmatrix} 0 & \alpha + i\alpha & 0 & -\alpha + i\alpha \\ \alpha - i\alpha & -\beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\alpha - i\alpha & 0 & 0 & \beta \end{pmatrix} \quad (312-9)$$

که در آن α و β رابطه‌های $\alpha = 3e\mathcal{E}a_0/\sqrt{2}$ و $\beta = e\hbar B/(2\mu c)$ را نمایش می‌دهند.

قطری کردن (۳۱۲-۹) ویژه‌مقدارهای زیر را نتیجه می‌دهد:

$$\lambda_1 = -\sqrt{\frac{e^2 \hbar^2 B^2}{4\mu^2 c^2} + 18e^2 \mathcal{E}^2 a_0^2}, \quad \lambda_2 = \lambda_3 = 0, \quad \lambda_4 = \sqrt{\frac{e^2 \hbar^2 B^2}{4\mu^2 c^2} + 18e^2 \mathcal{E}^2 a_0^2} \quad (313-9)$$

سرانجام، ترازهای انرژی حالت‌های $n = 2$ تا تقریب مرتبه‌ی اول از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$E_{21}^{(1)} = -\frac{\mathcal{R}}{4} - \sqrt{\frac{e^2 \hbar^2 B^2}{4\mu^2 c^2} + 18e^2 \mathcal{E}^2 a_0^2}, \quad E_{22}^{(1)} = -\frac{\mathcal{R}}{4} \quad (314-9)$$

$$E_{23}^{(1)} = -\frac{\mathcal{R}}{4}, \quad E_{24}^{(1)} = -\frac{\mathcal{R}}{4} + \sqrt{\frac{e^2 \hbar^2 B^2}{4\mu^2 c^2} + 18e^2 \mathcal{E}^2 a_0^2} \quad (315-9)$$

بنابراین میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی خارجی تنها بخشی از واکنشی تراز $n = 2$ را از بین می‌برند.

مسأله‌ی ۵-۹

سیستمی با هامیلتونی مختل نشده‌ی \hat{H}_0 تحت تأثیر اختلال \hat{H}_1 با

$$\hat{H}_0 = E_0 \begin{pmatrix} 15 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}, \quad \hat{H}_1 = \frac{E_0}{100} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

قرار می‌گیرد.

(الف) ویژه‌حالت‌های هامیلتونی مختل نشده‌ی \hat{H}_0 را علاوه بر ویژه‌مقدارهای دقیق هامیلتونی کل $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_p$ بیابید.

(ب) ویژه‌مقدارهای انرژی \hat{H} را تا اختلال مرتبه‌ی اول بیابید و سپس آنها را با مقدارهای دقیق به دست آمده در (الف) مقایسه کنید.

حل

(الف) ابتدا، قطری کردن \hat{H}_0 ویژه‌حالت‌های زیر را نتیجه می‌دهد:

$$|\phi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\phi_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\phi_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\phi_4\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (316-9)$$

مقدار انرژی‌های مختل نشده از مقدار غیرواگن $E_1^{(0)} = 15E_0$ و مقدار با واگنی سه‌گانه‌ی $E_2^{(0)} = E_3^{(0)} = E_4^{(0)} = 3E_0$ به دست می‌آیند.

می‌توان ویژه‌مقدارهای دقیق \hat{H} را از قطری کردن \hat{H} به دست آورد. با بهره‌گیری از نمادگذاری $\lambda = 1/100$ می‌توانیم معادله‌ی مشخصه را به صورت زیر بنویسیم:

$$\begin{vmatrix} 15E_0 - E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3E_0 - E & \lambda E_0 & 0 \\ 0 & \lambda E_0 & 3E_0 - E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3E_0 - E \end{vmatrix} = 0 \quad (317-9)$$

یا

$$(15E_0 - E)(3E_0 - E)[(3E_0 - E)^2 - \lambda^2 E_0^2] = 0 \quad (318-9)$$

که به نوبه‌ی خود به مقدارهای دقیق ویژه‌مقدارهای انرژی می‌انجامد:

$$E_1 = 15E_0, \quad E_2 = 3E_0, \quad E_3 = (3 - \lambda)E_0, \quad E_4 = (3 + \lambda)E_0. \quad (319-9)$$

(ب) برای محاسبه‌ی ویژه‌مقدارهای انرژی \hat{H} تا اختلال مرتبه‌ی اول و با توجه به این که \hat{H}_0 یک ویژه‌مقدار غیرواگن ($15E_0$) و یک ویژه‌مقدار با واگنی سه‌گانه ($3E_0$) دارد، باید از هر دو بحث اختلال غیرواگن و واگن استفاده کنیم. ابتدا روی حالت غیرواگن متمرکز می‌شویم. انرژی این حالت از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned}
 E_1 &= 15E_0 + \langle \phi_1 | \hat{H}_1 | \phi_1 \rangle \\
 &= 15E_0 + \frac{E_0}{100} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda E_0 & 0 \\ 0 & \lambda E_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (320-9) \\
 &= 15E_0.
 \end{aligned}$$

که با ویژه مقدار دقیق (۳۱۹-۹) به دست آمده در (الف) یکسان است. دوم این که برای یافتن حالت‌های واگن، باید ماتریس زیر را قطری کنیم:

$$V = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} & V_{13} \\ V_{21} & V_{22} & V_{23} \\ V_{31} & V_{32} & V_{33} \end{pmatrix} \quad (321-9)$$

که در آن

$$V_{11} = \langle \phi_1 | \hat{H}_p | \phi_1 \rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda E_0 & 0 \\ 0 & \lambda E_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \quad (322-9)$$

$$V_{12} = \langle \phi_2 | \hat{H}_p | \phi_2 \rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda E_0 & 0 \\ 0 & \lambda E_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \lambda E_0. \quad (323-9)$$

$$V_{13} = \langle \phi_3 | \hat{H}_p | \phi_3 \rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda E_0 & 0 \\ 0 & \lambda E_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \quad (324-9)$$

است. به صورت مشابه، می‌توانیم نشان دهیم که

$$V_{21} = \langle \phi_2 | \hat{H}_p | \phi_2 \rangle = \lambda E_0, \quad V_{22} = \langle \phi_2 | \hat{H}_p | \phi_2 \rangle = 0, \quad V_{23} = \langle \phi_3 | \hat{H}_p | \phi_2 \rangle = 0 \quad (325-9)$$

$$V_{31} = \langle \phi_3 | \hat{H}_p | \phi_2 \rangle = 0, \quad V_{32} = \langle \phi_2 | \hat{H}_p | \phi_3 \rangle = 0, \quad V_{33} = \langle \phi_3 | \hat{H}_p | \phi_3 \rangle = 0 \quad (326-9)$$

بنابراین قطری کردن

$$V = \begin{pmatrix} \circ & \lambda E_0 & \circ \\ \lambda E_0 & \circ & \circ \\ \circ & \circ & \circ \end{pmatrix} \quad (۳۲۷-۹)$$

به تصحیح‌های $E_{\psi}^{(1)} = \circ$ ، $E_{\psi}^{(1)} = \lambda E_0$ و $E_{\psi}^{(1)} = -\lambda E_0$ می‌انجامد. بنابراین ویژه‌مقدارهای انرژی تا اختلال مرتبه‌ی اول برابرند با

$$E_{\psi} = E_{\psi}^{(0)} + E_{\psi}^{(1)} = 3E_0, \quad E_{\psi} = E_{\psi}^{(0)} + E_{\psi}^{(1)} = (3 - \lambda)E_0. \quad (۳۲۸-۹)$$

$$E_{\psi} = E_{\psi}^{(0)} + E_{\psi}^{(1)} = (3 + \lambda)E_0. \quad (۳۲۹-۹)$$

درواقع این مقادارها با ویژه‌مقدارهای دقیق (۳۱۹-۹) به‌دست آمده در (الف) یکسان‌اند.

مسأله‌ی ۹-۶

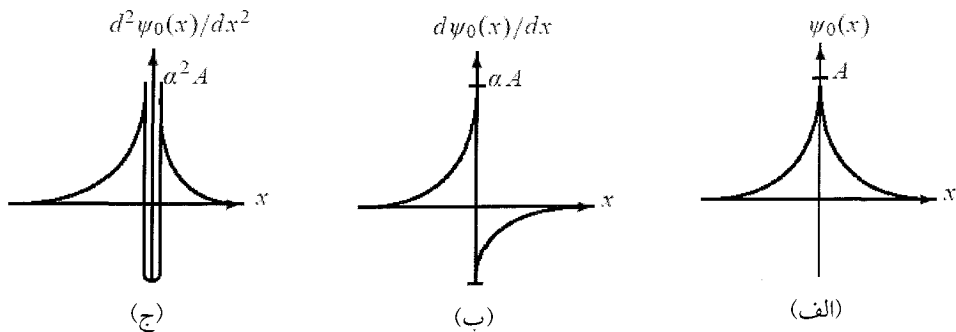
با استفاده از دو تابع آزمون زیر، از روش وردشی برای تخمین انرژی حالت پایه‌ی یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی استفاده کنید:

$$\psi_0(x, \alpha) = A/(x^2 + \alpha) \quad (\text{ب}) \quad \psi_0(x, \alpha) = Ae^{-\alpha|x|} \quad (\text{الف})$$

که در آنها α یک عدد حقیقی مثبت و A ثابت بهنجارش است.

حل

(الف) این تابع موج که در شکل ۹-۹ الف نشان داده شده است، کاملاً متفاوت از شکل گاوسی است و تیزه‌ای در $x = 0$ دارد ازاین‌رو مشتق اول آن در $x = 0$ ناپیوسته است.



شکل ۹-۹ الف) $\psi_0(x) = Ae^{-\alpha|x|}$ ، ب) $d\psi_0(x)/dx$ و ج) $d^2\psi_0(x)/dx^2$

می‌توان ثابت بهنجارش A را یک‌باره به دست آورد:

$$\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{2\alpha x} dx + A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x} dx = 2A^2 \int_0^{\infty} e^{-2\alpha x} dx = \frac{A^2}{\alpha} \quad (۳۳۰-۹)$$

از این رو $A = \sqrt{\alpha}$ است. برای یافتن $E_0(\alpha)$ باید جمله‌های مربوط به انرژی پتانسیل و جنبشی را محاسبه کنیم. با استفاده از انتگرال $\int_0^{+\infty} x^n e^{-ax} dx = n!/a^{n+1}$ به آسانی می‌توانیم جمله‌ی مربوط به انرژی پتانسیل را محاسبه کنیم:

$$\langle \psi_0 | V(x) | \psi_0 \rangle = \frac{1}{2} m \omega^2 A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-2\alpha|x|} dx = m \omega^2 A^2 \int_0^{+\infty} x^2 e^{-2\alpha x} dx = \frac{m \omega^2}{4\alpha^2} \quad (۳۳۱-۹)$$

اما محاسبه‌ی جمله‌ی مربوط به انرژی جنبشی $\langle \psi_0 | d^2/dx^2 | \psi_0 \rangle$ ($\hbar^2/2m$) کاملاً دشوار است. چون مشتق اول $\psi_0(x)$ در $x = 0$ ناپیوسته است، محاسبه‌ی سراسر است و ناآگاهانه‌ی $\langle \psi_0 | d^2/dx^2 | \psi_0 \rangle$ از (۹-۱۲۳) استفاده می‌شود، به یک انرژی جنبشی منفی می‌انجامد:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \left\langle \psi_0 \left| \frac{d^2}{dx^2} \right| \psi_0 \right\rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha|x|} \frac{d^2 e^{-\alpha|x|}}{dx^2} dx \\ &= -\frac{\hbar^2}{m} A^2 \int_0^{+\infty} e^{-\alpha x} \frac{d^2 e^{-\alpha x}}{dx^2} dx \quad (۳۳۲-۹) \\ &= -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{m} A^2 \int_0^{+\infty} e^{-2\alpha x} dx = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \end{aligned}$$

بنابراین هنگامی که مشتق اول تابع موج ناپیوسته است، شیوه‌ی درست برای محاسبه‌ی جمله‌ی مربوط به انرژی جنبشی، استفاده از (۹-۱۲۴) است:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \left\langle \psi_0 \left| \frac{d^2}{dx^2} \right| \psi_0 \right\rangle &= \frac{\hbar^2}{2m} A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{de^{-\alpha|x|}}{dx} \right|^2 dx = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\alpha|x|} dx \\ &= \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \quad (۳۳۳-۹) \end{aligned}$$

زیرا $A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\alpha|x|} dx = 1$ است.

اما چرا عبارت‌های (۳۳۲-۹) و (۳۳۳-۹) نتیجه‌های متفاوتی را می‌دهند؟ این بدان دلیل است که عبارت درست $d^2 e^{-\alpha|x|}/dx^2$ باید شامل تابع دلتا باشد (شکل‌های ۹-۹ الف و ۹-۹ ب). یعنی شکل درست $d\psi(x)/dx$ از رابطه‌ی

$$\frac{d\psi_0(x)}{dx} = A \frac{de^{-\alpha|x|}}{dx} = -\alpha\psi_0(x) \frac{d|x|}{dx} = -\alpha\psi_0(x) \begin{cases} -1 & x < 0 \\ 1 & x > 0 \end{cases} \quad (۳۳۴-۹)$$

$$\frac{d\psi_0(x)}{dx} = -\alpha[\Theta(x) - \Theta(-x)]\psi_0(x) \quad (۳۳۵-۹)$$

به دست می‌آید که در آن $\Theta(x)$ تابع هوی‌ساید است:

$$\Theta(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ 1 & x > 0 \end{cases} \quad (۳۳۶-۹)$$

بنابراین مشتق دوم $\psi_0(x)$ شامل تابع دلتا است:

$$\frac{d^2\psi_0(x)}{dx^2} = \frac{d}{dx} \{-\alpha[\Theta(x) - \Theta(-x)]\psi_0(x)\} \quad (۳۳۷-۹)$$

و با توجه به این که

$$\frac{d\Theta(x)}{dx} = \delta(x), \quad [\Theta(x) - \Theta(-x)]^2 = 1 \quad (۳۳۸-۹)$$

و $\delta(x) = \delta(-x)$ داریم:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi_0(x)}{dx^2} &= \alpha^2[\Theta(x) - \Theta(-x)]^2\psi_0(x) - \alpha[\delta(x) + \delta(-x)]\psi_0(x) \\ &= \alpha^2\psi_0(x) - 2\alpha\psi_0(x)\delta(x) \end{aligned} \quad (۳۳۹-۹)$$

بنابراین جاگذاری (۳۳۹-۹) در (۳۳۲-۹) به همان عبارت (درست) (۳۳۳-۹) می‌انجامد:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \left\langle \psi_0 \left| \frac{d^2}{dx^2} \right| \psi_0 \right\rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^*(x) \frac{d^2\psi_0(x)}{dx^2} dx \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^*(x) [\alpha^2\psi_0(x) - 2\alpha\psi_0(x)\delta(x)] dx \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \alpha^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \alpha |\psi_0(0)|^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \alpha^2 + \frac{\hbar^2}{m} \alpha^2 \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \alpha^2 \end{aligned} \quad (۳۴۰-۹)$$

حال، با جمع (۳۳۱-۹) و (۳۴۰-۹)، رابطه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$E_0(\alpha) = \frac{\hbar^2}{2m} \alpha^2 + \frac{m\omega^2}{4\alpha^2} \quad (۳۴۱-۹)$$

کمینه کردن $E_0(\alpha)$:

$$0 = \frac{\partial E_0(\alpha)}{\partial \alpha} = \frac{\hbar^2}{m} \alpha_0 - \frac{m\omega^2}{2\alpha_0^3} \quad (۳۴۲-۹)$$

به رابطه‌ی $\alpha_0 = m\omega/(\sqrt{2}\hbar)$ می‌انجامد که هنگامی که در (۳۴۱-۹) وارد شود، به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$E_0(\alpha_0) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{m\omega}{\sqrt{2}\hbar} + \frac{m\omega^2}{4} \frac{\sqrt{2}\hbar}{m\omega} = \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} = 0,707\hbar\omega \quad (343-9)$$

انتظار این نتیجه‌ی غیردقیق می‌رفت که به دلیل وجود تیزه در $x = 0$ است.

(ب) می‌توانیم نشان دهیم که ثابت بهنجارش A از رابطه‌ی $A = (\frac{2}{\pi}\alpha^3)^{1/4}$ به دست می‌آید. برخلاف $Ae^{-\alpha|x}$ ، مشتق اول تابع آزمون $A/(\alpha + x^2)$ پیوسته است، از این رو می‌توانیم از (۱۲۳-۹) برای محاسبه‌ی جمله‌ی مربوط به انرژی جنبشی استفاده کنیم. انرژی حالت پایه از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} E_0(\alpha) &= \langle \psi_0(\alpha) | \hat{H} | \psi_0(\alpha) \rangle \\ &= A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{x^2 + \alpha} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right) \frac{1}{x^2 + \alpha} dx \\ &= -\frac{A^2 \hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{6x^2 - 2\alpha}{(x^2 + \alpha)^3} dx + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x^2}{(x^2 + \alpha)^2} dx \\ &= \frac{\hbar^2}{4m\alpha} + \frac{1}{2} m\omega^2 \alpha \end{aligned} \quad (344-9)$$

کمینه کردن $E_0(\alpha)$ نسبت به α (یعنی $\partial E_0(\alpha)/\partial \alpha = 0$) رابطه‌ی $\alpha_0 = \hbar/(\sqrt{2}m\omega)$ را نتیجه می‌دهد که زمانی که در (۳۴۴-۹) وارد شود، به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$E_0(\alpha_0) = \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} \quad (345-9)$$

این انرژی (که با ضریب $\sqrt{2}$ بزرگ‌تر از مقدار دقیق $\hbar\omega/2$ است) مشابه با انرژی قسمت (الف) است که تطابق کامل با هم دارند. وجود این خطا ناشی از این واقعیت است که تابع آزمون $A/(x^2 + \alpha)$ تقریب خوبی برای تابع موج دقیق که شکل گاوسی دارد، نیست.

مسأله‌ی ۷-۹

برای ذره‌ای به جرم m که در یک جعبه‌ی یک‌بعدی با دیواره‌هایی در $x = 0$ و $x = L$ حرکت می‌کند، از روش وردشی برای تخمین (الف) انرژی حالت پایه‌ی ذره (ب) انرژی نخستین حالت برانگیخته‌ی آن استفاده کنید.

حل

جواب‌های دقیق این مسأله معلوم‌اند: $E_n^{\text{دقیق}} = \pi^2 \hbar^2 n^2 / (2mL^2)$.

(الف) تابع آزمون حالت پایه باید در دیواره‌ها صفر شود، گرهی نداشته باشد و نسبت به $x = L/2$ متقارن (یعنی زوج) باشد. این سه لازمه می‌توانند به وسیله‌ی تابع آزمون سهموی زیر برآورده شوند:

$$\psi_0(x) = x(L-x) \quad (۳۴۶-۹)$$

در اینجا به پارامتر مقیاس نیازی نیست. چون هیچ پارامتری در نظر گرفته نشده است، می‌توانیم به صورت مستقیم انرژی را محاسبه کنیم (وردشی لازم نیست): $E_0 = \langle \psi_0 | \hat{H} | \psi_0 \rangle / \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle$ که در آن

$$\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = \int_0^L \psi_0^2(x) dx = \int_0^L x^2(L^2 - 2Lx + x^2) dx = \frac{1}{3} L^3 \quad (۳۴۷-۹)$$

و

$$\langle \psi_0 | \hat{H} | \psi_0 \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^L \left(\frac{d\psi_0(x)}{dx} \right)^2 dx = \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^L (L^2 - 4Lx + 4x^2) dx = \frac{\hbar^2 L^3}{6m} \quad (۳۴۸-۹)$$

بنابراین انرژی حالت پایه از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$E_0^{VM} = \frac{\langle \psi_0 | \hat{H} | \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle} = 1.0 \frac{\hbar^2}{2mL^2} \quad (۳۴۹-۹)$$

این نتیجه، یک نتیجه‌ی بسیار دقیق است زیرا تنها به اندازه‌ی ۱٪ بزرگ‌تر از نتیجه‌ی دقیق است:

$$E_0^{VM} = \frac{1.0}{\pi^2} E_{\text{دقیق}} \quad (۳۵۰-۹)$$

(ب) ویژگی‌های تابع موج دقیق نخستین حالت برانگیخته معلوم‌اند: یک گره در $x = L/2$ دارد و باید نسبت به $x = L/2$ فرد باشد. ویژگی آخر، آن را نسبت به حالت پایه که حول $L/2$ زوج است، متعامد می‌سازد. بیا باید تا یک تابع چندجمله‌ای را امتحان کنیم. چون تابع موج در L ، $L/2$ ، 0 صفر می‌شود، تابع آزمون باید حداقل درجه‌ی سه باشد. تابع چندجمله‌ای زیر تمام این شرط‌ها را برآورده می‌کند:

$$\psi_1(x) = x \left(x - \frac{L}{2} \right) (x - L) \quad (۳۵۱-۹)$$

دوباره، نیازی به پارامتر مقیاس نیست.

برای محاسبه‌ی E_1^{VM} باید عبارت‌های زیر را بیابیم:

$$\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle = \int_0^L \psi_1^2(x) dx = \int_0^L x^2 \left(x - \frac{L}{2} \right)^2 (x - L)^2 dx = \frac{1}{84} L^5 \quad (۳۵۲-۹)$$

$$\begin{aligned} \langle \psi_1 | \hat{H} | \psi_1 \rangle &= \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^L \left(\frac{d\psi_1(x)}{dx} \right)^2 dx = \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^L \left(3x^2 - 3Lx + \frac{L^2}{2} \right)^2 dx \\ &= \frac{\hbar^2 L^5}{40m} \end{aligned} \quad (353-9)$$

با تقسیم دو عبارت بالا، انرژی نخستین حالت برانگیخته را به دست می‌آوریم:

$$E_1^{VM} = \frac{\langle \psi_1 | \hat{H} | \psi_1 \rangle}{\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle} = 42 \frac{\hbar^2}{2mL^2} \quad (354-9)$$

که نتیجه‌ی بسیار دقیقی است. چون $E_1^{VM} = (2\pi)^2 \hbar^2 / (2mL^2)$ دقیق است، می‌توانیم E_1^{VM} را به صورت $E_1^{VM} = 42 E_1^{دقیق} / (2\pi)^2$ بنویسیم از این رو E_1^{VM} به اندازه‌ی ۶٪ بزرگ‌تر از $E_1^{دقیق}$ است.

مسأله‌ی ۸-۹

یک چاه پتانسیل نامتناهی یک بعدی به طول L با دیواره‌هایی در $x = 0$ و $x = L$ را در نظر بگیرید که به وسیله‌ی اختلال $V_p(x)$ اصلاح می‌شود:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < L \\ \infty & \text{در جاهای دیگر} \end{cases}, \quad V_p(x) = \begin{cases} V_0 & 0 \leq x \leq L/2 \\ 0 & \text{در جاهای دیگر} \end{cases}$$

که در آن $V_0 \ll 1$ است.

(الف) با استفاده از اختلال مرتبه‌ی اول، انرژی E_n را محاسبه کنید.

(ب) انرژی E_n را در تقریب WKB محاسبه کنید. این انرژی را با عبارت به دست آمده در (الف) مقایسه کنید.

حل

انرژی دقیق $E_n^{دقیق}$ و تابع موج $\phi_n(x)$ یک چاه پتانسیل از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$E_n^{دقیق} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2, \quad \phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

(الف) چون تصحیح مرتبه‌ی اول انرژی ناشی از اختلال $V_p(x)$ از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= \langle \phi_n | V_p | \phi_n \rangle = \frac{2}{L} V_0 \int_0^{L/2} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx \\ &= \frac{1}{L} V_0 \int_0^{L/2} \left[1 - \cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) \right] dx = \frac{V_0}{2} \end{aligned} \quad (355-9)$$

از این روش تا اختلال مرتبه‌ی اول از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$E_n^{\text{PT}} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 + \frac{V_0}{2} \quad (356-9)$$

(ب) چون این پتانسیل دارای دو دیواره‌ی صلب است، انرژی در چارچوب تقریب WKB باید از شرط کوانتس $\int_0^L p(E_n, x) dx = n\pi\hbar$ به دست آید که در آن

$$\begin{aligned} \int_0^L p(E_n, x) dx &= \sqrt{2m(E_n - V_0)} \int_0^{L/2} dx + \sqrt{2mE_n} \int_{L/2}^L dx \\ &= \frac{L}{2} \sqrt{2m} \left(\sqrt{E_n - V_0} + \sqrt{E_n} \right) \end{aligned} \quad (357-9)$$

از این روش $L\sqrt{2m} \left(\sqrt{E_n - V_0} + \sqrt{E_n} \right) = 2n\pi\hbar$ یا

$$\sqrt{E_n - V_0} + \sqrt{E_n} = \frac{2n\pi\hbar}{L\sqrt{2m}} \quad (358-9)$$

با به توان دو رساندن هر دو طرف این معادله و استفاده از نمادگذاری $\alpha_n = 2n^2\pi^2\hbar^2/(mL^2)$ داریم:

$$2\sqrt{E_n(E_n - V_0)} = \alpha_n - 2E_n + V_0 \quad (359-9)$$

با به توان دو رساندن هر دو طرف این معادله، رابطه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$4E_n^2 - 4E_nV_0 = \alpha_n^2 + 4E_n^2 + V_0^2 - 4\alpha_nE_n + 2\alpha_nV_0 - 4E_nV_0 \quad (360-9)$$

که حل آن برای E_n ، به رابطه‌ی

$$E_n = \frac{\alpha_n}{4} + \frac{V_0}{2} + \frac{V_0^2}{4\alpha_n} \quad (361-9)$$

یا

$$E_n^{\text{WKB}} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 + \frac{V_0}{2} + \frac{mL^2 V_0^2}{8\pi^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad (362-9)$$

می‌انجامد.

هنگامی که $n \gg 1$ است و با توجه به این که V_0 بسیار کوچک است، رابطه‌ی WKB انرژی (۳۶۲-۹) عبارت (۳۵۶-۹) را می‌دهد که از بحث اختلال مرتبه‌ی اول به دست آمده بود:

$$E_n^{\text{WKB}} \simeq E_n^{\text{PT}} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 + \frac{V_0}{2}$$

مسأله‌ی ۹-۹

ذره‌ای به جرم m را در نظر بگیرید که به صورت قائم و کشسان بر روی یک کف بازتابنده‌ی سخت که در

$$\text{آن } V(z) = \begin{cases} mgz & z > 0 \\ +\infty & z \leq 0 \end{cases}$$

و g ثابت گرانش است، وامی جهد.

(الف) از روش وردشی برای تخمین انرژی حالت پایه‌ی این ذره استفاده کنید.

(ب) از روش WKB برای تخمین انرژی حالت پایه‌ی این ذره استفاده کنید.

(پ) نتیجه‌های (الف) و (ب) را با انرژی دقیق حالت پایه مقایسه کنید.

حل

(الف) تابع موج حالت پایه‌ی این ذره گرهی ندارد و باید در $z = 0$ صفر و در $z \rightarrow +\infty$ متناهی باشد.

تابع آزمون زیر، این شرطها را برآورده می‌کند:

$$\psi_0(z, \alpha) = Aze^{-\alpha z} \quad (۳۶۳-۹)$$

که در آن α یک پارامتر و A ثابت بهنجارش است. می‌توانیم نشان دهیم که $A = 2\alpha^{3/2}$ است و از این رو

$$\psi_0(z, \alpha) = 2\sqrt{\alpha^3}ze^{-\alpha z} \quad (۳۶۴-۹)$$

انرژی از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} E_0^{VM}(\alpha) &= 4\alpha^3 \int_0^{+\infty} ze^{-\alpha z} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + mgz \right] ze^{-\alpha z} dz \\ &= 4\alpha^3 \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^{+\infty} (2\alpha z - \alpha^2 z^2) e^{-2\alpha z} dz + 4\alpha^3 mg \int_0^{+\infty} z^2 e^{-2\alpha z} dz \\ &= 2\alpha^3 \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{1}{2\alpha} - \frac{1}{4\alpha} \right) + 4mg\alpha^3 \frac{3}{8\alpha^4} \end{aligned} \quad (۳۶۵-۹)$$

یا

$$E_0^{VM}(\alpha) = \frac{\hbar^2}{2m} \alpha^2 + \frac{3}{2\alpha} mg \quad (۳۶۶-۹)$$

کمینه کردن $E_0(\alpha)$ ، رابطه‌ی $\alpha_0 = (3m^2g/2\hbar^2)^{1/3}$ را نتیجه می‌دهد و از این رو

$$E_0^{VM}(\alpha_0) = \frac{3}{2} \left(\frac{9}{2} \right)^{1/3} \left(\frac{1}{2} mg^2 \hbar^2 \right)^{1/3} \quad (۳۶۷-۹)$$

(ب) چون این پتانسیل در $x = 0$ دارای یک دیواره‌ی صلب است، قاعده‌ی کوانتش درست از (۹-۲۲۴)

به دست می‌آید: $\int_0^{E/mg} pdz = (n + \frac{3}{4})\pi\hbar$. نقطه‌ی بازگشت در $E = mgz$ روی

می‌دهد ازاین‌رو $z = E/mg$ است. حال با توجه به این که $E = p^2/2m + mgz$ است، داریم:

$$p(E, z) = \sqrt{2mE} \sqrt{1 - mgz/E}$$

و بنابراین

$$\int_0^{E/mg} p(E_n, z) dz = \sqrt{2mE} \int_0^{E/mg} \sqrt{1 - \frac{mg}{E} z} dz = \sqrt{2mE} \frac{2E}{3mg} = \sqrt{\frac{8E^3}{9mg^2}} \quad (۳۶۸-۹)$$

وارد کردن این رابطه در شرط کوانتس $\int_0^{E/mg} p dz = (n + \frac{3}{4})\pi\hbar$ رابطه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\sqrt{\frac{8E^3}{9mg^2}} = \left(n + \frac{3}{4}\right) \pi\hbar \quad (۳۶۹-۹)$$

و تقریب WKB برای انرژی را به دست می‌آوریم:

$$E_n^{\text{WKB}} = \left[\frac{9\pi^2}{8} mg^2 \hbar^2 \left(n + \frac{3}{4}\right)^2 \right]^{1/3} \quad (۳۷۰-۹)$$

ازاین‌رو انرژی حالت پایه از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$E_0^{\text{WKB}} = \frac{3}{4} \left(3\pi^2\right)^{1/3} \left(\frac{1}{2} mg^2 \hbar^2\right)^{1/3} \quad (۳۷۱-۹)$$

(پ) به یاد بیاورید که انرژی دقیق حالت پایه (که در مسأله‌ی حل شده‌ی ۴-۱۸ محاسبه شد) برای ذره‌ی m که در پتانسیل $V(z) = mgz$ حرکت می‌کند، از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$E_0^{\text{دقیق}} = 2,۳۳۸ \left(\frac{1}{2} mg^2 \hbar^2\right)^{1/3} \quad (۳۷۲-۹)$$

با ترکیب این رابطه با (۳۶۷-۹) و (۳۷۱-۹) می‌بینیم که روش وردشی انرژی را با خطای ۵/۹٪ بیشتر تخمین می‌زند در حالی که روش WKB آن را با خطای ۰/۸٪ کمتر تخمین می‌زند:

$$E_0^{\text{VM}} = \frac{3}{2} \left(\frac{9}{2}\right)^{1/3} \frac{E_0^{\text{دقیق}}}{2,۳۳۸} \simeq ۱,۰۵۹ E_0^{\text{دقیق}} \quad (۳۷۳-۹)$$

$$E_0^{\text{WKB}} = \frac{3}{4} \left(3\pi^2\right)^{1/3} \frac{E_0^{\text{دقیق}}}{2,۳۳۸} \simeq ۰,۹۹۲ E_0^{\text{دقیق}} \quad (۳۷۴-۹)$$

روش وردشی نتیجه‌ی دقیق قابل قبولی داده است زیرا به خوبی در انتخاب تابع آزمون موفق بوده‌ایم. رابطه با روش WKB باید گفت که این روش نتیجه‌ی بسیار دقیقی داده است زیرا از قاعده‌ی کوانتس درست (۲۲۴-۹) استفاده کرده‌ایم. اگر از قاعده‌ی کوانتس (۲۱۰-۹) که به جای ضریب $\frac{1}{4}$ رابطه‌ی (۲۲۴-۹) شامل ضریب $\frac{1}{2}$ است، استفاده می‌کردیم آنگاه روش WKB نتیجه‌ی بسیار غیردقیقی با خطای ۲۴/۳٪ می‌داد یعنی $E_0^{\text{WKB}} \simeq ۰,۷۵۷ E_0^{\text{دقیق}}$.

مسأله‌ی ۹-۱۰

با چشم‌پوشی از اسپین الکترون و استفاده از نظریه‌ی اختلال مرتبه‌ی اول، انرژی تراز $2p$ ‌ی یک اتم هیدروژن را هنگامی که در میدان ضعیف یک چهارقطبی قرار می‌گیرد و محورهای اصلی آن در امتداد محور xyz هستند، محاسبه کنید: $\hat{H}_p = \sum_{\mu=-2}^2 Q_{\mu} r^2 Y_{2\mu}(\Omega)$ که در آن Q_{μ} ‌ها عدهایی حقیقی با $Q_1 = Q_{-1} = Q_2 = Q_{-2} = Q_0 = 0$ و $Q_{-2} = Q_2$ و $Q_{-1} = Q_1 = 0$ هستند.

حل

در غیاب میدان، ترازهای انرژی حالت‌های $|21m\rangle$ واگن سه‌گانه‌اند: $\langle 21-1|$ ، $\langle 210|$ و $\langle 211|$ و از این رو متناظر با انرژی یکسان $E_2 = -R/4$ هستند که در آن $R = 13.6\text{eV}$ ثابت ریذبرگ است.

هنگامی که میدان چهارقطبی برقرار می‌شود و با توجه به این که Q_{-2} ، Q_0 و Q_2 کوچک‌اند، می‌توانیم برهمکنش چهارقطبی $\hat{H}_p = Q_{-2} r^2 Y_{2-2}(\Omega) + Q_0 r^2 Y_{20}(\Omega) + Q_2 r^2 Y_{22}(\Omega)$ را به صورت یک اختلال در نظر بگیریم. برای محاسبه‌ی شکافتگی p باید از نظریه‌ی اختلال واگن استفاده کنیم که در گام نخست نیازمند محاسبه‌ی ماتریس زیر است:

$$\begin{pmatrix} \langle 21-1|\hat{H}_p|21-1\rangle & \langle 21-1|\hat{H}_p|210\rangle & \langle 21-1|\hat{H}_p|211\rangle \\ \langle 210|\hat{H}_p|21-1\rangle & \langle 210|\hat{H}_p|210\rangle & \langle 210|\hat{H}_p|211\rangle \\ \langle 211|\hat{H}_p|21-1\rangle & \langle 211|\hat{H}_p|210\rangle & \langle 211|\hat{H}_p|211\rangle \end{pmatrix} \quad (375-9)$$

که در آن

$$\langle 21m'|\hat{H}_p|21m\rangle = \langle 2, 1|r^2|2, 1\rangle \langle 1, m'|Q_{-2}Y_{2-2} + Q_0Y_{20} + Q_2Y_{22}|1, m\rangle \quad (376-9)$$

است. به دست آوردن قسمت شعاعی، کار ساده‌ای است (فصل ۶):

$$\langle n, l|r^2|n, l\rangle = \int_0^{+\infty} r^4 |R_{nl}|^2 dr = \frac{1}{4} n^2 \left[5n^2 + 1 - 3l(l+1) \right] a^2 \quad (377-9)$$

از این رو

$$\langle 2, 1|r^2|2, 1\rangle = 30 a^2 \quad (378-9)$$

در رابطه با قسمت زاویه‌ای باید گفت که می‌توان آن را از قضیه‌ی ویگنر-اکارت نتیجه گرفت:

$$\langle l', m'|Y_{2\mu}|1, m\rangle = \langle l, 2; m, \mu|l', m'\rangle \langle l' || Y_2 || 1 \rangle \quad (379-9)$$

عنصر ماتریسی کاهش‌یافته‌ی $\langle l' || Y_2 || 1 \rangle$ در فصل ۷ محاسبه شده است در آنجا داشتیم

$$\langle l' || Y_2 || 1 \rangle = \sqrt{5/4\pi} \sqrt{(2l+1)/(2l'+1)} \langle l, 2; 0, 0 | l', 0 \rangle$$

$$\langle l', m'|Y_{2\mu}|1, m\rangle = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \sqrt{\frac{2l+1}{2l'+1}} \langle l, 2; 0, 0 | l', 0 \rangle \langle l, 2; m, \mu | l', m' \rangle \quad (380-9)$$

با استفاده از ضریب‌های $\langle l, 2; m, 0 | l, m \rangle = [3m^2 - l(l+1)] / \sqrt{l(2l-1)(l+1)(2l+3)}$ و $\langle l, 2; m \mp 2, \pm 2 | l, m \rangle = \sqrt{\frac{2(l \pm m - 1)(l \pm m)(l \mp m + 1)(l \mp m + 2)}{2l(2l-1)(l+1)(2l+3)}}$ عبارت‌های زیر را داریم:

$$\langle 1, -1 | Y_{2-2} | 1, 1 \rangle = \langle 1, 1 | Y_{22} | 1, -1 \rangle = -\sqrt{\frac{3}{10\pi}} \quad (381-9)$$

$$\langle 1, -1 | Y_{20} | 1, -1 \rangle = \langle 1, 1 | Y_{20} | 1, 1 \rangle = -\frac{1}{\sqrt{40\pi}} \quad (382-9)$$

$$\langle 1, 0 | Y_{20} | 1, 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{5\pi}} \quad (383-9)$$

می‌توان این عبارت‌ها را از رابطه‌های زیر نیز به دست آورد:

$$\int Y_{lm}^*(\Omega) Y_{20}(\Omega) Y_{lm}(\Omega) d\Omega = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \frac{l(l+1) - 3m^2}{(2l-1)(2l+3)} \quad (384-9)$$

$$\begin{aligned} \int Y_{lm+2}^*(\Omega) Y_{22}(\Omega) Y_{lm}(\Omega) d\Omega &= \int Y_{lm}^*(\Omega) Y_{2-2}(\Omega) Y_{lm+2}(\Omega) d\Omega \\ &= \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \frac{\sqrt{(l-m-1)(l-m)(l+m+1)(l+m+2)}}{(2l-1)(2l+3)} \quad (385-9) \end{aligned}$$

با ترکیب (۳۷۶-۹) تا (۳۸۳-۹)، می‌توانیم ماتریس (۳۷۵-۹) را به صورت زیر بنویسیم:

$$3^0 a_2^{\dagger} \begin{pmatrix} -\frac{Q_0}{\sqrt{40\pi}} & 0 & -Q_2 \sqrt{\frac{3}{10\pi}} \\ 0 & \frac{Q_0}{\sqrt{5\pi}} & 0 \\ -Q_2 \sqrt{\frac{3}{10\pi}} & 0 & -\frac{Q_0}{\sqrt{40\pi}} \end{pmatrix} \quad (386-9)$$

قطری کردن این ماتریس، به ویژه مقادارهای زیر می‌انجامد:

$$E_1^{(1)} = -3^0 \frac{a_2^{\dagger}}{\sqrt{10\pi}} \left(\frac{Q_0}{\sqrt{2}} + Q_2 \sqrt{3} \right) \quad (387-9)$$

$$E_2^{(1)} = 3^0 \frac{Q_0 a_2^{\dagger}}{\sqrt{5\pi}} \quad (388-9)$$

$$E_3^{(1)} = 3^0 \frac{a_2^{\dagger}}{\sqrt{10\pi}} \left(-\frac{Q_0}{\sqrt{2}} + Q_2 \sqrt{3} \right) \quad (389-9)$$

بنابراین تا اختلال مرتبه‌ی اول، انرژی‌های تراز p از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$E_{21} = -\frac{\mathcal{R}}{4} - 3^0 \frac{a_2^{\dagger}}{\sqrt{10\pi}} \left(\frac{Q_0}{\sqrt{2}} + Q_2 \sqrt{3} \right) \quad (390-9)$$

$$E_{22} = -\frac{\mathcal{R}}{4} + 3 \frac{Q_0 a_0^2}{\sqrt{5}\pi} \quad (391-9)$$

$$E_{23} = -\frac{\mathcal{R}}{4} + 3 \frac{a_0^2}{\sqrt{10}\pi} \left(-\frac{Q_0}{\sqrt{2}} + Q_2 \sqrt{3} \right) \quad (392-9)$$

بنابراین برهمکنش چهارقطبی تمام واگنی‌های تراز P را از بین می‌برد.

مسأله‌ی ۹-۱۱

دو پروتون که روی محور z قرار گرفته‌اند و به فاصله‌ی d از یکدیگر فاصله دارند (یعنی $\mathbf{r} = dk$)، تحت تأثیر یک میدان مغناطیسی در جهت z ، $\mathbf{B} = Bk$ قرار می‌گیرند.

(الف) با چشم‌پوشی از تمام برهمکنش‌های بین دو پروتون، ترازهای انرژی و حالت‌های مانای این سیستم را بیابید.

(ب) با پرداختن به انرژی برهمکنش مغناطیسی دوقطبی-دوقطبی بین پروتون‌ها:

$$\hat{H}_p = \frac{1}{r^3} \left[\mu_1 \cdot \mu_2 - 3 \frac{(\mu_1 \cdot \mathbf{r})(\mu_2 \cdot \mathbf{r})}{r^2} \right]$$

به صورت یک اختلال، انرژی را با استفاده از نظریه‌ی اختلال مرتبه‌ی اول محاسبه کنید.

حل

(الف) چون گشتاور مغناطیسی پروتون‌ها عبارتند از $\mu_1 = 2\mu_0 S_1/\hbar$ و $\mu_2 = 2\mu_0 S_2/\hbar$ که در آنها $\mu_0 = \hbar e/(2M_p c)$ گشتاور مغناطیسی پروتون است، هامیلتونی سیستم متشکل از دو پروتون (با چشم‌پوشی از تمام برهمکنش‌های بین دو پروتون) ناشی از برهمکنش گشتاور مغناطیسی پروتون‌ها با میدان مغناطیسی خارجی است:

$$\hat{H}_0 = -(\mu_1 + \mu_2) \cdot \mathbf{B} = -\frac{2\mu_0}{\hbar} (S_1 + S_2) \cdot \mathbf{B} = -\frac{2\mu_0 B}{\hbar} \hat{S}_z \quad (393-9)$$

همانطور که در فصل ۷ نشان داده شد، ویژه‌حالت‌های سیستمی متشکل از دو ذره با اسپین $\frac{1}{2}$ یک حالت سه‌تایی و یک حالت تک‌تایی هستند. بنابراین ویژه‌حالت‌های مانای \hat{H}_0 از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$|\chi_1\rangle = |1, 1\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (394-9)$$

$$|\chi_2\rangle = |1, -1\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (395-9)$$

$$|\chi_3\rangle = |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right] \quad (396-9)$$

$$|\chi_4\rangle = |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right] \quad (397-9)$$

ویژه‌مقدارهای انرژی $|\chi_1\rangle, |\chi_2\rangle, |\chi_3\rangle$ و $|\chi_4\rangle$ به ترتیب عبارتند از

$$E_1^{(0)} = -2\mu_0 B, \quad E_2^{(0)} = 2\mu_0 B, \quad E_3^{(0)} = E_4^{(0)} = 0 \quad (398-9)$$

بنابراین $|\chi_3\rangle$ و $|\chi_4\rangle$ واگن (دوگانه) اند در حالی که در مورد $|\chi_1\rangle$ و $|\chi_2\rangle$ اینطور نیست.

(ب) برای محاسبه‌ی انرژی تا مرتبه‌ی اول، باید عنصرهای ماتریسی \hat{H}_p را محاسبه کنیم: $\hat{H}_{p,ij} = \langle \chi_i | \hat{H}_p | \chi_j \rangle$ با $i, j = 1, 2, 3, 4$. برای این کار، چون $\mathbf{r} = d\mathbf{k}$ است، داریم: $\mu_1 \cdot \mathbf{r} = 2\mu_0 d\hat{S}_{1z}/\hbar$ و $\mu_2 \cdot \mathbf{r} = 2\mu_0 d\hat{S}_{2z}/\hbar$ می‌توانیم \hat{H}_p را به صورت زیر بنویسیم:

$$\hat{H}_p = \frac{1}{r^3} \left[\mu_1 \cdot \mu_2 - 3 \frac{(\mu_1 \cdot \mathbf{r})(\mu_2 \cdot \mathbf{r})}{r^2} \right] = \frac{4\mu_0^2}{d^3 \hbar^2} \left[\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 - 3 \hat{S}_{1z} \hat{S}_{2z} \right] \quad (399-9)$$

با استفاده از رابطه‌های

$$\begin{aligned} 2\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 |S, S_z\rangle &= \left[(\hat{S}_1 + \hat{S}_2)^2 - \hat{S}_1^2 - \hat{S}_2^2 \right] |S, S_z\rangle \\ &= \hbar^2 [S(S+1) - S_1(S_1+1) - S_2(S_2+1)] |S, S_z\rangle \quad (400-9) \\ &= \hbar^2 \left[S(S+1) - \frac{3}{2} \right] |S, S_z\rangle \end{aligned}$$

$$2\hat{S}_{1z} \hat{S}_{2z} |S, S_z\rangle = \left[\hat{S}_z^2 - \hat{S}_{1z}^2 - \hat{S}_{2z}^2 \right] |S, S_z\rangle = \hbar^2 \left(\hat{S}_z^2 - \frac{1}{2} \right) |S, S_z\rangle \quad (401-9)$$

همراه با (399-9)، می‌توانیم بازنویسی زیر را انجام دهیم:

$$\begin{aligned} \hat{H}_p |S, S_z\rangle &= \frac{4\mu_0^2}{d^3} \left[S(S+1) - \frac{3}{2} - 3 \left(\hat{S}_z^2 - \frac{1}{2} \right) \right] |S, S_z\rangle \\ &= \frac{4\mu_0^2}{d^3} \left[S(S+1) - 3\hat{S}_z^2 \right] |S, S_z\rangle \end{aligned} \quad (402-9)$$

چون مقدارهای S و S_z برای حالت سه‌تایی با $S = 1$ و $S_z = -1, 0, 1$ و برای حالت تک‌تایی با $S = 0$ و $S_z = 0$ داده می‌شوند، عنصرهای ماتریسی \hat{H}_p عبارتند از

$$E_1^{(1)} = \langle \chi_1 | \hat{H}_p | \chi_1 \rangle = -\frac{2\mu_0^2}{d^3} \quad E_2^{(1)} = \langle \chi_2 | \hat{H}_p | \chi_2 \rangle = -\frac{2\mu_0^2}{d^3} \quad (403-9)$$

$$E_3^{(1)} = \langle \chi_3 | \hat{H}_p | \chi_3 \rangle = \frac{4\mu_0^2}{d^3} \quad E_4^{(1)} = \langle \chi_4 | \hat{H}_p | \chi_4 \rangle = 0 \quad (404-9)$$

تمام عنصرهای ماتریسی دیگر \hat{H}_p صفرند: $\langle \chi_i | \hat{H}_p | \chi_j \rangle = 0$ به‌ازای $i \neq j$.

سرانجام، ترازهای انرژی سیستم دو پروتونی را می‌توان بلافاصله از (۹-۳۹۸) همراه با (۹-۳۰۳) و (۹-۴۰۴) به دست آورد:

$$E_1 = E_1^{(0)} + E_1^{(1)} = -2\mu_0 B - \frac{2\mu_0^2}{d^3} \quad (9-405)$$

$$E_2 = E_2^{(0)} + E_2^{(1)} = 2\mu_0 B - \frac{2\mu_0^2}{d^3} \quad (9-406)$$

$$E_3 = E_3^{(0)} + E_3^{(1)} = \frac{2\mu_0^2}{d^3} \quad (9-407)$$

$$E_4 = E_4^{(0)} + E_4^{(1)} = 0 \quad (9-408)$$

بنابراین برهمکنش مغناطیسی دوقطبی-دوقطبی واگنی ترازهای انرژی در سیستم دو پروتونی را از بین برده است.

مسأله‌ی ۹-۱۲

یک ذره با اسپین $\frac{1}{2}$ و جرم m که در چاه پتانسیل نامتناهی و متقارن $V(x)$ به طول $2L$ حرکت می‌کند، در میدان مغناطیسی خارجی ضعیف \mathbf{B} با

$$V(x) = \begin{cases} 0 & -L \leq x \leq L \\ \infty & \text{در جاهای دیگر} \end{cases} \quad \mathbf{B} = \begin{cases} -B\hat{z} & -L \leq x \leq 0 \\ -B\hat{x} & 0 \leq x \leq L \end{cases}$$

قرار داده می‌شود. با استفاده از نظریه‌ی اختلال مرتبه‌ی اول، انرژی n امین حالت برانگیخته‌ی این ذره را محاسبه کنید.

حل

ابتدا بیایید در مورد فیزیک این ذره قبل از قرار دادن آن در یک میدان مغناطیسی بحث کنیم. همانطور که در فصل ۴ دیده شد، انرژی و تابع موج یک ذره‌ی بدون اسپین به جرم m که در یک چاه پتانسیل متقارن به طول $2L$ حرکت می‌کند، عبارت است از

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{\lambda m L^2} n^2, \quad \psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \begin{cases} \cos\left(\frac{n\pi x}{2L}\right) & n = 1, 3, 5, \dots \\ \sin\left(\frac{n\pi x}{2L}\right) & n = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (9-409)$$

هنگامی که اسپین ذره در نظر گرفته شود، تابع موج آن برابر با حاصل ضرب قسمت فضایی و قسمت اسپینی $|\chi_{\pm}\rangle$ است:

$$\psi_n^{\pm}(x) = |\chi_{\pm}\rangle \psi_n(x) = |\chi_{\pm}\rangle \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{L}} \cos\left(\frac{n\pi x}{2L}\right) & n = 1, 3, 5, \dots \\ \frac{1}{\sqrt{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{2L}\right) & n = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (9-410)$$

که در آن $|\chi_{\pm}\rangle$ به ترتیب میدان‌های اسپینور متناظر با حالت‌های اسپین بالا و اسپین پایین را نمایش می‌دهد:

$$|\chi_{+}\rangle = \left| \begin{matrix} 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{matrix} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\chi_{-}\rangle = \left| \begin{matrix} 1 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{matrix} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (۴۱۱-۹)$$

هر تراز انرژی $E_n = \hbar^2 \pi^2 n^2 / (\lambda m L^2)$ این ذره واگن دوگانه است زیرا متناظر با دو حالت متفاوت است.

حال حالتی را در نظر می‌گیریم که در آن ذره در میدان مغناطیسی \mathbf{B} قرار داده می‌شود. برهمکنش بین میدان مغناطیسی خارجی و گشتاور دوقطبی μ ذره از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\hat{H}_p = -\mu \cdot \mathbf{B} = B\mu_0 \begin{cases} \sigma_z & -L \leq x \leq 0 \\ \sigma_x & 0 \leq x \leq L \end{cases} \quad (۴۱۲-۹)$$

که در آن از رابطه‌ی $\mu = \gamma \mu_0 \mathbf{S} / \hbar = \mu_0 \boldsymbol{\sigma}$ استفاده کرده‌ایم. به یاد بیاورید که ماتریس‌های σ_z و σ_x عبارتند از

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (۴۱۳-۹)$$

برای تخمین انرژی این ذره به وسیله‌ی نظریه‌ی اختلال واگن، ابتدا باید ماتریس زیر را محاسبه کنیم:

$$\begin{pmatrix} \langle \psi_n^- | \hat{H}_p | \psi_n^- \rangle & \langle \psi_n^- | \hat{H}_p | \psi_n^+ \rangle \\ \langle \psi_n^+ | \hat{H}_p | \psi_n^- \rangle & \langle \psi_n^+ | \hat{H}_p | \psi_n^+ \rangle \end{pmatrix} \quad (۴۱۴-۹)$$

که در آن

$$\begin{aligned} \langle \psi_n^- | \hat{H}_p | \psi_n^- \rangle &= \int_{-L}^0 |\psi_n(x)|^2 \langle \chi_- | \hat{H}_p | \chi_- \rangle dx + \int_0^L |\psi_n(x)|^2 \langle \chi_- | \hat{H}_p | \chi_- \rangle dx \\ &= \mu_0 B \left[\langle \chi_- | \sigma_z | \chi_- \rangle \int_{-L}^0 |\psi_n(x)|^2 dx + \langle \chi_- | \sigma_x | \chi_- \rangle \int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx \right] \end{aligned} \quad (۴۱۵-۹)$$

با استفاده از $\int_{-L}^0 |\psi_n(x)|^2 dx = \int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx = \frac{1}{2}$ و با توجه به رابطه‌های

$$\begin{aligned} \langle \chi_- | \sigma_z | \chi_- \rangle &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -1 \\ \langle \chi_- | \sigma_x | \chi_- \rangle &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0 \end{aligned} \quad (۴۱۶-۹)$$

داریم:

$$\langle \psi_n^- | \hat{H}_p | \psi_n^- \rangle = -\frac{\mu_0 B}{2} \quad (۴۱۷-۹)$$

با پیروی از این روند، می‌توانیم عنصرهای باقیمانده‌ی (۹-۴۱۴) را به دست آوریم:

$$\frac{\mu_0 B}{2} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (۴۱۸-۹)$$

قطری کردن این ماتریس به معادله‌ی زیر می‌انجامد:

$$\left(-\frac{\mu_0 B}{2} - E^{(1)} \right) \left(\frac{\mu_0 B}{2} - E^{(1)} \right) - \left(\frac{\mu_0 B}{2} \right)^2 = 0 \quad (۴۱۹-۹)$$

بنابراین انرژی m امین حالت برانگیخته تا اختلال واگن مرتبه‌ی اول از رابطه‌ی

زیر به دست می‌آید:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{\lambda m L^2} n^2 \pm \frac{\mu_0 B}{\sqrt{2}} \quad (۴۲۰-۹)$$

میدان مغناطیسی به صورت کامل واگنی طیف انرژی این ذره را از بین برده است.

مسأله‌ی ۹-۱۳

ذره‌ای به جرم m را در نظر بگیرید که در پتانسیل $V(x) = \begin{cases} +\infty & x \leq 0 \\ \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 & x > 0 \end{cases}$ حرکت می‌کند. انرژی

حالت پایه‌ی این ذره را با استفاده از (الف) روش وردشی و (ب) روش WKB به دست آورید.

حل

(الف) همانطور که در مسأله‌ی حل شده‌ی ۹-۴ دیدیم، تابع موج حالت پایه‌ی این پتانسیل باید از تابع‌های موج نوسانگر هماهنگی انتخاب شود که در $x = 0$ صفر می‌شوند. تنها تابع‌های موج فرد در $x = 0$ صفر می‌شوند. بنابراین تابع آزمون‌ی که علاوه بر صفر بودن در $x = 0$ ، هنگامی که $x \rightarrow +\infty$ میل می‌کند، متناهی باشد با رابطه‌ی زیر داده می‌شود:

$$\psi_0(x, \alpha) = x e^{-\alpha x^2} \quad (۴۲۱-۹)$$

با استفاده از نتیجه‌های

$$\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = \int_0^{+\infty} x^2 e^{-2\alpha x^2} dx = \frac{1}{\lambda \alpha} \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \quad (۴۲۲-۹)$$

$$\left\langle \psi_0 \left| \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right| \psi_0 \right\rangle = \frac{1}{2} m \omega^2 \int_0^{+\infty} x^4 e^{-2\alpha x^2} dx = \frac{3 m \omega^2}{64 \alpha^2} \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \quad (۴۲۳-۹)$$

$$\left\langle \psi_0 \left| -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right| \psi_0 \right\rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^{+\infty} (3\alpha x^2 - 2\alpha^2 x^4) e^{-2\alpha x} dx = \frac{3\hbar^2}{16m} \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \quad (424-9)$$

انرژی حالت پایه را به دست می‌آوریم:

$$E_0(\alpha) = \frac{\langle \psi_0(\alpha) | \hat{H} | \psi_0(\alpha) \rangle}{\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle} = \frac{3\hbar^2}{2m} \alpha + \frac{3m\omega^2}{8\alpha} \quad (425-9)$$

مینیمم کردن $E_0(\alpha)$ نسبت به α ، رابطه‌ی $\alpha = m\omega/(2\hbar)$ را نتیجه می‌دهد و از این رو $E_0(\alpha_0) = \frac{3}{4}\hbar\omega$ است. این انرژی با مقدار دقیق به دست آمده در فصل ۴ یکسان است.

(ب) این پتانسیل شامل یک دیواره‌ی صلب در $x = 0$ است. بنابراین قاعده‌ی کوانتس درست برای این پتانسیل از (۲۲۴-۹) به دست می‌آید: $\int_0^a p dx = (n + \frac{3}{4})\pi\hbar$. نقطه‌ی بازگشت در $x = a$ با $E = \frac{1}{2}m\omega^2 a^2$ روی می‌دهد و از این رو $a = \sqrt{2E/(m\omega^2)}$ است. محاسبه‌ی $\int_0^a p dx$ به صورت زیر است:

$$\int_0^a p dx = \int_0^a \sqrt{2mE - m^2\omega^2 x^2} dx = m\omega \int_0^a \sqrt{a^2 - x^2} dx \quad (426-9)$$

تغییر متغیر $x = a \sin \theta$ به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\int_0^a \sqrt{a^2 - x^2} dx = a^2 \int_0^{\pi/2} \cos^2 \theta d\theta = \frac{a^2}{2} \int_0^{\pi/2} (1 + \cos 2\theta) d\theta = \frac{\pi a^2}{4} \quad (427-9)$$

از این رو

$$\int_0^a p dx = m\omega \frac{\pi a^2}{4} = \frac{\pi E}{2\omega} \quad (428-9)$$

چون $\int_0^a p dx = (n + \frac{3}{4})\pi\hbar$ است (یعنی $(\pi E/(2\omega)) = (n + \frac{3}{4})\pi\hbar$)، رابطه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$E_n^{\text{WKB}} = \left(2n + \frac{3}{4}\right) \hbar\omega \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (429-9)$$

این رابطه با عبارت دقیق به دست آمده در فصل ۴ یکسان است. بنابراین انرژی WKB حالت پایه از رابطه‌ی $E_0^{\text{WKB}} = \frac{3}{4}\hbar\omega$ به دست می‌آید.

مسئله‌ی ۹-۱۴

یک مولکول H_2 را در نظر بگیرید که در آن پروتون‌ها به فاصله‌ی زیاد R از یکدیگر قرار دارند و هر دو پروتون روی محور z واقع شده‌اند. با چشم‌پوشی از درجه‌های آزادی اسپین و پرداختن به برهمکنش دو قطبی-دوقطبی به صورت یک اختلال، از نظریه‌ی اختلال برای تخمین حد بالای انرژی حالت پایه‌ی این مولکول استفاده کنید.

حل

با فرض آن که پروتون‌ها در فضا ثابت‌اند و به فاصله‌ی R از یکدیگر قرار دارند، می‌توانیم هامیلتونی این مولکول را به صورت زیر بنویسیم:

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_p = \hat{H}_e^A + \hat{H}_e^B + \hat{H}_p \quad (۴۳۰-۹)$$

که در آن \hat{H}_e^A و \hat{H}_e^B هامیلتونی‌های مختل نشده‌ی اتم‌های A و B هستند و برابر است با

$$\hat{H}_p = \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{|\mathbf{R} + \mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B|} - \frac{e^2}{|\mathbf{R} + \mathbf{r}_A|} - \frac{e^2}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_B|} \quad (۴۳۱-۹)$$

که در آن \mathbf{r}_B و \mathbf{r}_A بردارهای مکان الکترون‌های اتم‌های A و B نسبت به پروتون‌ها هستند. اگر $a \gg R$ باشد که در آن $a = \hbar^2 / (\mu e^2)$ شعاع بوهر است آنگاه بسط (۴۳۱-۹) برحسب توان‌های \mathbf{r}_A/R و \mathbf{r}_B/R تا اولین جمله‌های غیرصفر، عبارتی از مرتبه‌ی $1/R^3$ را نتیجه می‌دهد:

$$\hat{H}_p = \frac{e^2}{R^3} \left[\mathbf{r}_A \cdot \mathbf{r}_B - 3 \frac{(\mathbf{r}_A \cdot \mathbf{R})(\mathbf{r}_B \cdot \mathbf{R})}{R^2} \right] \quad (۴۳۲-۹)$$

که انرژی برهمکنش دوقطبی-دوقطبی بین گشتاورهای دوقطبی دو اتم است. چون $\mathbf{R} = R\hat{z}$ است، می‌توانیم (۴۳۲-۹) را به صورت زیر بنویسیم:

$$\hat{H}_p = \frac{e^2}{R^3} \left(\hat{X}_A \hat{X}_B + \hat{Y}_A \hat{Y}_B - 2 \hat{Z}_A \hat{Z}_B \right) \quad (۴۳۳-۹)$$

انرژی حالت پایه و تابع موج مولکول (مختل نشده) عبارتند از

$$E_0 = E_0^A + E_0^B = 2E_{100} = -\frac{e^2}{a_0}, \quad |\phi_0\rangle = |\phi_0^A\rangle |\phi_0^B\rangle = |100\rangle_A |100\rangle_B \quad (۴۳۴-۹)$$

تصحیح مرتبه‌ی اول انرژی مولکول ($E^{(1)} = \langle \phi_0 | \hat{H}_p | \phi_0 \rangle$) از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$E^{(1)} = \frac{e^2}{R^3} \left(\langle \phi_0^A | \hat{X}_A | \phi_0^A \rangle \langle \phi_0^B | \hat{X}_B | \phi_0^B \rangle + \langle \phi_0^A | \hat{Y}_A | \phi_0^A \rangle \langle \phi_0^B | \hat{Y}_B | \phi_0^B \rangle - 2 \langle \phi_0^A | \hat{Z}_A | \phi_0^A \rangle \langle \phi_0^B | \hat{Z}_B | \phi_0^B \rangle \right) \quad (۴۳۵-۹)$$

چون عملگرهای \hat{X} ، \hat{Y} و \hat{Z} فردند و حالت‌های $|\phi_0^A\rangle$ و $|\phi_0^B\rangle$ متقارن کروی‌اند آنگاه تمام جمله‌های صفرند از این رو $E^{(1)} = 0$ است.

حال بیابید تصحیح مرتبه‌ی دوم را محاسبه کنیم:

$$E^{(2)} = \sum_{n,l,m;n',l',m' \neq 1,0,0} \frac{|\langle n, l, m; n', l', m' | \hat{H}_p | \phi_0 \rangle|^2}{2E_{100} - E_n - E_{n'}} \quad (۴۳۶-۹)$$

که در آن

$$\begin{aligned} \langle n, l, m; n', l', m' | \hat{H}_p | \phi_0 \rangle &= \frac{e^{\gamma}}{R^{\gamma}} \left(\langle n, l, m | \hat{X}_A | 1, 0, 0 \rangle_A \langle n', l', m' | \hat{X}_B | 1, 0, 0 \rangle_B \right. \\ &+ \langle n, l, m | \hat{Y}_A | 1, 0, 0 \rangle_A \langle n', l', m' | \hat{Y}_B | 1, 0, 0 \rangle_B \\ &\left. - 2 \langle n, l, m | \hat{Z}_A | 1, 0, 0 \rangle_A \langle n', l', m' | \hat{Z}_B | 1, 0, 0 \rangle_B \right) \quad (437-9) \end{aligned}$$

جمله‌های این عبارت تنها زمانی غیرصفرند که $l = l' = 1$ باشد زیرا عملگرهای \hat{X} ، \hat{Y} و \hat{Z} متناسب با Y_{1m} هستند. می‌توانیم با استفاده از یک تقریب نه‌چندان دقیق که در آن فرض می‌کنیم مخرج کسر E_{nlm} ثابت است و $E_n \simeq E_{n'}$ است، $E^{(\gamma)}$ را حساب کنیم. توجه کنید که به‌ازای $n \geq 2$ داریم: $E_{nlm} \geq E_{200}$. در این صورت می‌توانیم (۹-۴۳۶) را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$E^{(\gamma)} \leq \frac{1}{2(E_{100} - E_{200})} \sum_{n,l,m;n',l',m' \neq 1,0,0} \left| \langle n, l, m; n', l', m' | \hat{H}_p | \phi_0 \rangle \right|^2 \quad (438-9)$$

چون جمله‌ی قطری صفر است (یعنی $\langle 1, 0, 0; 1, 0, 0 | \hat{H}_p | 1, 0, 0; 1, 0, 0 \rangle = 0$)، داریم:

$$\begin{aligned} &\sum_{n,l,m;n',l',m'} \left| \langle n, l, m; n', l', m' | \hat{H}_p | \phi_0 \rangle \right|^2 \\ &= \sum_{n,l,m;n',l',m'} \langle 1, 0, 0; 1, 0, 0 | \hat{H}_p | n, l, m; n', l', m' \rangle \langle n, l, m; n', l', m' | \hat{H}_p | 1, 0, 0; 1, 0, 0 \rangle \\ &= \langle 1, 0, 0; 1, 0, 0 | (\hat{H}_p)^2 | 1, 0, 0; 1, 0, 0 \rangle \\ &= \frac{e^{\gamma}}{R^{\gamma}} \langle 1, 0, 0; 1, 0, 0 | \left(\hat{X}_A \hat{X}_B + \hat{Y}_A \hat{Y}_B - 2 \hat{Z}_A \hat{Z}_B \right)^2 | 1, 0, 0; 1, 0, 0 \rangle \quad (439-9) \end{aligned}$$

می‌توان محاسبه‌ی $\langle \hat{X}_A \hat{X}_B + \hat{Y}_A \hat{Y}_B - 2 \hat{Z}_A \hat{Z}_B \rangle$ را با استفاده از تقارن ساده‌تر کرد. به دلیل تقارن کروی، جمله‌های متقاطع صفرند:

$$\langle \hat{X}_A \hat{Y}_A \rangle_A = \langle \hat{X}_A \hat{Z}_A \rangle_A = \langle \hat{Y}_A \hat{Z}_A \rangle_A = \langle \hat{X}_B \hat{Y}_B \rangle_B = \dots = \langle \hat{Y}_B \hat{Z}_B \rangle_B = 0 \quad (440-9)$$

در حالی که جمله‌های دیگر به صورت زیر به دست می‌آیند (۹-۴۵) را ببینید):

$$\langle \hat{X}_A^2 \rangle_A = \langle \hat{Y}_A^2 \rangle_A = \langle \hat{Z}_A^2 \rangle_A = \langle \hat{X}_B^2 \rangle_B = \langle \hat{Y}_B^2 \rangle_B = \langle \hat{Z}_B^2 \rangle_B = a^2 \quad (441-9)$$

که در آن $\langle \hat{C} \rangle_A = \langle \phi_0^A | \hat{C} | \phi_0^A \rangle$ و $\langle \hat{D} \rangle_B = \langle \phi_0^B | \hat{D} | \phi_0^B \rangle$ است. بنابراین می‌توانیم رابطه‌ی زیر را به دست آوریم:

$$\langle 1, 0, 0; 1, 0, 0 | \left(\hat{X}_A \hat{X}_B + \hat{Y}_A \hat{Y}_B - 2 \hat{Z}_A \hat{Z}_B \right)^2 | 1, 0, 0; 1, 0, 0 \rangle = 6a^4 \quad (442-9)$$

با وارد کردن (۹-۴۴۲) در (۹-۴۳۹) و سپس قرار دادن عبارت حاصل از آن در (۹-۴۳۸) رابطه‌ی زیر را به‌دست می‌آوریم:

$$E^{(2)} \leq \frac{\langle 1, 0, 0; 1, 0, 0 | (\hat{H}_p)^2 | 1, 0, 0; 1, 0, 0 \rangle}{2(E_{100} - E_{200})} = \frac{3e^2 a_0^4}{R^6} \frac{1}{E_{100} - E_{200}} \quad (9-443)$$

یا

$$E^{(2)} \leq -\frac{\lambda e^2 a_0^5}{R^6} \quad (9-444)$$

زیرا $E_{100} = -e^2/\lambda a_0$ و $E_{200} = -e^2/2\lambda a_0$ است. سرانجام حد بالای انرژی حالت پایه‌ی این مولکول تا اختلال مرتبه‌ی دوم از رابطه‌ی زیر به‌دست می‌آید:

$$E_2 \leq 2E_{100} - \frac{\lambda e^2 a_0^5}{R^6} \implies E_2 \leq -\frac{e^2}{a_0} \left(1 + \lambda \frac{a_0^5}{R^6} \right) \quad (9-445)$$

مسأله‌ی ۹-۱۵

یک پروتون با انرژی E از سمت راست روی هسته‌ای با بار Ze فرود می‌آید. ضریب عبور وابسته به نفوذ پروتون به درون هسته را تخمین بزنید.

حل

برای نفوذ به داخل هسته (یعنی همانطور که در شکل ۹-۱۰ نشان داده شده است، به طرف چپ نقطه‌ی بازگشت $r = a$)، پروتون باید بر نیروی دافعه‌ی کولنی هسته غلبه کند. یعنی باید از داخل سد کولنی $V(r) = Ze^2/r$ تونل بزند. ضریب عبور در تقریب WKB از (۹-۲۴۷) به‌دست می‌آید که در آن $x_1 = a$ و $x_2 = 0$ است:

$$T = e^{-2\gamma}, \quad \gamma = \frac{1}{\hbar} \int_0^a \sqrt{2m(V(r) - E)} dr \quad (9-446)$$

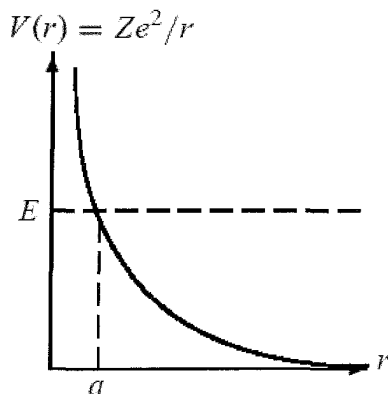
که در آن a از $E = V(a)$ به‌دست می‌آید: $a = Ze^2/E$. چون $V(r) = Ze^2/r$ است، رابطه‌ی زیر را به‌دست می‌آوریم:

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \int_a^0 \sqrt{2m \left(\frac{Ze^2}{r} - E \right)} dr = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \int_{Ze^2/E}^0 \sqrt{\frac{Ze^2}{Er} - 1} dr \quad (9-447)$$

تغییر متغیر $x = Er/(Ze^2)$ ، رابطه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\gamma = \frac{Ze^2}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}} \int_1^0 \sqrt{\frac{1}{x} - 1} dx = \frac{Ze^2 \pi}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2E}} \quad (9-448)$$

در به دست آوردن این رابطه از انتگرال $\int_0^1 \sqrt{1/x - 1} dx = \pi/2$ استفاده کرده‌ایم.



شکل ۹-۱۰ سد کولنی $V(r) = Ze^2/r$ که توسط پروتونی با انرژی E (در هنگامی که از سمت راست به یک هسته‌ی با بار Ze واقع در مبدأ نزدیک می‌شود) دیده می‌شود.

بنابراین ضریب عبور از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$T = e^{-2\gamma} = \exp \left[-\frac{Ze^2\pi}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}} \right] \quad (۹-۴۴۹)$$

مقدار این ضریب نشان می‌دهد که برای یک ذره با بار مثبت (مانند یک پروتون) چقدر مشکل است تا به هسته برسد.

مسئله‌ی ۹-۱۶

دو ذره‌ی یکسان با اسپین $\frac{1}{2}$ در یک جعبه‌ی پتانسیل یک‌بعدی به طول L با دیواره‌هایی در $x = 0$ و $x = L$ محصور شده‌اند.

(الف) انرژی پایین‌ترین سه حالت را بیابید.

(ب) سپس با تحت تأثیر قرار دادن ذره‌ها با اختلال

$$\hat{H}_p(x_1, x_2) = -V_0 L^2 \delta \left(x_1 - \frac{L}{4} \right) \delta \left(x_2 - \frac{L}{3} \right)$$

و استفاده از اختلال مستقل از زمان مرتبه‌ی اول، انرژی حالت پایه‌ی سیستم را محاسبه کنید.

حل

چون دو ذره اسپین یکسانی دارند، تابع موج اسپینی $\chi_s(s_1, s_2)$ این سیستم باید متقارن باشد بنابراین

χ_s برابر با هر یک از حالت‌های سه‌تایی زیر است:

$$\chi_s = \begin{cases} |1, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} |1, \frac{1}{\sqrt{2}}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1, \frac{1}{\sqrt{2}}\rangle \right] \\ |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} |1, \frac{1}{\sqrt{2}}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1, -\frac{1}{\sqrt{2}}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1, -\frac{1}{\sqrt{2}}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1, \frac{1}{\sqrt{2}}\rangle \right] \\ |1, -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} |1, -\frac{1}{\sqrt{2}}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1, -\frac{1}{\sqrt{2}}\rangle \right] \end{cases} \quad (450-9)$$

علاوه‌براین چون این سیستم دو ذره‌ای سیستمی از فرمیون‌های یکسان است، تابع موج آن باید پادمتقارن باشد. با توجه به این که قسمت اسپینی متقارن است، قسمت فضایی تابع موج باید پادمتقارن باشد:

$$\Psi(x_1, x_2) = \psi_A(x_1, x_2) \chi_s(s_1, s_2) \quad (451-9)$$

یعنی

$$\begin{aligned} \psi_A(x_1, x_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_{n_1}(x_1) \phi_{n_2}(x_2) - \phi_{n_2}(x_1) \phi_{n_1}(x_2)] \\ &= \frac{1}{L} \left[\sin\left(\frac{n_1 \pi x_1}{L}\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi x_2}{L}\right) - \sin\left(\frac{n_2 \pi x_1}{L}\right) \sin\left(\frac{n_1 \pi x_2}{L}\right) \right] \end{aligned} \quad (452-9)$$

ترازهای انرژی این سیستم دو ذره‌ای عبارتند از

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_1^2 + n_2^2) = E_0 (n_1^2 + n_2^2) \quad (453-9)$$

که در آن $E_0 = \pi^2 \hbar^2 / (2mL^2)$ است. توجه کنید که این ترازهای انرژی به دلیل قسمت اسپینی تابع موج، واگن سه‌گانه‌اند یعنی سه حالت اسپینی متفاوت وجود دارد که متناظر با تراز انرژی یکسان $\pi^2 \hbar^2 (n_1^2 + n_2^2) / (2mL^2)$ هستند.

(الف) حال با نوشتن عبارت عمومی انرژی و تابع موج، به‌دست آوردن ترازهای انرژی و تابع‌های موج پایین‌ترین سه حالت کار ساده‌ای است. ابتدا باید توجه کنیم که حالت پایه نمی‌تواند متناظر با $n_1 = n_2 = 1$ باشد زیرا تابع موج فضایی صفر خواهد شد. آنگاه حالت پایه متناظر با $n_1 = 1$ و $n_2 = 2$ است و انرژی آن از (453-9) به‌دست می‌آید:

$$E^{(0)} = E_0 (1^2 + 2^2) = 5E_0 = \frac{5\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad (454-9)$$

و تابع موج $\psi_0(x_1, x_2)$ از (452-9) نتیجه می‌شود.

نخستین حالت برانگیخته متناظر با $n_1 = 1$ و $n_2 = 3$ است. بنابراین می‌توان تابع موج $\psi_1(x_1, x_2)$ را از (452-9) و انرژی را از (453-9) نتیجه گرفت:

$$E^{(1)} = E_0 (1^2 + 3^2) = 10E_0 = \frac{10\pi^2 \hbar^2}{mL^2} \quad (455-9)$$

دومین حالت برانگیخته متناظر با $n_1 = 2$ و $n_2 = 3$ است از این رو انرژی از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$E^{(2)} = 13E_0 = \frac{13\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad (456-9)$$

(ب) با معرفی اختلال $\hat{H}_p = -V_0 L^2 \delta(x_1 - L/2) \delta(x_2 - L/3)$ و با توجه به این که \hat{H}_p در فضای اسپین قطری است، انرژی حالت پایه تا اختلال مرتبه‌ی اول از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$E = \frac{5\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} + \langle \psi_0 | \hat{H}_p | \psi_0 \rangle \quad (457-9)$$

که در آن

$$\langle \psi_0 | \hat{H}_p | \psi_0 \rangle = \int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 \psi_0^*(x_1, x_2) \hat{H}_p(x_1, x_2) \psi_0(x_1, x_2) \quad (458-9)$$

چون

$$\psi_0^*(x_1, x_2) = \psi_0(x_1, x_2) = \frac{1}{L} \left[\sin\left(\frac{\pi x_1}{L}\right) \sin\left(\frac{2\pi x_2}{L}\right) - \sin\left(\frac{2\pi x_1}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi x_2}{L}\right) \right] \quad (459-9)$$

است، داریم:

$$\begin{aligned} \langle \psi_0 | \hat{H}_p | \psi_0 \rangle &= -\frac{V_0 L^2}{L^2} \int_0^L dx_1 \delta\left(x_1 - \frac{L}{2}\right) \int_0^L dx_2 \delta\left(x_2 - \frac{L}{3}\right) \\ &\quad \times \left[\sin\left(\frac{\pi x_1}{L}\right) \sin\left(\frac{2\pi x_2}{L}\right) - \sin\left(\frac{2\pi x_1}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi x_2}{L}\right) \right]^2 \\ &= -V_0 \left[\sin\left(\frac{\pi}{2}\right) \sin\left(\frac{2\pi}{3}\right) - \sin(\pi) \sin\left(\frac{\pi}{3}\right) \right]^2 \\ &= -\frac{3}{4} V_0 \end{aligned} \quad (460-9)$$

از این رو

$$E = \frac{5\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} - \frac{3}{4} V_0 \quad (461-9)$$

مسئله‌ی ۹-۱۷

با چشم‌پوشی از برهمکنش اسپین-مدار، انرژی حالت پایه‌ی یک اتم دو الکترونی را به دو روش زیر بیابید:
(الف) از محاسبه‌ی اختلال مرتبه‌ی اول استفاده کنید و برهمکنش کولنی بین دو الکترون را به صورت یک اختلال در نظر بگیرید.

(ب) از روش وردشی استفاده کنید.

نتیجه‌ها را با هم مقایسه کنید و در مورد مزیت هر دو روش تقریب بحث کنید.

حل

مثال‌های چنین سیستمی عبارتند از اتم هلیوم ($Z = 2$)، یون یک‌بار یونیده‌ی Li^+ ($Z = 3$)، یون دوبار یونیده‌ی Be^{2+} ($Z = 4$) و به همین ترتیب. هر الکترون این سیستم‌ها اثر دو میدان کولنی را حس می‌کند: یکی را از هسته $Z e$ ($V(r) = -Ze^2/r$) و دیگری را از الکترون دیگر ($V_{12} = e^2/r_{12} = e^2/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$). در اینجا هسته را واقع در مبدا و الکترون‌ها را در \mathbf{r}_1 و \mathbf{r}_2 در نظر می‌گیریم. با چشم‌پوشی از برهمکنش اسپین-مدار، می‌توانیم هامیلتونی این سیستم دو الکترونی را به صورت زیر بنویسیم:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_{12} = \hat{H}_0 + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (462-9)$$

که در آن

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - Ze^2 \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \quad (463-9)$$

که هامیلتونی اتم است در هنگامی که از برهمکنش بین دو الکترون چشم‌پوشی کنیم. در فصل ۸ دیدیم هنگامی که از برهمکنش بین دو الکترون چشم‌پوشی می‌شود، انرژی حالت پایه و تابع موج از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$E_0 = -2 \frac{Z^2 e^2}{2a} = -27.2 Z^2 \text{eV} \quad (464-9)$$

$$\Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{S}_1; \mathbf{r}_2, \mathbf{S}_2) = \psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \chi_{\text{تک‌تایی}}(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2) \quad (465-9)$$

که در آن قسمت اسپینی پادمتقارن است:

$$\chi_{\text{تک‌تایی}}(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_2 - \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_2 \right) \quad (466-9)$$

و قسمت فضایی متقارن: $\psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \phi_{100}(\mathbf{r}_1) \phi_{100}(\mathbf{r}_2)$ با

$$\phi_{100}(\mathbf{r}) = R_{10}(r) Y_{00}(\Omega) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} e^{-Zr/a} \quad (467-9)$$

یعنی

$$\psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{Z}{a} \right)^3 e^{-Z(r_1+r_2)/a} \quad (468-9)$$

(الف) برای محاسبه‌ی انرژی حالت پایه با استفاده از اختلال مرتبه‌ی اول، باید \hat{V}_{12} را به صورت یک اختلال در نظر بگیریم. بحث مربوط به اختلال مرتبه‌ی اول نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$E = E_0 + \langle \psi_0 | \hat{V}_{12} | \psi_0 \rangle = -2 \frac{Z^2 e^2}{2a} + \langle \psi_0 | \hat{V}_{12} | \psi_0 \rangle \quad (469-9)$$

که در آن

$$\begin{aligned} \langle \psi_0 | \hat{V}_{12} | \psi_0 \rangle &= \int d^3r_1 \int d^3r_2 \psi_0^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \hat{V}_{12} \psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \\ &= \int d^3r_1 \int d^3r_2 |\phi_{100}(\mathbf{r}_1)|^2 \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} |\phi_{100}(\mathbf{r}_2)|^2 \end{aligned} \quad (470-9)$$

محاسبه‌ی این انتگرال کاملاً پیچیده است (به‌عنوان تمرین آن را محاسبه کنید). نتیجه برابر است با

$$\langle \psi_0 | \hat{V}_{12} | \psi_0 \rangle = \frac{5}{8} \frac{Ze^2}{a} \quad (471-9)$$

که هنگامی که با (۹-۴۶۹) ترکیب شود، به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$E = -\frac{Ze^2}{a} \left(Z - \frac{5}{8} \right) \quad (472-9)$$

در مورد هلیوم ($Z = 2$) داریم:

$$E = -108,8 \text{ eV} + 34 \text{ eV} = -74,8 \text{ eV} \quad (473-9)$$

این نتیجه به اندازه‌ی ۴ eV با مقدار تجربی $-78,975 \text{ eV}$ = تجربی E اختلاف دارد به عبارت دیگر، خطای نسبی برابر با ۵/۳٪ است. از نظر فیزیکی، می‌توان آن را به این واقعیت نسبت داد که در محاسباتمان اثر «استتار» را به حساب نیاورده‌ایم: حضور یک الکترون تمایل دارد تا بار خالص «دیده شده» توسط الکترون دیگر را کاهش دهد. فرض کنید الکترون ۱ «بین» هسته و الکترون ۲ قرار دارد آنگاه الکترون ۲، Z پروتون را «نمی‌بیند» بلکه ($Z - 1$) پروتون را می‌بیند (یعنی الکترون ۲ بار مؤثر $e(Z - 1)$ هسته را احساس می‌کند). (ب) در تشابه با شکل دقیق تابع موج حالت پایه (۹-۴۶۸)، می‌توانیم تابع آزمونی را انتخاب کنیم که اثر استتار را به حساب می‌آورد. برای این کار، تنها باید Z در (۹-۴۶۸) را با پارامتر ورودشی α تعویض کنیم:

$$\psi_0(r_1, r_2) = A e^{-\alpha(r_1+r_2)/a} \quad (474-9)$$

که در آن A ثابت بهنجارش است. با استفاده از انتگرال $\int_0^\infty x^n e^{-bx} dx = n!/b^{n+1}$ می‌توانیم نشان دهیم که $A = (\alpha/a)^3/\pi$ است از این رو

$$\psi_\alpha(r_1, r_2) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{\alpha}{a} \right)^3 e^{-\alpha(r_1+r_2)/a} \quad (475-9)$$

ترکیب این رابطه با (۹-۴۷۱) به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$E(\alpha) = \langle \psi_\alpha | \hat{H}_0 | \psi_\alpha \rangle + \langle \psi_\alpha | \hat{V}_{12} | \psi_\alpha \rangle = \langle \psi_\alpha | \hat{H}_0 | \psi_\alpha \rangle + \frac{5}{8} \frac{\alpha e^2}{a} \quad (476-9)$$

می‌توان محاسبه‌ی $\langle \psi_\alpha | \hat{H}_0 | \psi_\alpha \rangle$ را با نوشتن آن به صورت زیر ساده کرد:

$$\begin{aligned} \langle \psi_\alpha | \hat{H}_0 | \psi_\alpha \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \langle \psi_\alpha | \nabla_1^2 + \nabla_2^2 | \psi_\alpha \rangle - Ze^2 \left\langle \psi_\alpha \left| \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right| \psi_\alpha \right\rangle \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \langle \psi_\alpha | \nabla_1^2 + \nabla_2^2 | \psi_\alpha \rangle - \alpha e^2 \left\langle \psi_\alpha \left| \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right| \psi_\alpha \right\rangle \quad (۴۷۷-۹) \\ &\quad - (Z - \alpha) e^2 \left\langle \psi_\alpha \left| \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right| \psi_\alpha \right\rangle \end{aligned}$$

این شکل کاملاً پیشنهادی است. چون $-\hbar^2 \langle \psi_0 | \nabla^2 | \psi_0 \rangle / (2\mu) - Ze^2 \langle \psi_0 | 1/r | \psi_0 \rangle = -Ze^2 / (2a)$ می‌توانیم بنویسیم:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \langle \psi_\alpha | \nabla_1^2 + \nabla_2^2 | \psi_\alpha \rangle - \alpha e^2 \left\langle \psi_\alpha \left| \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right| \psi_\alpha \right\rangle = -2 \frac{\alpha^2 e^2}{2a} \quad (۴۷۸-۹)$$

حال با توجه به

$$\left\langle \psi_\alpha \left| \frac{1}{r_1} \right| \psi_\alpha \right\rangle = \left\langle \psi_\alpha \left| \frac{1}{r_2} \right| \psi_\alpha \right\rangle = 4 \left(\frac{\alpha}{a}\right)^3 \int_0^\infty r e^{-2\alpha r/a} dr = \frac{\alpha}{a} \quad (۴۷۹-۹)$$

می‌توانیم (۴۷۷-۹) را به رابطه‌ی زیر کاهش دهیم:

$$\langle \psi_\alpha | \hat{H}_0 | \psi_\alpha \rangle = -2 \frac{\alpha^2 e^2}{2a} - 2(Z - \alpha) e^2 \frac{\alpha}{a} \quad (۴۸۰-۹)$$

که زمانی که با (۴۷۶-۹) ترکیب شود، به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$E(\alpha) = -2 \frac{\alpha^2 e^2}{2a} - 2(Z - \alpha) e^2 \frac{\alpha}{a} + \frac{5}{8} \frac{\alpha e^2}{a} = \left[\alpha^2 - 2 \left(Z - \frac{5}{16} \right) \alpha \right] \frac{e^2}{a} \quad (۴۸۱-۹)$$

کمینه کردن $E(\alpha)$ ($dE(\alpha)/d\alpha = 0$) نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\alpha_0 = Z - \frac{5}{16} \quad (۴۸۲-۹)$$

از این رو انرژی حالت پایه برابر است با

$$E(\alpha_0) = - \left[1 - \frac{5}{8Z} + \left(\frac{5}{16Z} \right)^2 \right] \frac{Z^2 e^2}{a} \quad (۴۸۳-۹)$$

و

$$\psi(r_1, r_2) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{Z}{a} - \frac{5}{16a} \right)^3 \exp \left[- \left(\frac{Z}{a} - \frac{5}{16a} \right) (r_1 + r_2) \right] \quad (۴۸۴-۹)$$

برای این که مسأله به صورت عددی روشن شود، انرژی حالت پایه‌ی اتم هلیوم از جاگذاری $Z = 2$ در $(483-9)$ به دست می‌آید و $E_0 = -77,456 \text{ eV}$ را نتیجه می‌دهد که در هماهنگی کاملی با مقدار تجربی $E = -78,975 \text{ eV}$ است. روش وردشی که تنها به اندازه‌ی $1/9\%$ بیشتر از مقدار درست را تخمین می‌زند، به صورت قابل ملاحظه‌ای دقیق‌تر از اختلال مرتبه‌ی اول است. دلیل آن کاملاً روشن است؛ در حالی که بحث اختلال اثر استتار را توضیح نمی‌دهد، روش وردشی به صورت کاملاً دقیق آن را در نظر می‌گیرد: تابع موج $(484-9)$ نشان می‌دهد که الکترون دوم بار Ze را نمی‌بیند بلکه بار کمتر $e(Z - 5/16)$ را می‌بیند.

۷-۹ تمرین‌ها

۱. انرژی n امین حالت برانگیخته را تا اختلال مرتبه‌ی اول برای یک جعبه‌ی پتانسیل یک بعدی به طول $2L$ با دیواره‌هایی در $x = L$ و $x = -L$ که در ته جعبه توسط اختلال‌های زیر با $V_0 \ll 1$ اصلاح می‌شود، محاسبه کنید:

$$V_p(x) \begin{cases} -V_0 & -L/2 \leq x \leq L/2 \\ 0 & \text{در جاهای دیگر} \end{cases} \quad (\text{ب}) \quad V_p(x) = \begin{cases} -V_0 & -L \leq x \leq L \\ 0 & \text{در جاهای دیگر} \end{cases} \quad (\text{الف})$$

۲. انرژی n امین حالت برانگیخته را تا اختلال مرتبه‌ی اول برای یک جعبه‌ی پتانسیل یک بعدی به طول $2L$ با دیواره‌هایی در $x = L$ و $x = -L$ که در ته جعبه توسط اختلال‌های زیر با $V_0 \ll 1$ اصلاح می‌شود، محاسبه کنید:

$$V_p(x) \begin{cases} V_0 & 0 \leq x \leq L/2 \\ 0 & \text{در جاهای دیگر} \end{cases} \quad (\text{ب}) \quad V_p(x) = \begin{cases} -V_0 & -L/2 \leq x \leq 0 \\ 0 & \text{در جاهای دیگر} \end{cases} \quad (\text{الف})$$

$$V_p(x) \begin{cases} -V_0 & -L/2 \leq x \leq 0 \\ V_0 & 0 \leq x \leq L/2 \\ 0 & \text{در جاهای دیگر} \end{cases} \quad (\text{ب})$$

۳. انرژی n امین حالت برانگیخته تا اختلال مرتبه‌ی دوم و تابع موج تا اختلال مرتبه‌ی اول را برای یک جعبه‌ی پتانسیل یک بعدی به طول $2L$ با دیواره‌هایی در $x = L$ و $x = -L$ که در ته جعبه توسط اختلال‌های زیر با $V_0 \ll 1$ اصلاح می‌شود، محاسبه کنید:

$$V_p(x) \begin{cases} -V_0(1-x^2/L^2) & |x| < L \\ 0 & \text{در جاهای دیگر} \end{cases} \quad (\text{ب}) \quad V_p(x) = \begin{cases} 0 & -L \leq x \leq 0 \\ V_0 & 0 \leq x \leq L \end{cases} \quad (\text{الف})$$

$$۴. \text{سیستمی را در نظر بگیرید که هامیلتونی آن از } \hat{H} = E. \begin{pmatrix} ۳ & ۲\lambda & ۰ & ۰ \\ ۲\lambda & -۳ & ۰ & ۰ \\ ۰ & ۰ & -۷ & \sqrt{۲}\lambda \\ ۰ & ۰ & \sqrt{۲}\lambda & ۷ \end{pmatrix}$$

می‌آید که در آن $\lambda \ll ۱$ است.

(الف) ویژه‌مقدارهای دقیق \hat{H} را محاسبه کنید. هر یک از این ویژه‌مقدارها را تا توان دوم λ بسط دهید.

(ب) ویژه‌مقدارهای انرژی را تا اختلال مرتبه‌ی دوم محاسبه کنید و آنها را با نتیجه‌های دقیق به دست آمده در (الف) مقایسه کنید.

(پ) ویژه‌حالت‌های \hat{H} را تا تصحیح مرتبه‌ی اول محاسبه کنید.

۵. ذره‌ای به جرم m را در نظر بگیرید که در پتانسیل سه‌بعدی $V(r) = kr$ که در آن k یک ثابت با ابعاد

نیرو است، حرکت می‌کند. از روش وردشی برای تخمین انرژی حالت پایه‌ی آن استفاده کنید. می‌توانید $R(r) = e^{-r^2/2\alpha^2}$ را به عنوان تابع آزمون شعاعی در نظر بگیرید که در آن α یک پارامتر قابل تنظیم است.

۶. از روش WKB برای تخمین انرژی حالت پایه‌ی ذره‌ای به جرم m که در پتانسیل سه‌بعدی $V(r) = kr$

حرکت می‌کند و در آن k یک ثابت با ابعاد نیرو است، استفاده کنید.

۷. هامیلتونی یک نوسانگر هماهنگ دوبعدی را در نظر بگیرید:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(\hat{X}^2 + \hat{Y}^2)(1 + \lambda\hat{X}\hat{Y})$$

که در آن $\lambda \ll ۱$ است.

(الف) هنگامی که $\lambda = ۰$ است، تابع‌های موج پایین‌ترین سه تراز انرژی را به دست آورید.

(ب) هنگامی که $\lambda \neq ۰$ است، با استفاده از نظریه‌ی اختلال، تصحیح‌های مرتبه‌ی اول این ترازهای انرژی را محاسبه کنید.

۸. ذره‌ای را در نظر بگیرید که دارای هامیلتونی $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hbar\omega(\hat{a}^\dagger + \hat{a})^\dagger$ است که در آن \hat{H}_0

هامیلتونی یک نوسانگر هماهنگ ساده‌ی یک‌بعدی و \hat{a} و \hat{a}^\dagger عملگرهای معمولی نابودی و آفرینش می‌باشند که از $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = ۱$ پیروی می‌کنند و λ یک عدد حقیقی بسیار کوچک است.

(الف) انرژی حالت پایه را تا مرتبه‌ی دوم λ محاسبه کنید.

(ب) انرژی m امین حالت برانگیخته، E_m ، را تا مرتبه‌ی دوم λ و ویژه‌حالت $|\psi_m\rangle$ متناظر را تا مرتبه‌ی اول λ بیابید.

۹. دو ذره‌ی یکسان با اسپین $\frac{1}{2}$ را در نظر بگیرید که در پتانسیل یک نوسانگر هماهنگ همسانگرد سه‌بعدی با بسامد ω محدود شده‌اند.

(الف) انرژی حالت پایه و تابع موج متناظر این سیستم را هنگامی که دو ذره برهمکنشی ندارند، بیابید.
 (ب) اکنون فرض کنید پتانسیل جاذبه‌ی ضعیف وابسته به اسپین $V(r_1, r_2) = -kr_1 r_2 - \lambda \hat{S}_{1z} \hat{S}_{2z}$ بین دو ذره وجود دارد که در آن k و λ دو عدد حقیقی مثبت کوچک هستند. حالت پایه را تا اختلال مستقل از زمان مرتبه‌ی اول بیابید.

(پ) از روش وردشی برای تخمین انرژی حالت پایه‌ی این سیستم متشکل از دو ذره‌ی غیربرهمکنشی با اسپین $\frac{1}{2}$ که در یک نوسانگر هماهنگ همسانگرد سه‌بعدی محدود شده‌اند، استفاده کنید. نتیجه را با نتیجه‌ی به‌دست آمده در (الف) مقایسه کنید.

۱۰. دو ذره‌ی یکسان با اسپین $\frac{1}{2}$ در یک جعبه‌ی پتانسیل یک‌بعدی به طول L با دیواره‌هایی در $x = 0$ و $x = L$ محدود شده‌اند.

(الف) هنگامی که دو ذره برهمکنش ندارند، انرژی حالت پایه و نخستین حالت برانگیخته و تابع موج مربوط به آنها را برای این سیستم بیابید.

(ب) حال فرض کنید یک پتانسیل جاذبه‌ی ضعیف بین دو ذره وجود دارد:

$$V_p(x) = \begin{cases} -V_0 & 0 \leq x \leq L/2 \\ 0 & L/2 < x \leq L \end{cases}$$

انرژی حالت پایه و نخستین حالت برانگیخته را تا اختلال مرتبه‌ی اول بیابید.

(پ) مقدارهای عددی انرژی حالت پایه و نخستین حالت برانگیخته‌ی محاسبه شده در (الف) را در حالتی که در آن $L = 10^{-10} \text{ m}$ ، $V_0 = 2 \text{ eV}$ و جرم هر یک از ذره‌ها برابر با جرم الکترون در نظر گرفته می‌شود، بیابید. اندازه‌ی تصحیح مرتبه‌ی اول را با انرژی حالت پایه و انرژی نخستین حالت برانگیخته مقایسه کنید (به سادگی می‌توانید نسبت بین تصحیح‌های مرتبه‌ی اول با انرژی‌های حالت پایه و نخستین حالت برانگیخته را محاسبه کنید).

۱۱. یک نوسانگر هماهنگ همسانگرد سه‌بعدی را در نظر بگیرید.

(الف) انرژی نخستین حالت برانگیخته و حالت‌های متفاوت متناظر با این انرژی را بیابید.

(ب) حال اگر این نوسانگر را تحت تأثیر اختلال $\hat{V}_p(x, y) = -\lambda \hat{x} \hat{y}$ که در آن λ یک عدد حقیقی کوچک است، قرار دهیم آنگاه انرژی نخستین حالت برانگیخته را تا اختلال مستقل از زمان واگن مرتبه‌ی اول بیابید. راهنمایی: می‌توانید از $\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger)$ ، $\hat{y} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}_y + \hat{a}_y^\dagger)$ ، $\hat{z} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}_z + \hat{a}_z^\dagger)$ ، $\hat{a}_x^\dagger |n_x\rangle = \sqrt{n_x + 1} |n_x + 1\rangle$ و $\hat{a}_x |n_x\rangle = \sqrt{n_x} |n_x - 1\rangle$ استفاده کنید.

۱۲. با استفاده از تابع‌های آزمون شعاعی زیر، از روش وردشی برای تخمین انرژی حالت پایه‌ی نوسانگر هماهنگ کروی استفاده کنید:

$$R(r) = Ae^{-\alpha r^2} \quad (\text{الف})$$

(ب) $R(r) = Ae^{-\alpha r}$ که در آنها A یک ثابت بهنجارش است که باید در هر مورد به دست آید و α یک پارامتر قابل تنظیم است.

(پ) با استفاده از این واقعیت که انرژی حالت پایه دقیق برابر با $\frac{3}{2}\hbar\omega = E_{\text{دقیق}}$ است، خطاهای نسبی متناظر با انرژی‌های به دست آمده در (الف) و (ب) را بیابید.

۱۳. ذره‌ای به جرم m را در نظر بگیرید که به صورت قائم و کشسان روی یک کف بازتابنده‌ی صاف در میدان گرانشی زمین وامی‌جهد:

$$V(z) = \begin{cases} mgz & z > 0 \\ +\infty & z \leq 0 \end{cases}$$

که در آن g یک ثابت (شتاب ناشی از گرانش) است. با تابع موج آزمون $\psi(z) = z \exp(-\alpha z^2)$ که در آن α یک پارامتر قابل تنظیم است که باید تعیین شود، از روش وردشی برای تخمین انرژی حالت پایه‌ی این ذره استفاده کنید. با محاسبه‌ی خطای نسبی، نتیجه‌ی خود را با مقدار دقیق $E_{\text{دقیق}} = 2,338 \left(\frac{1}{4}mg^2\hbar^2\right)^{1/3}$ مقایسه کنید.

۱۴. انرژی حالت پایه تا اختلال مرتبه‌ی اول برای یک ذره که در یک جعبه‌ی پتانسیل یک‌بعدی به طول L با دیواره‌هایی در $x = 0$ و $x = L$ حرکت می‌کند را هنگامی که پتانسیل ضعیف $\hat{H}_p = \lambda \hat{x}^2$ به آن اضافه می‌شود (که در آن $\lambda \ll 1$ است) محاسبه کنید.

۱۵. یک سیستم نیمه‌کلاسیک را در نظر بگیرید که انرژی آن از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$E = a^2 + \frac{1}{4} \left(\frac{b^2}{4} - a^2 \right) p^2 + \frac{1}{4} \left(\frac{4a^2}{b^2/4 - a^2} \right) q^2$$

که در آن a و b ثابت‌های حقیقی و مثبت‌اند. از قاعده‌ی کوانتش بوهر-زومرفیلد برای به دست آوردن عبارت مربوط به انرژی حالت مقید E_n برای n امین حالت برانگیخته برحسب a استفاده کنید.

۱۶. از روش وردشی برای تخمین انرژی حالت پایه‌ی ذره‌ای به جرم m که در پتانسیل یک‌بعدی $V(x) = V_0 x^4$ حرکت می‌کند، استفاده کنید. می‌توانید از تابع آزمون $\psi_0(x, \alpha) = Ae^{-\alpha x^2/2}$ استفاده کنید که در آن A ثابت بهنجارش و α یک پارامتر قابل تنظیم است که باید تعیین شود.

۱۷. ذره‌ای به جرم m را در نظر بگیرید که در پتانسیل یک‌بعدی $V(x) = V_0 x^4$ حرکت می‌کند. انرژی حالت پایه‌ی این ذره را به وسیله‌ی روش WKB تخمین بزنید.

۱۸. با استفاده از $\phi_{1,0}(r) = (1/\sqrt{\pi})(Z/a)^{3/2} e^{-Zr/a}$ نشان دهید که

$$\int \phi_{1,0}^*(r_1) \frac{1}{|r_1 - r_2|} \phi_{1,0}(r_2) d^3r_1 d^3r_2 = \frac{5Z}{\lambda a}$$

۱۹. انرژی حالت پایه اتم بریلیم دو بار یونیده‌ی Be^{2+} را به‌وسیله‌ی دو روش زیر محاسبه کنید و سپس دو نتیجه را با هم مقایسه کنید:

(الف) بحث نظریه‌ی اختلال مرتبه‌ی اول

(ب) روش وردشی با تابع آزمون $\psi(r_1, r_2) = A \exp[-\alpha(r_1 + r_2)/a]$ که در آن A ثابت بهنجارش، α یک پارامتر قابل تنظیم و a شعاع بوهر است.

۲۰. از روش وردشی برای تخمین انرژی دومین حالت برانگیخته‌ی ذره‌ای به جرم m که در یک چاه نامتناهی یک‌بعدی با دیواره‌هایی در $x = 0$ و $x = L$ حرکت می‌کند، استفاده کنید. خطای نسبی بین نتیجه‌ی خودتان و مقدار دقیق را محاسبه کنید (به یاد بیاورید که انرژی دومین حالت برانگیخته از رابطه‌ی $E_3^{\text{دقیق}} = 9\pi^2 \hbar^2 / (2mL^2)$ به دست می‌آید).

۲۱. یک ذره‌ی بدون اسپین با تکانه‌ی زاویه‌ای مداری $l = 1$ را در نظر بگیرید که هامیلتونی آن به صورت

$$\hat{H}_0 = \frac{\mathcal{E}}{\hbar^2} (\hat{L}_x^2 - \hat{L}_y^2)$$

است که در آن \mathcal{E} یک ثابت با ابعاد انرژی است.

(الف) ترازهای انرژی دقیق و ویژه‌حالت‌های متناظر این ذره را محاسبه کنید.

(ب) اکنون اختلال $\hat{H}_p = \alpha \hat{L}_z / \hbar$ را اضافه می‌کنیم که در آن α یک ثابت کوچک (در مقایسه با \mathcal{E}) و دارای ابعاد انرژی است ترازهای انرژی این ذره را تا اختلال مرتبه‌ی دوم محاسبه کنید.

(پ) ماتریس $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_p$ را قطری کنید و ویژه‌مقدارهای انرژی دقیق را بیابید. سپس هر ویژه‌مقدار را تا توان دوم α بسط دهید و آنها را با نتیجه‌های به دست آمده از نظریه‌ی اختلال در (ب) مقایسه کنید.

۲۲. سیستمی را در نظر بگیرید که هامیلتونی آن از
$$\hat{H} = E_0 \begin{pmatrix} -5 & 3\lambda & 0 & 0 \\ 3\lambda & 5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 8 & -\lambda \\ 0 & 0 & -\lambda & -8 \end{pmatrix}$$
 به دست می‌آید که در آن $\lambda \ll 1$ است.

(الف) با تجزیه این هامیلتونی به $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_p$ ، ویژه‌مقدارها و ویژه‌حالت‌های هامیلتونی مختل نشده‌ی \hat{H}_0 را بیابید.

(ب) \hat{H} را برای یافتن ویژه‌مقدارهای دقیق \hat{H} قطری کنید. هر ویژه‌مقدار را تا توان دوم λ بسط دهید.

(پ) با استفاده از نظریه‌ی اختلال غیرواکن مرتبه‌ی اول و دوم، ویژه‌مقدارهای انرژی \hat{H} را بیابید و آنها را با مقدارهای دقیق به دست آمده در (ب) مقایسه کنید.

۲۳. انرژی حالت پایه اتم هیدروژن را با روش وردشی و با استفاده از دو تابع آزمون زیر تخمین بزنید. خطاهای نسبی را بیابید و دو نتیجه را با هم مقایسه کنید و در مورد مزیت هر تابع آزمون بحث کنید:

$$\phi_{\alpha}(r) = \begin{cases} 1 - r/\alpha & r \leq \alpha \\ 0 & r > \alpha \end{cases} \quad (\text{الف})$$

که در آن α یک پارامتر قابل تنظیم است. رابطه‌ای بین α_{\min} و شعاع بوهر بیابید.

$$\phi_{\alpha}(r) = Ae^{-\alpha r^2} \quad (\text{ب})$$

۲۴. الف) انرژی n امین حالت برانگیخته‌ی یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی که تحت تأثیر اختلال کوچک

زیر قرار می‌گیرد را تا اختلال مرتبه‌ی اول محاسبه کنید: $\hat{H}_p = \lambda(V_0 \hat{x}^2 + V_1 \hat{x}^4)$ که در آن V_0 و V_1

ثابت‌اند و $1 \ll \lambda$ است.

ب) از رابطه‌ی به‌دست آمده در الف) برای یافتن انرژی‌های پایین‌ترین سه حالت (یعنی $n = 0, 1, 2$)

تا اختلال مرتبه‌ی اول استفاده کنید.

$$25. \text{ از تابع آزمون } \psi_0(x, \alpha) = \begin{cases} A(\alpha^2 - x^2)^2 & |x| \leq \alpha \\ 0 & |x| \geq \alpha \end{cases}$$

نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی به‌وسیله‌ی روش وردشی استفاده کنید. α یک پارامتر قابل تنظیم و A

ثابت بهنجارش است. خطای نسبی را محاسبه کنید و دقت نتیجه را ارزیابی کنید.

۲۶. از تقریب WKB برای تخمین ضریب عبور ذره‌ای به جرم m و انرژی E که در سد پتانسیل زیر

حرکت می‌کند، استفاده کنید:

$$V(x) = \begin{cases} V_0(x/a + 1) & -a < x < 0 \\ V_0(1 - x/a) & 0 < x < a \\ 0 & \text{در جاهای دیگر} \end{cases}$$

با $0 < E < V_0$. این پتانسیل را رسم کنید.

۲۷. از روش وردشی برای تخمین انرژی حالت پایه‌ی یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی با تابع آزمون زیر

استفاده کنید:

$$\psi_0(x, \alpha) = A(1 + \alpha|x|)e^{-\alpha|x|}$$

که در آن α یک پارامتر قابل تنظیم و A ثابت بهنجارش است.

۲۸. به‌وسیله‌ی تقریب WKB، ضریب عبور ذره‌ای به جرم m و انرژی E را که در سد پتانسیل زیر حرکت

می‌کند، تخمین بزنید:

$$V(x) = \begin{cases} V_0(1 - x^2/a^2) & |x| < a \\ 0 & |x| > a \end{cases}$$

که در آن $0 < E \leq V_0$ است.

۲۹. از تقریب WKB برای یافتن ترازهای انرژی ذره‌ای به جرم m که در پتانسیل زیر حرکت می‌کند، استفاده کنید:

$$V(x) = \begin{cases} V_0(x^2/a^2 - 1) & |x| < a \\ 0 & |x| > a \end{cases}$$

۳۰. ذره‌ای به جرم m در پتانسیل نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی $V(x) = m\omega^2 x^2/2$ حرکت می‌کند.
(الف) انرژی حالت پایه، و

(ب) انرژی نخستین حالت برانگیخته

را هنگامی که اختلال کوچک $\hat{H}_p = \lambda\delta(x)$ با $\lambda \ll 1$ به پتانسیل اضافه می‌شود، تا اختلال مرتبه‌ی اول محاسبه کنید.

۳۱. ذره‌ای به جرم m در پتانسیل نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی $V(x) = m\omega^2 x^2/2$ حرکت می‌کند.
(الف) انرژی حالت پایه و

(ب) انرژی نخستین حالت برانگیخته

را هنگامی که اختلال کوچک $\hat{H}_p = \lambda\hat{x}^6$ با $\lambda \ll 1$ به پتانسیل اضافه می‌شود، تا اختلال مرتبه‌ی اول محاسبه کنید.

۳۲. ذره‌ای به جرم m در پتانسیل نوسانگر هماهنگ سه‌بعدی $V(x) = m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2)/2$ حرکت می‌کند. انرژی m امین حالت برانگیخته را هنگامی که اختلال کوچک $\hat{H}_p = \lambda\hat{X}^2\hat{Y}^2\hat{Z}^2$ با $\lambda \ll 1$ به پتانسیل اضافه می‌شود، تا اختلال مرتبه‌ی اول محاسبه کنید.

۳۳. به‌وسیله‌ی روش وردشی و با استفاده از دو تابع آزمون زیر:

$$Ae^{-\alpha|x|} \quad (\text{الف}) \quad A(1 + \alpha|x|)e^{-\alpha|x|} \quad (\text{ب})$$

انرژی حالت پایه‌ی ذره‌ای به جرم m که در پتانسیل یک‌بعدی $V(x) = \lambda|x|$ حرکت می‌کند را تخمین بزنید. α یک پارامتر مقیاس، λ یک ثابت و A ثابت بهنجارش است. نتیجه‌های به‌دست آمده را با هم مقایسه کنید.

۳۴. سه ذره‌ی تمایزپذیر با جرم یکسان m در یک جعبه‌ی پتانسیل یک‌بعدی با دیواره‌هایی صلب در $x = 0$ و $x = L$ محصور شده‌اند. اگر سه ذره تحت تأثیر پتانسیل جاذبه‌ی کوتاه‌برد و ضعیف

$$\hat{H}_p = -V_0[\delta(x_1 - x_2) + \delta(x_2 - x_3) + \delta(x_3 - x_1)]$$

قرار بگیرند آنگاه از اختلال مرتبه‌ی اول برای محاسبه‌ی ترازهای انرژی

(الف) حالت پایه

(ب) نخستین حالت برانگیخته

سیستم استفاده کنید.

۳۵. سه ذره‌ی تمایزپذیر با جرم یکسان m در پتانسیل نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی $\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^3 (p_i^2/2m + \frac{1}{2}m\omega^2 x_i^2)$ قرار دارند. اگر سه ذره تحت تأثیر پتانسیل جاذبه‌ی کوتاه‌برد و ضعیف

$$\hat{H}_p = -V_0 [\delta(x_1 - x_2) + \delta(x_2 - x_3) + \delta(x_3 - x_1)]$$

قرار بگیرند آنگاه از نظریه‌ی اختلال مرتبه‌ی اول برای محاسبه‌ی ترازهای انرژی (الف) حالت پایه و

(ب) نخستین حالت برانگیخته‌ی سیستم استفاده کنید.

۳۶. یک پوزیترونیم را در نظر بگیرید که تحت تأثیر میدان مغناطیسی ایستای ضعیف $\mathbf{B} = B(\mathbf{i} + \mathbf{k})$ صفحه‌ی xz قرار دارد که در آن B یک ثابت کوچک است. با چشم‌پوشی از برهمکنش اسپین-مدار، ترازهای انرژی حالت‌های $n = 2$ را تا اختلال مرتبه‌ی اول محاسبه کنید.

۳۷. یک فرفره‌ی متقارن کروی با گشتاورهای لختی اصلی I را در نظر بگیرید. (الف) ترازهای انرژی فرفره را بیابید.

(ب) با فرض آن که فرفره در حالت تکانه‌ی زاویه‌ای $l = 1$ قرار دارد، انرژی آن را هنگامی که اختلال ضعیف $\hat{H}_p = \frac{\mathcal{E}}{I} (\hat{L}_x^2 - \hat{L}_y^2)$ که در آن $\mathcal{E} \ll 1$ است، اضافه می‌شود تا اختلال مرتبه‌ی اول بیابید.

۳۸. مقدارهای تقریبی انرژی حالت پایه‌ی ذره‌ای به جرم m که در پتانسیل $V(x) = V_0|x|$ حرکت می‌کند و در آن $V_0 > 0$ است را با

(الف) روش وردشی (ب) تقریب WKB

تخمین بزنید. دو نتیجه را با هم مقایسه کنید.

۳۹. تصحیح نسبیتی حالت پایه‌ی یک ذره‌ی بدون اسپین به جرم m که در پتانسیل یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی حرکت می‌کند را تا اختلال مرتبه‌ی اول محاسبه کنید. راهنمایی: ابتدا باید نشان دهید که می‌توان هامیلتونی را به صورت $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_p$ نوشت که در آن $\hat{H}_0 = \hat{P}^2/(2m) + m\omega^2 \hat{X}^2/2$ است و $\hat{H}_p = -\hat{P}^4/(4m^3 c^2)$ جمله‌ی اصلی تصحیح نسبیتی است که می‌توان آن را به صورت یک اختلال در نظر گرفت.

۴۰. یک اتم هیدروژن را در نظر بگیرید که تحت تأثیر اختلال کوچک $\hat{H}_p = \lambda \hat{r}^2$ قرار می‌گیرد. از اختلال مرتبه‌ی اول برای محاسبه‌ی تصحیح انرژی

(الف) حالت پایه و

(ب) حالت $2p$ استفاده کنید.

۴۱. (الف) سهم ناشی از برهمکنش اسپین-مدار برای n مین حالت برانگیخته‌ی یک اتم پوزیترونیم را تا اختلال مرتبه‌ی اول محاسبه کنید.

- (ب) از نتیجه‌ی قسمت (الف) استفاده کنید و مقادیرهای عددی مربوط به جمله‌های تصحیح اسپین-مدار را برای تراز $2p$ به دست آورید و آنها را با انرژی $n = 2$ مقایسه کنید.
۴۲. با چشم‌پوشی از اسپین الکترون، انرژی تراز $n = 2$ یک اتم هیدروژن را هنگامی که تحت تأثیر میدان چهارقطبی ضعیف $\hat{H}_p = iQ(\hat{y}^2 - \hat{x}^2)$ که در آن Q یک عدد حقیقی و کوچک است ($Q \ll 1$)، تا اختلال مرتبه‌ی اول محاسبه کنید.
۴۳. ترازهای انرژی حالت‌های $n = 2$ پوزیترونیم در میدان الکتریکی خارجی و ضعیف \mathcal{E} در امتداد محور $z: \mathcal{E} = \mathcal{E}k$ را محاسبه کنید؛ پوزیترونیم از یک الکترون و یک پوزیترون تشکیل شده است که با برهمکنش الکتریکی مقیدند.
۴۴. (الف) سهم ناشی از برهمکنش اسپین-مدار مربوط به یک یون هیدروژن‌گونه که دارای Z پروتون است را تا اختلال مرتبه‌ی اول محاسبه کنید.
- (ب) از نتیجه‌ی قسمت (الف) استفاده کنید و تصحیح اسپین-مدار مربوط به حالت $2p$ یون کربن C^{5+} را بیابید و آن را با انرژی تراز $n = 2$ مقایسه کنید.
۴۵. دو ذره‌ی یکسان با اسپین $\frac{1}{2}$ در یک جعبه‌ی مکعبی به ضلع L محصورند.
- (الف) انرژی حالت پایه را هنگامی که دو ذره تحت تأثیر برهمکنش جاذبه‌ی کوتاه‌برد و ضعیف

$$\hat{V}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = -\frac{4}{3}\pi a^3 V_0 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$$

قرار می‌گیرند را تا اختلال مرتبه‌ی اول محاسبه کنید.

- (ب) مقدار عددی مربوط به انرژی به دست آمده در (الف) را به ازای $L = 10^{-10} \text{ m}$ ، $a = 10^{-12} \text{ m}$ ، $V_0 = 10^{-3} \text{ eV}$ و اینکه جرم هریک از ذره‌های جداگانه برابر جرم الکترون در نظر گرفته می‌شود، بیابید.

فصل دهم

نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان

۱-۱۰ مقدمه

تاکنون به هامیلتونی‌هایی پرداختیم که به صورت صریح به زمان بستگی نداشتند. اما در طبیعت هامیلتونی‌های وابسته به زمان بر بیشتر پدیده‌های کوانتومی حکم فرمایند. در این فصل قصد داریم تا روش‌های تقریبی که به هامیلتونی‌هایی که به صورت صریح به زمان بستگی دارند را بررسی کنیم.

برای مطالعه‌ی ساختار سیستم‌های مولکولی و اتمی باید بدانیم که چگونه تابش الکترومغناطیسی با این سیستم‌ها برهمکنش دارد. اساساً طیف‌نمایی مولکولی و اتمی به جذب و گسیل تابش الکترومغناطیسی توسط مولکول‌ها و اتم‌ها می‌پردازد. چون یک سیستم تابش را جذب یا گسیل می‌کند، گذارهایی از یک حالت به حالت دیگر را انجام می‌دهد.

نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان برای مطالعه‌ی فرآیندهای جذب و گسیل تابش به وسیله‌ی اتم‌ها یا به صورت عمومی‌تر، برای پرداختن به گذار سیستم‌های کوانتومی از یک تراز انرژی به تراز دیگر بسیار مفید است.

۲-۱۰ تصویرهای مکانیک کوانتومی

همانطور که در فصل ۲ دیده شد، نمایش‌های زیادی از تابع‌های موج و عملگرها در مکانیک کوانتومی وجود دارد. ارتباط بین نمایش‌های مختلف توسط تبدیلات یکانی فراهم می‌شود. هر دسته از نمایش‌ها (که یک تصویر نیز نامیده می‌شود) در روشی که به تحول زمانی سیستم می‌پردازد، از دسته‌ی نمایش‌های دیگر متفاوت است.

در این بخش نگاهی به تصویرهایی می‌اندازیم که به دفعات در مکانیک کوانتومی به آنها بر می‌خوریم: تصویر شرودینگر، تصویر هایزنبرگ و تصویر برهمکنش. تصویر شرودینگر هنگام توصیف پدیده‌هایی با هامیلتونی مستقل از زمان مفید است در حالی که تصویرهای برهمکنش و هایزنبرگ هنگام توصیف پدیده‌هایی با هامیلتونی‌های وابسته به زمان مفیدند.

۱-۲-۱۰ تصویر شرودینگر

در توصیف دینامیک کوانتومی، تاکنون از تصویر شرودینگر استفاده می‌کردیم که در آن بردارهای حالت به صورت صریح به زمان بستگی دارند ولی عملگرها به صورت صریح به زمان وابسته نیستند:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (1-10)$$

که در آن $|\psi(t)\rangle$ حالت سیستم را در تصویر شرودینگر نمایش می‌دهد. در فصل ۳ دیدیم که می‌توان تحول زمانی حالت $|\psi(t)\rangle$ را به صورت زیر به وسیله‌ی انتشارگر (یا عملگر تحول زمانی) $\hat{U}(t, t_0)$ بیان کرد:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (2-10)$$

با

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-i(t-t_0)\hat{H}/\hbar} \quad (3-10)$$

عملگر $\hat{U}(t, t_0)$ یکانی است:

$$\hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) = \hat{I} \quad (4-10)$$

و در ویژگی‌های زیر صدق می‌کند:

$$\hat{U}(t, t) = \hat{I} \quad (5-10)$$

$$\hat{U}^\dagger(t, t_0) = \hat{U}^{-1}(t, t_0) = \hat{U}(t_0, t) \quad (6-10)$$

$$\hat{U}(t_1, t_2) \hat{U}(t_2, t_3) = \hat{U}(t_1, t_3) \quad (7-10)$$

۲-۲-۱۰ تصویر هایزنبرگ

در این تصویر، بردارهای حالت بستگی زمانی ندارند. تصویر هایزنبرگ از تصویر شرودینگر و با اعمال \hat{U} بر $|\psi(t)\rangle_H$ به دست می‌آید:

$$|\psi(t)\rangle_H = \hat{U}^\dagger(t) |\psi(t)\rangle = |\psi(0)\rangle \quad (8-10)$$

که در آن می‌توان $|\psi(t)\rangle$ و $\hat{U}^\dagger(t)$ را به ترتیب از $(۲-۱۰)$ و $(۳-۱۰)$ و با قرار دادن $t_0 = 0$ به دست آورد: $\hat{U}^\dagger(t) = \hat{U}^\dagger(t, t_0 = 0) = e^{it\hat{H}/\hbar}$ و $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle$ با $\hat{U}(t) = e^{-it\hat{H}/\hbar}$. بنابراین می‌توانیم $(۸-۱۰)$ را به صورت زیر بنویسیم:

$$|\psi(t)\rangle_H = e^{it\hat{H}/\hbar}|\psi(t)\rangle \quad (۹-۱۰)$$

چون $|\psi\rangle_H$ نسبت به زمان ثابت است، داریم: $d|\psi\rangle_H/dt = 0$. حال ببینیم که چگونه مقدار چشمداشتی عملگر \hat{A} در حالت $|\psi(t)\rangle$ با گذشت زمان تحول می‌یابد:

$$\begin{aligned} \langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle &= \langle\psi(0)|e^{it\hat{H}/\hbar}\hat{A}e^{-it\hat{H}/\hbar}|\psi(0)\rangle \\ &= \langle\psi(0)|\hat{A}_H(t)|\psi(0)\rangle = {}_H\langle\psi|\hat{A}_H(t)|\psi\rangle_H \end{aligned} \quad (۱۰-۱۰)$$

که در آن $\hat{A}_H(t)$ از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\hat{A}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t)\hat{A}\hat{U}(t) = e^{it\hat{H}/\hbar}\hat{A}e^{-it\hat{H}/\hbar} \quad (۱۱-۱۰)$$

معادله‌ی $(۱۰-۱۰)$ نشان می‌دهد که مقدار چشمداشتی یک عملگر در تصویرهای شرودینگر و هایزنبرگ یکسان است. از $(۱۰-۱۰)$ و $(۱۱-۱۰)$ می‌بینیم که هر دو تصویر شرودینگر و هایزنبرگ در $t = 0$ یک نتیجه را می‌دهند زیرا $|\psi(0)\rangle_H = |\psi\rangle_H$ و $\hat{A}_H(0) = \hat{A}$ است.

۱-۲-۲-۱۰ معادله‌ی حرکت هایزنبرگ

حال معادله‌ی حرکت حاکم بر تحول زمانی عملگرها را در تصویر هایزنبرگ به دست می‌آوریم. با فرض آن که \hat{A} به صورت صریح به زمان بستگی ندارد (یعنی $\partial\hat{A}/\partial t = 0$ است) و با توجه به این که $\hat{U}(t)$ یکانی است، داریم:

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{A}_H(t)}{dt} &= \frac{\partial\hat{U}^\dagger(t)}{\partial t}\hat{A}\hat{U}(t) + \hat{U}^\dagger(t)\hat{A}\frac{\partial\hat{U}(t)}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar}\hat{U}^\dagger\hat{H}\hat{U}\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U} + \frac{1}{i\hbar}\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U}\hat{U}^\dagger\hat{H}\hat{U} \\ &= \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}_H, \hat{U}^\dagger\hat{H}\hat{U}] \end{aligned} \quad (۱۲-۱۰)$$

که در آن از $(۳-۱۰)$ برای نوشتن $\partial\hat{U}(t)/\partial t = \hat{H}\hat{U}/i\hbar$ و $\partial\hat{U}^\dagger(t)/\partial t = -\hat{U}^\dagger\hat{H}/i\hbar$ استفاده کرده‌ایم. چون $\hat{U}(t)$ و \hat{H} جابجا می‌شوند، داریم: $\hat{U}^\dagger(t)\hat{H}\hat{U}(t) = \hat{H}$. از این رو می‌توانیم $(۱۲-۱۰)$ را به صورت زیر بنویسیم:

$$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}_H, \hat{H}] \quad (۱۳-۱۰)$$

که معادله‌ی حرکت هایزنبرگ است و نقش معادله‌ی شرودینگر را در تصویر هایزنبرگ ایفا می‌کند. چون تصویرهای شرودینگر و هایزنبرگ معادل‌اند، می‌توانیم از هر یک از این تصویرها برای توصیف حالت سیستم کوانتومی مورد نظر استفاده کنیم. به صورت کلی، حل معادله‌ی هایزنبرگ (۱۰-۱۳) مشکل است.

توجه کنید که ساختار معادله‌ی هایزنبرگ (۱۰-۱۳) مشابه با معادله‌ی حرکت کلاسیکی متغیر A است که به صورت صریح به زمان بستگی ندارد: $dA/dt = \{A, H\}$ که در آن $\{A, H\}$ براکت پواسون بین A و H است (فصل ۳ را ببینید).

۱۰-۲-۳ تصویر برهمکنش

تصویر برهمکنش که تصویر دیراک نیز نامیده می‌شود، برای توصیف پدیده‌های کوانتومی با هامیلتونی‌هایی که به صورت صریح به زمان بستگی دارند، مناسب است. در این تصویر، هم بردارهای حالت و هم عملگرها با گذشت زمان تحول می‌یابند. بنابراین باید معادله‌ی حرکت بردارهای حالت و عملگرها را بیابیم.

۱۰-۳-۲-۱ معادله‌ی حرکت بردارهای حالت

بردارهای حالت در تصویر برهمکنش به صورت زیر برحسب حالت‌های شرودینگر $|\psi(t)\rangle$ تعریف می‌شوند:

$$|\psi(t)\rangle_I = e^{it\hat{H}_0/\hbar} |\psi(t)\rangle \quad (14-10)$$

اگر $t = 0$ باشد آنگاه داریم: $|\psi(0)\rangle_I = |\psi(0)\rangle$. معادله‌ی شرودینگر (۱۰-۱۱) با $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ بر تحول زمانی $|\psi(t)\rangle$ حکم فرماست که در آن \hat{H}_0 مستقل از زمان است ولی \hat{V} می‌تواند به زمان بستگی داشته باشد. برای یافتن تحول زمانی $|\psi(t)\rangle_I$ به مشتق زمانی (۱۰-۱۴) نیاز داریم:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle_I}{dt} &= -\hat{H}_0 e^{it\hat{H}_0/\hbar} |\psi(t)\rangle + e^{it\hat{H}_0/\hbar} \left(i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} \right) \\ &= -\hat{H}_0 |\psi(t)\rangle_I + e^{it\hat{H}_0/\hbar} \hat{H} |\psi(t)\rangle \end{aligned} \quad (15-10)$$

که در آن از (۱۰-۱۱) استفاده کرده‌ایم. چون $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ است و

$$e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{V} = \left(e^{it\hat{H}_0/\hbar} \hat{V} e^{-it\hat{H}_0/\hbar} \right) e^{it\hat{H}_0/\hbar} = \hat{V}_I(t) e^{it\hat{H}_0/\hbar} \quad (16-10)$$

با

$$\hat{V}_I(t) = e^{it\hat{H}_0/\hbar} \hat{V} e^{-it\hat{H}_0/\hbar} \quad (17-10)$$

می‌توانیم (۱۰-۱۵) را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle_I}{dt} = -\hat{H}_0 |\psi(t)\rangle_I + \hat{H}_0 e^{it\hat{H}_0/\hbar} |\psi(t)\rangle + \hat{V}_I(t) e^{it\hat{H}_0/\hbar} |\psi(t)\rangle \quad (18-10)$$

یا

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle_I}{dt} = \hat{V}_I(t)|\psi(t)\rangle_I \quad (۱۹-۱۰)$$

که معادله‌ی شرودینگر در تصویر برهمکنش است و نشان می‌دهد که برهمکنش $\hat{V}_I(t)$ بر تحول زمانی بردار حالت حکم فرما است.

۲-۳-۲-۱۰ معادله‌ی حرکت عملگرها

همانطور که در (۱۷-۱۰) نشان داده شد، نمایش برهمکنش عملگر $\hat{A}_I(t)$ برحسب نمایش شرودینگر آن از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\hat{A}_I(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \quad (۲۰-۱۰)$$

با محاسبه‌ی مشتق زمانی $\hat{A}_I(t)$ و با توجه به این که $\partial \hat{A} / \partial t = 0$ است، می‌توانیم نشان دهیم که \hat{H}_0 بر تحول زمانی $\hat{A}_I(t)$ حکم فرما است:

$$\frac{d\hat{A}_I(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}_I(t), \hat{H}_0] \quad (۲۱-۱۰)$$

این معادله مشابه با معادله‌ی حرکت هایزنبرگ (۱۳-۱۰) است به استثنای آن که \hat{H}_0 جایگزین \hat{H} شده است. می‌توان اختلاف اساسی بین تصویرهای هایزنبرگ و برهمکنش را از مقایسه‌ی (۹-۱۰) با (۱۴-۱۰) و (۱۱-۱۰) با (۲۰-۱۰) نتیجه گرفت: در تصویر هایزنبرگ \hat{H} در نما ظاهر می‌شود در حالی که در تصویر برهمکنش \hat{H}_0 ظاهر می‌شود.

در پایان، دیدیم که در تصویر شرودینگر، حالت‌ها به زمان بستگی دارند ولی عملگرها به زمان بستگی ندارند. در تصویر هایزنبرگ، تنها عملگرها به صورت صریح به زمان بستگی دارند و بردارهای حالت با گذشت زمان تغییر نمی‌کنند. تصویر برهمکنش، حالتی بین تصویرهای شرودینگر و هایزنبرگ است زیرا هم بردارهای حالت و هم عملگرها با گذشت زمان تحول می‌یابند.

۳-۱۰ نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان

در اینجا تنها آن دسته از پدیده‌هایی را در نظر می‌گیریم که می‌توان آنها را به دو بخش تقسیم نمود، یک بخش مستقل از زمان \hat{H}_0 و یک بخش وابسته به زمان $\hat{V}(t)$ که در مقایسه با \hat{H}_0 کوچک است:

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t) \quad (۲۲-۱۰)$$

که در آن فرض می‌شود \hat{H}_0 (که سیستم مختل نشده را توصیف می‌کند) دارای جواب‌های دقیق و معلوم است. با این جداسازی (هامیلتونی) در مسأله‌ی نوعی زیر برمی‌خوریم. سیستمی را در نظر بگیرید که در حالت مختل نشده توسط هامیلتونی مستقل از زمان \hat{H}_0 توصیف می‌شود که جواب‌های آن (ویژه‌مقدارهای E_n و ویژه‌حالت‌های $|\psi_n\rangle$) معلوم‌اند:

$$\hat{H}_0 |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad (۲۳-۱۰)$$

و عمومی‌ترین بردارهای حالت آن توسط حالت‌های مانای زیر به دست می‌آیند:

$$|\Psi_n(t)\rangle = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi_n\rangle = e^{-iE_n t/\hbar} |\psi_n\rangle \quad (۲۴-۱۰)$$

در بازه‌ی زمانی $0 \leq t \leq \tau$ ، سیستم را تحت تأثیر اختلال خارجی وابسته به زمان $\hat{V}(t)$ که در مقایسه با \hat{H}_0 کوچک است، قرار می‌دهیم:

$$\hat{V}(t) = \begin{cases} \hat{V}(t) & 0 \leq t \leq \tau \\ 0 & t < 0, t > \tau \end{cases} \quad (۲۵-۱۰)$$

در طول بازه‌ی زمانی $0 \leq t \leq \tau$ ، هامیلتونی سیستم برابر است با $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$ ، و معادله‌ی شرودینگر متناظر به صورت زیر است:

$$i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = (\hat{H}_0 + \hat{V}(t)) |\Psi(t)\rangle \quad (۲۶-۱۰)$$

که در آن $\hat{V}(t)$ برهمکنش سیستم با منبع خارجی اختلال را مشخص می‌کند.

پرسشی که در اینجا مطرح می‌شود این است که چگونه $\hat{V}(t)$ سیستم را تحت تأثیر قرار می‌دهد؟ در پاسخ باید گفت هنگامی که سیستم با $\hat{V}(t)$ برهمکنش دارد، انرژی را جذب یا گسیل می‌کند. این فرآیند به صورت اجتناب ناپذیری موجب می‌شود سیستم گذارهایی را از یک ویژه‌حالت مختل نشده به ویژه‌حالت دیگر انجام دهد. کار اصلی نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان پاسخ دادن به این پرسش است: اگر سیستم در ابتدا در ویژه‌حالت (مختل نشده‌ی) $|\psi_i\rangle$ هامیلتونی \hat{H}_0 قرار داشته باشد آنگاه احتمال این که سیستم در زمان بعدی در ویژه‌حالت مختل نشده‌ی دیگر $|\psi_f\rangle$ یافت شود، چقدر است؟

برای این که زمینه‌ی پاسخ دادن به این پرسش فراهم شود، باید به دنبال جواب‌های معادله‌ی شرودینگر (۲۶-۱۰) بگردیم. روش استاندارد برای حل (۲۶-۱۰) عبارت است از بسط $|\Psi(t)\rangle$ برحسب ضریب

بسط $c_n(t)$:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} |\psi_n\rangle \quad (۲۷-۱۰)$$

و سپس وارد کردن آن در (۲۶-۱۰) برای یافتن $c_n(t)$ تا مرتبه‌های مختلف تقریب. به جای پیروی از این روند و با توجه به این که با پتانسیل‌های وابسته به زمان سروکار داریم، بهتر است (۲۶-۱۰) را در تصویر برهمکنش (۱۹-۱۰) حل کنیم:

$$i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle_I}{dt} = \hat{V}_I(t)|\Psi(t)\rangle_I \quad (28-10)$$

که در آن $|\Psi(t)\rangle_I = e^{it\hat{H}_0/\hbar}|\psi(t)\rangle$ و $\hat{V}_I(t) = e^{it\hat{H}_0/\hbar}\hat{V}(t)e^{-it\hat{H}_0/\hbar}$. می‌توان معادله‌ی تحول زمانی $|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_i)|\Psi(t_i)\rangle$ را در تصویر برهمکنش به صورت

$$|\Psi(t)\rangle_I = e^{it\hat{H}_0/\hbar}|\Psi(t)\rangle = e^{it\hat{H}_0/\hbar}\hat{U}(t, t_i)|\Psi(t_i)\rangle = e^{it\hat{H}_0/\hbar}\hat{U}(t, t_i)e^{-i\hat{H}_0 t_i/\hbar}|\Psi(t_i)\rangle_I \quad (29-10)$$

یا

$$|\Psi(t)\rangle_I = \hat{U}_I(t, t_i)|\Psi(t_i)\rangle_I \quad (30-10)$$

نوشت که در آن عملگر تحول زمانی در تصویر برهمکنش به صورت زیر است:

$$\hat{U}_I(t, t_i) = e^{it\hat{H}_0/\hbar}\hat{U}(t, t_i)e^{-i\hat{H}_0 t_i/\hbar} \quad (31-10)$$

با وارد کردن (۳۰-۱۰) در (۲۸-۱۰) به معادله‌ی زیر می‌رسیم:

$$i\hbar \frac{d\hat{U}_I(t, t_i)}{dt} = \hat{V}_I(t)\hat{U}_I(t, t_i) \quad (32-10)$$

جواب‌های این معادله با شرط اولیه‌ی $\hat{U}_I(t_i, t_i) = \hat{I}$ از معادله‌ی انتگرالی زیر به دست می‌آید:

$$\hat{U}_I(t, t_i) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^t \hat{V}_I(t')\hat{U}_I(t', t_i)dt' \quad (33-10)$$

نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان جواب‌هایی تقریبی برای این معادله‌ی انتگرالی فراهم می‌کند که به فرض کوچک بودن $\hat{V}_I(t)$ و انجام تکراری محاسبات وابسته است. تقریب مرتبه‌ی نخست از وارد کردن $\hat{U}_I(t', t_i) = \mathbb{1}$ در انتگرال (۳۳-۱۰) به دست می‌آید که به $\hat{U}_I^{(1)}(t, t_i) = \mathbb{1} - (i/\hbar) \int_{t_i}^t \hat{V}_I(t')dt'$ می‌انجامد. با جاگذاری $\hat{U}_I(t', t_i) = \hat{U}_I^{(1)}(t', t_i)$ در انتگرال (۳۳-۱۰)، تقریب مرتبه‌ی دوم را به دست می‌آوریم:

$$\hat{U}_I^{(2)}(t, t_i) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^t \hat{V}_I(t')dt' + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_i}^t \hat{V}_I(t_1)dt_1 \int_{t_i}^{t_1} \hat{V}_I(t_2)dt_2 \quad (34-10)$$

تقریب مرتبه‌ی سوم از جاگذاری $\hat{U}_I^{(2)}(t, t_i)$ در (۳۳-۱۰) به دست می‌آید و به همین ترتیب. تکرار این فرآیند تکراری نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\begin{aligned} \hat{U}_I(t, t_i) = & 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^t \hat{V}_I(t') dt' + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_i}^t \hat{V}_I(t_1) dt_1 \int_{t_i}^{t_1} \hat{V}_I(t_2) dt_2 + \dots \\ & + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_i}^t \hat{V}_I(t_1) dt_1 \int_{t_i}^{t_1} \hat{V}_I(t_2) dt_2 \int_{t_i}^{t_2} \hat{V}_I(t_3) dt_3 \dots \int_{t_i}^{t_{n-1}} \hat{V}_I(t_n) dt_n + \dots \end{aligned} \quad (35-10)$$

این سری که به‌عنوان سری دایسون شناخته می‌شود، به ما امکان محاسبه‌ی بردار حالت تا اختلال مرتبه‌ی مورد نظر را می‌دهد.

اکنون آماده‌ایم تا احتمال گذار را محاسبه کنیم. می‌توان این احتمال را با قرار دادن عنصرهای ماتریسی (۳۵-۱۰) بین ویژه‌حالت‌های \hat{H}_0 به دست آورد. نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان که در آن فرض می‌شود جواب‌های مسأله‌ی ویژه‌مقدار مختل نشده‌ی (۲۳-۱۰) معلوم‌اند، اساساً به محاسبه‌ی احتمال گذار بین ویژه‌حالت‌های مختل نشده‌ی $|\psi_n\rangle$ سیستم می‌پردازد.

۱-۳-۱۰ احتمال گذار

احتمال گذار متناظر با یک گذار از حالت مختل نشده‌ی اولیه‌ی $|\psi_i\rangle$ به حالت مختل نشده‌ی دیگر $|\psi_f\rangle$ از (۳۵-۱۰) به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} P_{if}(t) = & |\langle \psi_f | \hat{U}_I(t, t_i) | \psi_i \rangle|^2 = \left| \langle \psi_f | \psi_i \rangle - \frac{i}{\hbar} \int_0^t e^{i\omega_f t'} \langle \psi_f | \hat{V}(t') | \psi_i \rangle dt' \right. \\ & + \left. \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_n \int_0^t e^{i\omega_f t_1} \langle \psi_f | \hat{V}(t_1) | \psi_n \rangle dt_1 \int_0^{t_1} e^{i\omega_n t_2} \langle \psi_n | \hat{V}(t_2) | \psi_i \rangle dt_2 + \dots \right|^2 \end{aligned} \quad (36-10)$$

که در آن از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که

$$\langle \psi_f | \hat{V}_I(t') | \psi_i \rangle = \langle \psi_f | e^{i\hat{H}_0 t'/\hbar} \hat{V}(t') e^{-i\hat{H}_0 t'/\hbar} | \psi_i \rangle = \langle \psi_f | \hat{V}(t') | \psi_i \rangle \exp(i\omega_{fi} t') \quad (37-10)$$

که در آن ω_{fi} بسامد گذار بین ترازهای اولیه و نهایی i و f است:

$$\omega_{fi} = \frac{E_f - E_i}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} (\langle \psi_f | \hat{H}_0 | \psi_f \rangle - \langle \psi_i | \hat{H}_0 | \psi_i \rangle) \quad (38-10)$$

به صورت زیر می‌توان احتمال گذار (۳۶-۱۰) را برحسب ضریب‌های بسط $c_n(t)$ معرفی شده در (۲۷-۱۰) نوشت:

$$P_{if}(t) = \left| c_f^{(0)} + c_f^{(1)}(t) + c_f^{(2)}(t) + \dots \right|^2 \quad (39-10)$$

که در آن

$$c_f^{(0)} = \langle \psi_f | \psi_i \rangle = \delta_{f,i}, \quad c_f^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle \psi_f | \hat{V}(t') | \psi_i \rangle e^{i\omega_{fi}t'} dt', \quad \dots \quad (40-10)$$

احتمال گذار مرتبه‌ی نخست برای $|\psi_f\rangle \rightarrow |\psi_i\rangle$ با $i \neq f$ (و ازاین رو $\langle \psi_f | \psi_i \rangle = 0$) با به پایان رساندن (۳۶-۱۰) تا مرتبه‌ی نخست برحسب $\hat{V}_I(t)$ ، به دست می‌آید:

$$P_{if}(t) = \left| -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle \psi_f | \hat{V}(t') | \psi_i \rangle e^{i\omega_{fi}t'} dt' \right|^2 \quad (41-10)$$

اصولاً می‌توانیم از (۳۶-۱۰) برای محاسبه‌ی احتمال گذار تا هر مرتبه‌ای برحسب $\hat{V}_I(t)$ استفاده کنیم. به هر حال، جمله‌های بالاتر از مرتبه‌ی نخست به سرعت پیچیده می‌شوند. در بسیاری از مسأله‌های فیزیک اتمی و هسته‌ای، معمولاً مرتبه‌ی نخست (۴۱-۱۰) کفایت می‌کند. در ادامه، قصد داریم تا (۴۱-۱۰) را برای محاسبه‌ی احتمال گذار در دو حالت که بعداً هنگام پرداختن به برهمکنش اتم‌ها با تابش مفید واقع می‌شوند، به کار ببریم: اختلال ثابت و اختلال هماهنگ.

۲-۳-۱۰ احتمال گذار برای یک اختلال ثابت

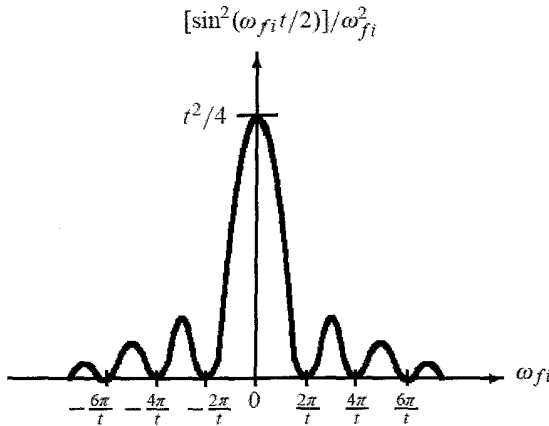
در حالتی که در آن \hat{V} به زمان بستگی ندارد، (۴۱-۱۰) به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$P_{if}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \langle \psi_f | \hat{V} | \psi_i \rangle \int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} dt' \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \langle \psi_f | \hat{V} | \psi_i \rangle \right|^2 \left| \frac{e^{i\omega_{fi}t} - 1}{\omega_{fi}} \right|^2 \quad (42-10)$$

که با استفاده از $|e^{i\theta} - 1|^2 = 4 \sin^2(\theta/2)$ به رابطه‌ی زیر کاهش می‌یابد:

$$P_{if}(t) = \frac{4 \left| \langle \psi_f | \hat{V} | \psi_i \rangle \right|^2}{\hbar^2 \omega_{fi}^2} \sin^2 \left(\frac{\omega_{fi}t}{2} \right) \quad (43-10)$$

این احتمال گذار، به صورت تابعی از زمان، یک تابع نوسانی سینوسی با دوره‌ی $2\pi/\omega_{fi}$ است. همانطور که در شکل ۱-۱۰ نشان داده شده است، احتمال گذار برحسب تابعی از ω_{fi} دارای یک طرح تداخلی است: تنها در نزدیکی $\omega_{fi} \simeq 0$ قابل ملاحظه است و با دور شدن ω_{fi} از صفر به سرعت کاهش می‌یابد



شکل ۱۰-۱ نمودار $[\sin^2(\omega_{fi}t/2)]/\omega_{fi}^2$ برحسب ω_{fi} به‌ازای مقدار ثابت t ؛ $\omega_{fi} = (E_f - E_i)/\hbar$

(در اینجا به‌ازای t ثابت، فرض کرده‌ایم که ω_{fi} یک متغیر پیوسته است یعنی پیوستاری از حالت‌های نهایی را در نظر گرفته‌ایم که در ادامه با جزئیات بیشتری به آن خواهیم پرداخت). این بدان معنی است که احتمال گذار یافتن سیستم در حالت $|\psi_f\rangle$ با انرژی E_f تنها زمانی بیشترین مقدار را دارد که $E_i \simeq E_f$ باشد یا $\omega_{fi} \simeq 0$ باشد. ارتفاع و پهنای قله‌ی اصلی (که مرکز آن حول $\omega_{fi} = 0$ واقع است) به ترتیب متناسب با t^2 و $1/t$ هستند. بنابراین مساحت زیر منحنی متناسب با t است. چون بیشتر مساحت، زیر قله‌ی اصلی قرار دارد، احتمال گذار متناسب با t است. بنابراین احتمال گذار با گذشت زمان به‌صورت خطی افزایش می‌یابد. با افزایش زمان، قله‌ی مرکزی باریک‌تر و بلندتر می‌شود که دقیقاً ویژگی یک تابع دلتا است. بنابراین همانطور که در ادامه خواهیم دید، در حد $t \rightarrow \infty$ ، احتمال گذار شکل یک تابع دلتا را به خود می‌گیرد. با میل کردن $t \rightarrow \infty$ ، می‌توانیم از رابطه‌ی مجانبی (پیوست الف)

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2(yt)}{\pi y^2 t} = \delta(y) \quad (44-10)$$

برای نوشتن عبارت زیر استفاده می‌کنیم:

$$\frac{1}{(\frac{1}{\hbar}\omega_{fi})^2} \sin^2\left(\frac{\omega_{fi}t}{2}\right) = 2\pi\hbar\delta(\hbar\omega_{fi}) \quad (45-10)$$

زیرا $\delta(\omega_{fi}/2) = 2\hbar\delta(\hbar\omega_{fi})$ است. حال با توجه به این که $\hbar\omega_{fi} = E_f - E_i$ و از این رو $\delta(\hbar\omega_{fi}) = \delta(E_f - E_i)$ است، می‌توانیم (۴۳-۱۰) را در حد زمان‌های طولانی به رابطه‌ی زیر کاهش دهیم:

$$P_{if}(t) = \frac{2\pi t}{\hbar} \left| \langle \psi_f | \hat{V} | \psi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i) \quad (46-10)$$

بنابراین آهنگ گذار که به صورت احتمال گذار در واحد زمان تعریف می‌شود، از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\Gamma_{if} = \frac{P_{if}(t)}{t} = \frac{\gamma\pi}{\hbar} \left| \langle \psi_f | \hat{V} | \psi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i) \quad (۴۷-۱۰)$$

جمله‌ی دلتای $\delta(E_f - E_i)$ پایستگی انرژی را تضمین می‌کند: در حد $t \rightarrow \infty$ ، آهنگ گذار تنها بین حالت‌هایی با انرژی مساوی، غیرصفر است. از این رو یک اختلال ثابت (مستقل از زمان) نه انرژی سیستم را می‌گیرد و نه انرژی آن را تأمین می‌کند بلکه به سادگی موجب گذارهای پایسته‌ی انرژی می‌شود.

گذار به پیوستاری از حالت‌های نهایی

حال آهنگ گذار وابسته به یک گذار از حالت اولیه‌ی $|\psi_i\rangle$ به پیوستاری از حالت‌های نهایی $|\psi_f\rangle$ را محاسبه می‌کنیم. اگر $\rho(E_f)$ چگالی حالت‌های نهایی (تعداد حالت‌ها در واحد بازه‌ی انرژی) باشد آنگاه تعداد حالت‌های نهایی در بازه‌ی انرژی E_f و $E_f + dE_f$ برابر با $\rho(E_f)dE_f$ است. آنگاه می‌توان آهنگ گذار کل W_{if} را از (۴۷-۱۰) به دست آورد:

$$W_{if} = \int \frac{P_{if}(t)}{t} \rho(E_f) dE_f = \frac{\gamma\pi}{\hbar} \left| \langle \psi_f | \hat{V} | \psi_i \rangle \right|^2 \int \rho(E_f) \delta(E_f - E_i) dE_f \quad (۴۸-۱۰)$$

یا

$$W_{if} = \frac{\gamma\pi}{\hbar} \left| \langle \psi_f | \hat{V} | \psi_i \rangle \right|^2 \rho(E_i) \quad (۴۹-۱۰)$$

این رابطه، قاعده‌ی طلایی فرمی نامیده می‌شود و بیان می‌کند که در حالت یک اختلال ثابت، اگر به اندازه‌ی کافی صبر کنیم آنگاه آهنگ گذار کل مقدار ثابتی (مستقل از زمان) می‌شود.

۳-۳-۱۰ احتمال گذار برای یک اختلال هماهنگ

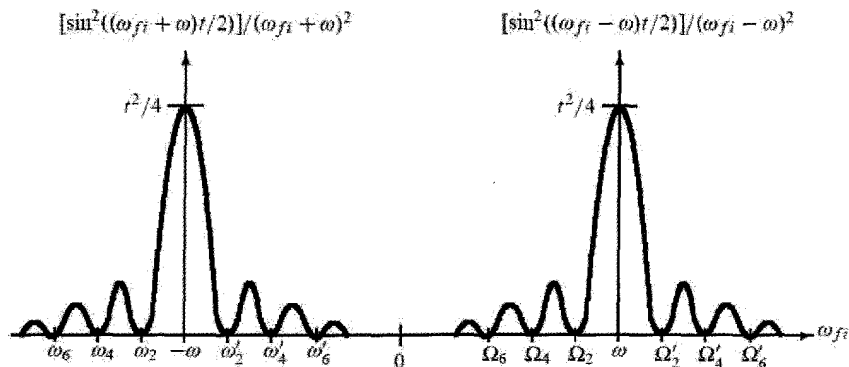
حال اختلالی را در نظر بگیرید که به صورت هماهنگ به زمان (یعنی زمان بین روشن و خاموش شدن اختلال) بستگی داشته باشد:

$$\hat{V}(t) = \hat{v} e^{i\omega t} + \hat{v}^\dagger e^{-i\omega t} \quad (۵۰-۱۰)$$

که در آن \hat{v} یک عملگر مستقل از زمان است. به عنوان مثال، با چنین اختلالی هنگامی روبرو می‌شویم که ذره‌های باردار (مثلاً الکترون‌ها) با یک میدان الکترومغناطیسی برهمکنش می‌کنند. این اختلال موجب گذارهای سیستم از یک حالت مانا به حالت مانای دیگر می‌شود.

می‌توان احتمال گذار متناظر با این اختلال را از (۴۱-۱۰) به دست آورد:

$$P_{if}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \langle \psi_f | \hat{v} | \psi_i \rangle \int_0^t e^{i(\omega_{fi} + \omega)t'} dt' + \langle \psi_f | \hat{v}^\dagger | \psi_i \rangle \int_0^t e^{i(\omega_{fi} - \omega)t'} dt' \right|^2 \quad (۵۱-۱۰)$$



شکل ۱۰-۲ نمودار $[\sin^2((\omega_{fi} \pm \omega)t/2)] / (\omega_{fi} \pm \omega)^2$ برحسب ω_{fi} به ازای مقدار ثابت t که در آن $\Omega'_n = \omega + n\pi/t$ و $\Omega_n = \omega - n\pi/t$, $\omega'_n = -\omega + n\pi/t$, $\omega_n = -\omega - n\pi/t$

با چشم‌پوشی از جمله‌های متقاطع به این خاطر که در مقایسه با دو جمله‌ی دیگر قابل اغماض هستند (زیرا گذارهای ادامه‌داری را القاء نمی‌کنند)، می‌توانیم این عبارت را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$P_{if}(t) = \frac{1}{\hbar^2} |\langle \psi_f | \hat{v} | \psi_i \rangle|^2 \left| \frac{e^{i(\omega_{fi} + \omega)t} - 1}{\omega_{fi} + \omega} \right|^2 + \frac{1}{\hbar^2} |\langle \psi_f | \hat{v}^\dagger | \psi_i \rangle|^2 \left| \frac{e^{i(\omega_{fi} - \omega)t} - 1}{\omega_{fi} - \omega} \right|^2 \quad (52-10)$$

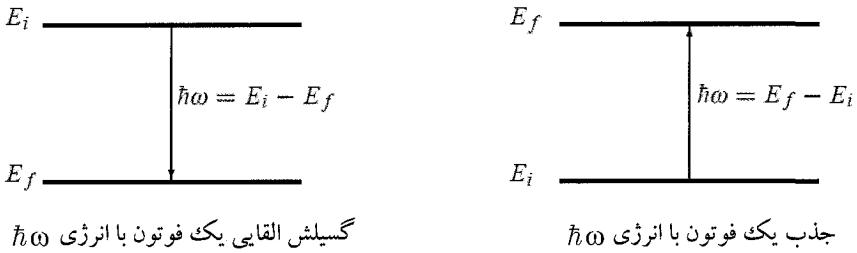
که با استفاده از $|e^{i\theta} - 1|^2 = 4 \sin^2(\theta/2)$ به رابطی زیر کاهش می‌یابد:

$$P_{if}(t) = \frac{4}{\hbar^2} \left[|\langle \psi_f | \hat{v} | \psi_i \rangle|^2 \frac{\sin^2((\omega_{fi} + \omega)t/2)}{(\omega_{fi} + \omega)^2} + |\langle \psi_f | \hat{v}^\dagger | \psi_i \rangle|^2 \frac{\sin^2((\omega_{fi} - \omega)t/2)}{(\omega_{fi} - \omega)^2} \right] \quad (53-10)$$

همانطور که در شکل ۱۰-۲ نشان داده شده است، احتمال گذار در هر یک از حالت‌های $\omega_{fi} = -\omega$ که مقدار بیشینه‌ی آن $P_{if}(t) = (t^2/4\hbar^2) |\langle \psi_f | \hat{v} | \psi_i \rangle|^2$ یا $\omega_{fi} = \omega$ که مقدار بیشینه‌ی آن $P_{if}(t) = (t^2/4\hbar^2) |\langle \psi_f | \hat{v}^\dagger | \psi_i \rangle|^2$ است، دو قله دارد که شرط تشدید هستند. این بدان معنی است که احتمال گذار تنها زمانی بیشترین مقدار است که بسامد میدان اختلالی نزدیک به $\pm\omega_{fi}$ باشد. با دور شدن ω از $\pm\omega_{fi}$ به سرعت کاهش می‌یابد.

همانطور که در (۱۰-۴۳) نشان داده شد، توجه کنید که عبارت (۱۰-۵۳) مشابه با عبارت به دست آمده برای یک اختلال ثابت است. با استفاده از (۱۰-۴۵) می‌توانیم (۱۰-۵۳) را در حد $t \rightarrow \infty$ به رابطی زیر کاهش دهیم:

$$\Gamma_{if} = \frac{\pi}{\hbar} |\langle \psi_f | \hat{v} | \psi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega) + \frac{\pi}{\hbar} |\langle \psi_f | \hat{v}^\dagger | \psi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad (54-10)$$

شکل ۳-۱۰ گسیلش القایی و جذب یک فوتون با انرژی $\hbar\omega$.

این آهنگ گذار تنها زمانی غیرصفر است که هر یک از شرط‌های زیر برآورده شوند:

$$E_f = E_i - \hbar\omega \quad (۵۵-۱۰)$$

$$E_f = E_i + \hbar\omega \quad (۵۶-۱۰)$$

این دو شرط نمی‌توانند به‌طور همزمان برآورده شوند. معنی فیزیکی این شرط‌ها در ادامه توضیح داده می‌شود. شرط نخست $E_f = E_i - \hbar\omega$ بیان می‌کند که سیستم در ابتدا برانگیخته است زیرا انرژی نهایی آن کوچک‌تر از انرژی اولیه است. همانطور که در شکل ۳-۱۰ نشان داده شده است، هنگام اعمال اختلال، سیستم با دادن یک فوتون با انرژی $\hbar\omega$ به پتانسیل $\hat{V}(t)$ از حالت برانگیختگی خارج می‌شود. این فرآیند، گسیلش القایی نامیده می‌شود زیرا سیستم به آسانی یک فوتون با انرژی $\hbar\omega$ گسیل می‌کند. شرط دوم $E_f = E_i + \hbar\omega$ نشان می‌دهد که انرژی نهایی بزرگ‌تر از انرژی اولیه‌ی آن است. آنگاه سیستم یک فوتون با انرژی $\hbar\omega$ را از $\hat{V}(t)$ جذب می‌کند و به یک حالت برانگیخته با انرژی (بالتر) E_f می‌رود (شکل ۳-۱۰). بنابراین می‌توانیم جمله‌های $e^{i\omega t}$ و $e^{-i\omega t}$ در $\hat{V}(t)$ را به ترتیب مسئول گسیل و جذب یک فوتون با انرژی $\hbar\omega$ فرض کنیم. در نتیجه، اثر یک اختلال هماهنگ، انتقال یک فوتون با انرژی $\hbar\omega$ به سیستم یا دریافت آن از سیستم است. در طرف کاملاً مخالف با اختلال هماهنگ، اختلال ثابت (مستقل از زمان) نه انرژی به سیستم منتقل می‌کند و نه از آن انرژی می‌گیرد.

ملاحظات

در تشابه با به‌دست آوردن (۴۹-۱۰)، برای گذار به پیوستاری از حالت‌های نهایی می‌توانیم نشان دهیم که (۵۴-۱۰) به آهنگ‌های گذار جذب و گسیل زیر می‌انجامد:

$$W_{if}^{\text{جذب}} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \psi_f | \hat{V}^\dagger | \psi_i \rangle \right|^2 \rho(E_f) \Big|_{E_f = E_i + \hbar\omega} \quad (۵۷-۱۰)$$

$$W_{if}^{\text{گسیل}} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \psi_f | \hat{V} | \psi_i \rangle \right|^2 \rho(E_f) \Big|_{E_f = E_i - \hbar\omega} \quad (۵۸-۱۰)$$

با توجه به این که اختلال ($0-10$) هرمیتی است ($\langle \psi_i | \hat{V}^\dagger | \psi_f \rangle = \langle \psi_f | \hat{V} | \psi_i \rangle^*$)، داریم:

$$|\langle \psi_f | \hat{V} | \psi_i \rangle|^2 = |\langle \psi_f | \hat{V}^\dagger | \psi_i \rangle|^2$$

و از این رو

$$\frac{W_{if}^{\text{جذب}}}{\rho(E_f)|_{E_f=E_i+\hbar\omega}} = \frac{W_{if}^{\text{گسیل}}}{\rho(E_f)|_{E_f=E_i-\hbar\omega}} \quad (59-10)$$

این رابطه به عنوان شرط توازن تفصیلی شناخته می شود.

مثال ۱۰-۱

ذره ای که در ابتدا ($t=0$) در حالت پایه ی یک جعبه ی پتانسیل نامتناهی یک بعدی با دیواره های در $x=0$ و $x=a$ قرار دارد، به مدت $0 \leq t \leq \infty$ تحت تأثیر اختلال $\hat{V}(t) = \hat{x}^2 e^{-t/\tau}$ قرار می گیرد. تا مرتبه ی اول، احتمال یافتن ذره در نخستین حالت برانگیخته اش را به ازای $t \geq 0$ به دست آورید.

حل

برای ذره ای در یک جعبه ی پتانسیل با $(2ma^2)$ و $E_n = n^2 \pi^2 \hbar^2 / (2ma^2)$ و $\psi_n(x) = \sqrt{2/a} \sin(n\pi x/a)$ حالت پایه متناظر با $n=1$ و نخستین حالت برانگیخته متناظر با $n=2$ است. می توانیم از (۴۱-۱۰) استفاده کنیم و احتمال زیر را به دست آوریم:

$$P_{12} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^\infty \langle \psi_2 | \hat{V}(t) | \psi_1 \rangle e^{i\omega_{21}t} dt \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \langle \psi_2 | \hat{x}^2 | \psi_1 \rangle \right|^2 \left| \int_0^\infty e^{-(1/\tau - i\omega_{21})t} dt \right|^2 \quad (60-10)$$

که در آن

$$\langle \psi_2 | \hat{x}^2 | \psi_1 \rangle = \int_0^a x^2 \psi_2^*(x) \psi_1(x) dx = \frac{2}{a} \int_0^a x^2 \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx = -\frac{16a^2}{9\pi^2} \quad (61-10)$$

و

$$\left| \int_0^\infty e^{-(1/\tau - i\omega_{21})t} dt \right|^2 = \left| \frac{e^{-(1/\tau - i\omega_{21})t} - 1}{1/\tau - i\omega_{21}} \right|^2 = \frac{1 + e^{-2t/\tau} - 2e^{-t/\tau} \cos(\omega_{21}t)}{\omega_{21}^2 + 1/\tau^2} \quad (62-10)$$

که در حد $t \rightarrow \infty$ به رابطه ی زیر کاهش می یابد:

$$\left| \int_0^\infty e^{-(1/\tau - i\omega_{21})t} dt \right|^2 = \left[\omega_{21}^2 + \frac{1}{\tau^2} \right]^{-1} = \left[\frac{9\pi^2 \hbar^2}{4m^2 a^4} + \frac{1}{\tau^2} \right]^{-1} \quad (63-10)$$

زیرا $\omega_{21} = (E_2 - E_1)/\hbar = 3\pi^2 \hbar / (2ma^2)$ جاگذاری (۶۱-۱۰) و (۶۳-۱۰) در (۶۰-۱۰) به رابطه ی زیر می انجامد:

$$P_{12} = \left(\frac{16a^2}{9\pi^2 \hbar} \right)^2 \left[\frac{9\pi^2 \hbar^2}{4m^2 a^4} + \frac{1}{\tau^2} \right]^{-1} \quad (64-10)$$

۴-۱۰ تقریب‌های بی‌دررو و ناگهانی

در بحث پیرامون نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان، به پدیده‌هایی پرداخته‌ایم که در آنها اختلال $\hat{V}(t)$ کوچک است ولی به آهنگ تغییر اختلال توجهی نکرده‌ایم. در این بخش، می‌خواهیم به بحث پیرامون روش‌های تقریبی بپردازیم که با پدیده‌هایی سروکار دارند که در آنها $\hat{V}(t)$ نه تنها کوچک است بلکه به صورت بی‌دررو (به آرامی) یا ناگهانی (به سرعت) روشن می‌شود. در اینجا فرض می‌کنیم $\hat{V}(t)$ در $t = 0$ روشن و در زمان بعدی t خاموش می‌شود (روشن و خاموش شدن می‌تواند آرام یا ناگهانی باشد).

چون $e^{i\omega_{fi}t} = (\hbar/i\omega_{fi}) \partial e^{i\omega_{fi}t} / \partial t$ است، انتگرال‌گیری جزء به جزء نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\begin{aligned} -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle \psi_f | \hat{V}(t') | \psi_i \rangle e^{i\omega_{fi}t'} dt' &= -\frac{1}{\hbar\omega_{fi}} \int_0^t \langle \psi_f | \hat{V}(t') | \psi_i \rangle \left(\frac{\partial}{\partial t'} e^{i\omega_{fi}t'} \right) dt' \\ &= -\frac{1}{\hbar\omega_{fi}} \langle \psi_f | \hat{V}(t) | \psi_i \rangle e^{i\omega_{fi}t} \Big|_{t=0}^t + \frac{1}{\hbar\omega_{fi}} \int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} \left(\frac{\partial}{\partial t'} \langle \psi_f | \hat{V}(t') | \psi_i \rangle \right) dt' \\ &= \frac{1}{\hbar\omega_{fi}} \int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} \left(\frac{\partial}{\partial t'} \langle \psi_f | \hat{V}(t') | \psi_i \rangle \right) dt' \quad (۴۵-۱۰) \end{aligned}$$

که در آن از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که $\hat{V}(t)$ در حدها (هنگامی که در $t = 0$ روشن و در زمان t خاموش می‌شود) صفر می‌شود. محاسبه‌ی انتگرال به آهنگ تغییر $\hat{V}(t)$ بستگی دارد. در ادامه، قصد داریم تا حالت‌هایی را در نظر بگیریم که در آنها برهمکنش به آرامی یا به سرعت روشن می‌شود.

۴-۱۰-۱ تقریب بی‌دررو

ابتدا به اختصار در مورد تقریب بی‌دررو بدون ترکیب آن با نظریه‌ی اختلال بحث می‌کنیم. این تقریب بر پدیده‌هایی اعمال می‌شود که هامیلتونی آنها با گذشت زمان به آرامی تحول می‌یابند. باید به این واقعیت اشاره کنیم که تقریب بی‌دررو نیازمند جداسازی هامیلتونی به یک بخش مختل نشده‌ی \hat{H} و اختلال وابسته به زمان $\hat{V}(t)$ نیست بلکه اساساً از تقریب زدن جواب‌های معادله‌ی شرودینگر در هر لحظه توسط حالت‌های مانای (با انرژی E_n و تابع‌های موج ψ_n) هامیلتونی لحظه‌ای تشکیل شده است به طوری که تابع موج در یک لحظه‌ی معلوم به صورت پیوسته و هموار به یک ویژه‌حالت هامیلتونی متناظر در زمان بعدی تبدیل می‌شود. این نتیجه اساس یک قضیه‌ی مهم مکانیک کوانتومی است که به عنوان قضیه‌ی بی‌دررو شناخته می‌شود و بیان می‌کند: هرگاه یک سیستم در ابتدا در حالت m قرار داشته باشد و هامیلتونی آن به آرامی با گذشت زمان تحول یابد آنگاه سیستم در لحظه‌ی بعدی در m امین حالت هامیلتونی (لحظه‌ای) یافت خواهد شد. یعنی سیستم گذاری انجام نخواهد داد بلکه به سادگی در m امین حالت هامیلتونی جدید باقی می‌ماند. حال بیایید به بحث پیرامون تقریب بی‌دررو در حالت‌هایی بپردازیم که در آنها هامیلتونی به یک بخش مستقل از زمان \hat{H} و یک بخش وابسته به زمان $\hat{V}(t)$ جدا می‌شود که به اندازه‌ی کافی کوچک است

به طوری که می‌توانیم نظریه‌ی اختلال را به‌کار بگیریم و این اختلال وابسته به زمان را به آرامی روشن و خاموش کنیم. اگر $\hat{V}(t)$ در لحظه‌ی $t = 0$ روشن و در لحظه‌ی t به صورتی آرام و هموار خاموش شود آنگاه در بازه‌ی زمانی $0 \leq t' \leq t$ تغییر اندکی خواهد داشت. جمله‌ی $\partial \langle \psi_f | \hat{V}(t') | \psi_i \rangle / \partial t'$ تقریباً ثابت خواهد بود بنابراین می‌توانیم آن را به خارج از علامت انتگرال ($10-65$) منتقل کنیم:

$$P_{if}(t) \simeq \frac{1}{\hbar^2 \omega_{fi}^2} \left| \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi_f | \hat{V}(t) | \psi_i \rangle \right|^2 \left| \int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} dt' \right|^2 \quad (10-66)$$

$$P_{if}(t) \simeq \frac{4}{\hbar^2 \omega_{fi}^2} \left| \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi_f | \hat{V}(t) | \psi_i \rangle \right|^2 \sin^2 \left(\frac{\omega_{fi}t}{2} \right) \quad (10-67)$$

تقریب بی‌دررو تنها زمانی معتبر است که تغییر زمانی انرژی اختلال در طول یک دوره‌ی نوسان در مقایسه با اختلاف انرژی $|E_f - E_i|$ بین حالت‌های اولیه و نهایی بسیار اندک باشد:

$$\left| \frac{1}{\omega_{fi}} \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi_f | \hat{V}(t) | \psi_i \rangle \right| \ll |E_f - E_i| \quad (10-68)$$

چون $\sin^2 \alpha \ll 1$ است، از ($10-67$) می‌بینیم که در تقریب بی‌دررو احتمال گذار بسیار کوچک است: $P_{if} \ll 1$. در واقع، اگر آهنگ تغییر $\hat{V}(t)$ (و از این رو $\hat{H}(t)$) بسیار کوچک باشد آنگاه خواهیم داشت: $\partial \langle \psi_f | \hat{V}(t) | \psi_i \rangle / \partial t \rightarrow 0$ که به نوبه‌ی خود بیان می‌کند که احتمال گذار عملاً صفر است: $P_{if} \rightarrow 0$. علاوه بر این، می‌بینیم هنگامی که اختلال به صورت بی‌دررو روشن و خاموش می‌شود، هیچ گذاری روی نمی‌دهد. یعنی هرگاه سیستم در ابتدا ($t = 0$) در حالت n ام \hat{H}_0 ($|\psi_n(0)\rangle$) با انرژی $E_n(0)$ باشد آنگاه در پایان (زمان t) اختلال بی‌دررو $\hat{V}(t)$ در n امین حالت ($|\psi_n(t)\rangle$) هامیلتونی جدید ($\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$) با انرژی $E_n(t)$ یافت خواهد شد. به عنوان یک مثال آموزنده، یک ذره در پتانسیل نوسانگر هماهنگ ساده را در نظر بگیرید که ثابت آن به آرامی از k برای مثال به $3k$ تغییر می‌کند. اگر در ابتدا ذره در دومین حالت برانگیخته باشد آنگاه در دومین حالت برانگیخته‌ی نوسانگر جدید باقی خواهد ماند. توجه کنید که احتمال گذار ($10-67$) با استفاده از دو تقریب به دست آمد: تقریب نظریه‌ی اختلال و تقریب بی‌دررو. به هر حال، باید گفت هنگامی که اختلال ضعیف نیست ولی به صورت بی‌دررو روشن می‌شود، هنوز می‌توانیم از تقریب بی‌دررو اما بدون همراهی نظریه‌ی اختلال استفاده کنیم.

۱۰-۴-۲ تقریب ناگهانی

دوباره به بحث مختصری پیرامون تقریب ناگهانی بدون استفاده از نظریه‌ی اختلال می‌پردازیم. اگر هامیلتونی یک سیستم به صورت ناگهانی (در یک بازه‌ی زمانی بسیار کوچک) از یک شکل به شکل دیگر تغییر کند آنگاه انتظار داریم تابع موج تغییر چندانی نداشته باشد ولی بسط آن بر حسب ویژه‌تابع‌های هامیلتونی‌های

اولیه و نهایی ممکن است متفاوت باشد. به‌عنوان مثال، سیستمی را در نظر بگیرید که در ابتدا ($t < 0$) در ویژه‌حالت $|\psi_n\rangle$ هامیلتونی \hat{H}_0 قرار دارد:

$$\hat{H}_0 |\psi_n\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n\rangle, \quad |\psi_n(t)\rangle = e^{iE_n^{(0)}t/\hbar} |\psi_n\rangle \quad (69-10)$$

در لحظه‌ی $t = 0$ ، فرض می‌کنیم هامیلتونی به‌صورت ناگهانی از \hat{H}_0 به \hat{H} تغییر کند و به‌ازای $t > 0$ این شکل جدید (یعنی \hat{H}) را حفظ کند. در اینجا باید بگوییم نیازی نیست که اختلاف بین دو هامیلتونی $(\hat{H} - \hat{H}_0)$ کوچک باشد. فرض کنید $|\phi_n\rangle$ ها ویژه‌تابع‌های \hat{H} باشند:

$$\hat{H} |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle, \quad |\phi_n(t)\rangle = e^{iE_n t/\hbar} |\phi_n\rangle \quad (70-10)$$

به‌ازای $t > 0$ ، حالت سیستم از رابطه‌ی زیر به‌دست می‌آید:

$$|\Phi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{iE_n t/\hbar} |\phi_n\rangle \quad (71-10)$$

اگر سیستم در ابتدا در ویژه‌حالت $|\psi_m\rangle$ هامیلتونی \hat{H}_0 قرار داشته باشد آنگاه شرط پیوستگی در $t = 0$ ایجاب می‌کند که سیستم درست پس از روی دادن تغییر در این حالت باقی بماند:

$$|\Phi(0)\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle = |\psi_m\rangle \implies c_n = \langle \phi_n | \psi_m \rangle \quad (72-10)$$

احتمال این که تغییر ناگهانی در هامیلتونی سیستم از \hat{H}_0 به \hat{H} موجب یک گذار از حالت m ام هامیلتونی \hat{H}_0 به حالت m ام هامیلتونی \hat{H} شود، برابر است با

$$P_{mn} = |\langle \phi_n | \psi_m \rangle|^2 \quad (73-10)$$

باید توجه کنیم که تقریب ناگهانی تنها برای گذار بین حالت‌های گسسته قابل اعمال است.

حال بیایید نگاهی به تقریب ناگهانی در چارچوب نظریه‌ی اختلال بیندازیم. سیستمی را در نظر بگیرید که تحت تأثیر یک اختلال کوچک به‌طور ناگهانی قرار می‌گیرد. هنگامی که $\hat{V}(t)$ به‌صورت لحظه‌ای روشن می‌شود، جمله‌ی $e^{i\omega_{fi}t}$ در (۱۰-۶۵) در طول زمان روشن شدن اختلال تغییر چندانی نمی‌کند. بنابراین می‌توانیم $e^{i\omega_{fi}t}$ را به خارج از علامت انتگرال منتقل کنیم:

$$P_{if} \simeq \frac{1}{\hbar^2 \omega_{fi}^2} |e^{i\omega_{fi}t}|^2 \left| \int_0^t \frac{\partial}{\partial t'} \langle \psi_f | \hat{V}(t') | \psi_i \rangle dt' \right|^2 \quad (74-10)$$

از این رو احتمال گذار در چارچوب تقریب ناگهانی از رابطه‌ی زیر به‌دست می‌آید:

$$P_{if}(t) \simeq \frac{|\langle \psi_f | \hat{V}(t) | \psi_i \rangle|^2}{\hbar^2 \omega_{fi}^2} \quad (75-10)$$

در پایان، توجه کنید که هر دو رابطه‌ی $(۱۰-۷۳)$ و $(۱۰-۷۵)$ احتمال گذار در چارچوب تقریب ناگهانی را به دست می‌دهند. معادله‌ی $(۱۰-۷۳)$ که در آن تغییر در هامیلتونی‌ها $(\hat{H} - \hat{H}_0)$ می‌تواند بزرگ باشد، فرمول دقیق را نمایش می‌دهد ولی معادله‌ی $(۱۰-۷۵)$ تنها یک نتیجه‌ی تقریبی را ارائه می‌کند زیرا از یک بحث اختلالی مرتبه‌ی نخست به دست آمد که در آن فرض کردیم تغییر $\hat{H} - \hat{H}_0$ کوچک ولی هنوز ناگهانی است.

مثال ۱۰-۲

ذره‌ای در ابتدا ($t < 0$) در حالت پایه‌ی یک چاه پتانسیل نامتناهی یک بعدی با دیواره‌هایی در $x = 0$ و $x = a$ قرار دارد.

(الف) اگر دیواره‌ی واقع در $x = a$ به آرامی به $x = \lambda a$ حرکت کند آنگاه انرژی و تابع موج ذره در چاه جدید را بیابید. کار انجام شده در این فرآیند را حساب کنید.

(ب) حال اگر دیواره‌ی واقع در $x = a$ (در $t = 0$) به صورت ناگهانی به $x = \lambda a$ حرکت کند آنگاه احتمال یافتن ذره در (۱) حالت پایه، (۲) نخستین حالت برانگیخته و (۳) دومین حالت برانگیخته‌ی چاه پتانسیل جدید را محاسبه کنید.

حل

به ازای $t < 0$ ذره در یک چاه پتانسیل با دیواره‌هایی در $x = 0$ و $x = a$ قرار داشت و از این رو

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad (0 \leq x \leq a) \quad (۷۶-۱۰)$$

(الف) هنگامی که دیواره به آرامی حرکت داده می‌شود، قضیه‌ی بی‌دررو ایجاب می‌کند که ذره گذاری نخواهد داشت و در لحظه‌ی t ، در حالت پایه‌ی چاه پتانسیل جدید (چاهی با دیواره‌هایی در $x = 0$ و $x = \lambda a$) یافت خواهد شد. بنابراین داریم:

$$E_1(t) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m(\lambda a)^2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{12\lambda m a^2}, \quad \psi_1'(x) = \sqrt{\frac{2}{\lambda a}} \sin\left(\frac{\pi x}{\lambda a}\right) \quad (0 \leq x \leq a) \quad (۷۷-۱۰)$$

کار لازم برای حرکت دادن دیواره برابر است با

$$\Delta W = E_1(t) - E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{m(\lambda a)^2} - \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = -\frac{63\pi^2 \hbar^2}{12\lambda m a^2} \quad (۷۸-۱۰)$$

(ب) هنگامی که دیواره به سرعت حرکت داده می‌شود، ذره یک‌بار (در $t \geq 0$) خود را در چاه پتانسیل جدید خواهد یافت. اکنون ترازهای انرژی و تابع موج از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$E'_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m(\lambda a)^2} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{12\lambda m a^2}, \quad \psi'_n(x) = \sqrt{\frac{2}{\lambda a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{\lambda a}\right) \quad (0 \leq x \leq \lambda a) \quad (۷۹-۱۰)$$

می‌توان احتمال یافتن ذره در حالت پایه‌ی جعبه‌ی پتانسیل جدید را از $(۱۰-۷۳)$ به دست آورد:

$$P_{۱۱} = |\langle \psi'_1 | \psi_1 \rangle|^2 \quad \text{که در آن}$$

$$\langle \psi'_1 | \psi_1 \rangle = \int_0^a \psi'^*_1(x) \psi_1(x) dx = \frac{2}{\sqrt{\lambda a}} \int_0^a \sin\left(\frac{\pi x}{\lambda a}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx = \frac{16}{63\pi} \sqrt{4 - 2\sqrt{2}} \quad (۱۰-۸۰)$$

از این رو

$$P_{۱۱} = |\langle \psi'_1 | \psi_1 \rangle|^2 = \left(\frac{16}{63\pi}\right)^2 (4 - 2\sqrt{2}) = 0,0077 \simeq 0,7\% \quad (۱۰-۸۱)$$

احتمال یافتن ذره در نخستین حالت برانگیخته‌ی جعبه‌ی پتانسیل جدید از $P_{۱۲} = |\langle \psi'_2 | \psi_1 \rangle|^2$ به دست می‌آید که در آن

$$\langle \psi'_2 | \psi_1 \rangle = \int_0^a \psi'^*_2(x) \psi_1(x) dx = \frac{2}{\sqrt{\lambda a}} \int_0^a \sin\left(\frac{\pi x}{2a}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx = \frac{8}{15\pi} \quad (۱۰-۸۲)$$

از این رو

$$P_{۱۲} = |\langle \psi'_2 | \psi_1 \rangle|^2 = \left(\frac{8}{15\pi}\right)^2 = 0,1699 \simeq 17\% \quad (۱۰-۸۳)$$

محاسباتی مشابه، به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\begin{aligned} P_{۱۳} = |\langle \psi'_3 | \psi_1 \rangle|^2 &= \left| \frac{2}{\sqrt{\lambda a}} \int_0^a \sin\left(\frac{3\pi x}{\lambda a}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx \right|^2 \\ &= \left| \frac{16}{55\pi} \sqrt{4 + 2\sqrt{2}} \right|^2 \simeq 24,2\% \quad (۱۰-۸۴) \end{aligned}$$

این محاسبات نشان می‌دهند که به احتمال زیاد ذره در حالت‌های برانگیخته‌ی بالاتر یافت خواهد شد و احتمال یافتن ذره در حالت پایه بسیار اندک است.

۵-۱۰ برهمکنش اتم‌ها با تابش

یکی از مهم‌ترین کاربردهای نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان در مطالعه‌ی برهمکنش الکترون‌های اتم‌ها با تابش الکترومغناطیسی خارجی است. این کاربرد چیزهای زیادی درباره‌ی ساختار اتم‌ها آشکار می‌کند. برای سادگی، فرض می‌کنیم تنها یک الکترون اتم در برهمکنش نقش دارد و از اسپین الکترون چشم‌پوشی می‌کنیم. همچنین فرض می‌کنیم که هسته بسیار سنگین است.

در غیاب یک اختلال خارجی، هامیلتونی الکترون اتم برابر است با $\hat{H}_0 = \mathbf{P}^2 / (2m_e) + \hat{V}_0(\mathbf{r})$ که در آن m_e جرم الکترون و $\hat{V}_0(\mathbf{r})$ پتانسیل ایستای ناشی از برهمکنش الکترون با الکترون‌های دیگر و هسته است.

حال اگر تابش الکترومغناطیسی با پتانسیل برداری $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ و پتانسیل الکتربیکی $\phi(\mathbf{r}, t)$ بر یک اتم اعمال شود آنگاه هامیلتونی ناشی از برهمکنش الکترون (با بار $-e$) با تابش از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$H = \frac{1}{2m_e} \left(\mathbf{P} + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 - e\phi(\mathbf{r}, t) + V_0(\mathbf{r}) \quad (۸۵-۱۰)$$

$$= H_0 - e\phi(\mathbf{r}, t) + \frac{e}{2m_e c} [\mathbf{A} \cdot \mathbf{P} - i\hbar \nabla \cdot \mathbf{A}] + \frac{e^2 \mathbf{A}^2}{2m_e c^2}$$

که در آن از رابطه‌ی $\mathbf{P} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{P} - i\hbar \nabla \cdot \mathbf{A}$ استفاده کرده‌ایم. چون $\phi(\mathbf{r}, t) = 0$ است زیرا تابش چشمه‌ی الکتروستاتیک وجود ندارد و با توجه به این که $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ است (بیانه‌ی کولن) و با چشم‌پوشی از جمله‌ی \mathbf{A}^2 ، می‌توانیم (۸۵-۱۰) را به صورت زیر بنویسیم:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{e}{m_e c} \mathbf{A} \cdot \mathbf{P} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t) \quad (۸۶-۱۰)$$

که در آن

$$\hat{V}(t) = \frac{e}{m_e c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{P} \quad (۸۷-۱۰)$$

این جمله که برهمکنش بین الکترون و تابش را به دست می‌دهد، (در مقایسه با \hat{H}_0) به اندازه‌ی کافی کوچک است بنابراین می‌توان توسط نظریه‌ی اختلال به آن پرداخت. قصد داریم از نظریه‌ی اختلال برای مطالعه‌ی اثر $\hat{V}(t)$ روی اتم استفاده کنیم. به خصوص، بر روی گذارهایی که در نتیجه‌ی این اختلال القاء می‌شوند، متمرکز شویم. در این مرحله، بدون محاسبه‌ی $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ نمی‌توانیم کار را ادامه دهیم. در ادامه، قصد داریم تا نشان دهیم که با استفاده از $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ برای یک تابش الکترومغناطیسی، $\hat{V}(t)$ را به دست می‌آوریم که دارای ساختار یک اختلال هماهنگ است: $\hat{V}(t) = \hat{v} e^{-i\omega t} + \hat{v}^\dagger e^{i\omega t}$. بنابراین در تشابه با یک اختلال هماهنگ، انتظار داریم اتم فوتون‌هایی را گسیل یا جذب کند و سپس گذارهایی را از یک حالت به حالت دیگر انجام دهد. برای کامل شدن بحث، قصد داریم $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ را به دو روش متفاوت تعیین کنیم: با در نظر گرفتن تابش به صورت کلاسیک و سپس به صورت کوانتومی. می‌خواهیم نشان دهیم که برخلاف بحث کوانتومی، بحث کلاسیکی تنها امکان توصیف فرآیندهای گسیل القایی و جذب را ارائه می‌کند ولی گسیل خودبه‌خودی را توضیح نمی‌دهد. معلوم شده است که گسیل خودبه‌خودی یک اثر صرفاً کوانتومی است.

۱۰-۵-۱۰ بحث کلاسیکی تابش فرودی

بحث کلاسیکی^۱ تابش فرودی تنها زمانی معتبر است که تعداد زیادی از فوتون‌ها در برهمکنش با اتم سهیم باشند (به یاد بیاورید که به صورت کلی، تنها زمانی با اثرهای کوانتومی روبرو می‌شویم که تعدادی متناهی از فوتون‌ها وجود داشته باشند).

(۱) بحث کلاسیکی میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی ($\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ و $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$) و پتانسیل‌های الکتریکی و برداری متناظر آنها ($\phi(\mathbf{r}, t)$ و $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$) به این معنی است که آنها توسط میدان‌های پیوسته توصیف می‌شوند.

از الکتروپدینامیک کلاسیک می‌دانیم که هرگاه تابش فرودی را به صورت یک موج تخت با قطبش ε در نظر بگیریم که در امتداد \mathbf{n} منتشر می‌شود آنگاه پتانسیل برداری $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_0(\mathbf{r})e^{-i\omega t} + \mathbf{A}_0^*(\mathbf{r})e^{i\omega t} = A_0 \varepsilon \left[e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} + e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \right] \quad (۸۸-۱۰)$$

با $\mathbf{k} = k\mathbf{n}$ چون $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ در معادله‌ی موج $\nabla^2 \mathbf{A} - (\frac{1}{c^2})\partial^2 \mathbf{A}/\partial t^2 = 0$ صدق می‌کند، داریم: $k = \omega/c$. شرط پیمانه‌ی کولن $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ ، رابطه‌ی $\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_0 = 0$ را نتیجه می‌دهد یعنی $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ در صفحه‌ی عمود بر جهت انتشار موج (\mathbf{n}) قرار می‌گیرد. بیدرنگ می‌توانیم میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی وابسته به پتانسیل برداری (۸۸-۱۰) را به دست آوریم:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = \frac{i\omega}{c} A_0 \varepsilon \left[-e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} + e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \right] \quad (۸۹-۱۰)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A} = i(\mathbf{k} \times \varepsilon) A_0 \left[-e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} + e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \right] = \mathbf{n} \times \mathbf{E} \quad (۹۰-۱۰)$$

این دو رابطه نشان می‌دهند که \mathbf{E} و \mathbf{B} دارای اندازه‌ی یکسانی هستند: $|\mathbf{E}| = |\mathbf{B}|$. می‌توان چگالی انرژی (یا انرژی در واحد حجم) یک تک فوتون تابش فرودی را از (۸۹-۱۰) و (۹۰-۱۰) به دست آورد:

$$u = \frac{1}{\lambda\pi} (|\mathbf{E}|^2 + |\mathbf{B}|^2) = \frac{1}{\frac{2}{3}\pi} |\mathbf{E}|^2 = \frac{\omega^2}{\pi c^2} |A_0|^2 \sin^2(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t) \quad (۹۱-۱۰)$$

با میانگین‌گیری از این عبارت نسبت به زمان، می‌بینیم که انرژی یک تک فوتون در واحد حجم ($\hbar\omega/V$) از $|A_0|^2 = \hbar\omega/V = 2\pi\hbar c^2/(\omega V)$ به دست می‌آید و از این رو $|A_0|^2 = 2\pi\hbar c^2/(\omega V)$ است و زمانی که در (۸۸-۱۰) وارد شود، به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V}} \left[e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} + e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \right] \varepsilon \quad (۹۲-۱۰)$$

پس از مشخص شدن $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ با بحث کلاسیکی، اکنون می‌توانیم پتانسیل (۸۷-۱۰) را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$\hat{V}(t) = \frac{e}{m_e c} \left(\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V} \right)^{1/2} \varepsilon \cdot \mathbf{P} \left[e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} + e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \right] = \hat{v} e^{-i\omega t} + \hat{v}^\dagger e^{i\omega t} \quad (۹۳-۱۰)$$

که در آن

$$\hat{v} = \frac{e}{m_e} \left(\frac{2\pi\hbar}{\omega V} \right)^{1/2} \varepsilon \cdot \mathbf{P} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad \hat{v}^\dagger = \frac{e}{m_e} \left(\frac{2\pi\hbar}{\omega V} \right)^{1/2} \varepsilon \cdot \mathbf{P} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (۹۴-۱۰)$$

ساختار (۱۰-۹۳) با ساختار (۱۰-۵۰) یکسان است یعنی برهمکنش یک الکترون اتم با تابش دارای ساختار یک اختلال هماهنگ است. در تشابه با (۱۰-۵۰)، می‌توانیم بگوییم که جمله‌ی $e^{-i\omega t}$ در (۱۰-۹۳) موجب جذب فوتون فرودی با انرژی $\hbar\omega$ توسط اتم می‌شود و $e^{i\omega t}$ موجب گسیل القایی یک فوتون با انرژی $\hbar\omega$ توسط اتم می‌شود. یعنی فرآیند جذب تنها زمانی روی می‌دهد که اتم یک فوتون را از تابش دریافت کند و گسیلش القایی هنگامی روی می‌دهد که تابش یک فوتون را از اتم در حال واپاشی به دست آورد. در این مرحله، نمی‌توانیم به یک کاربرد مهم گسیلش القایی اشاره نکنیم. در این فرآیند از یک فوتون (فرودی) شروع می‌کنیم و به دو فوتون می‌رسیم: فوتون فرودی به اضافه‌ی فوتون به دست آمده از اتم که حاصل گذار اتم به تراز انرژی پایین‌تر است. اگر تعداد بسیار زیادی اتم در حالت برانگیخته‌ی یکسانی باشند آنگاه چه اتفاقی می‌افتد؟ یک تک فوتون خارجی، بهمنی (یا یک واکنش زنجیری) از فوتون‌ها را که در مدت کوتاهی توسط این اتم‌ها آزاد می‌شوند، به راه می‌اندازد که همگی دارای بسامد یکسانی هستند. این وضعیت به تقویت میدان الکترومغناطیسی می‌انجامد. اما پرسشی که در اینجا مطرح می‌شود این است که این وضعیت چگونه روی می‌دهد؟ در پاسخ باید گفت هنگامی که فوتون فرودی با اتم نخست برهمکنش دارد، دو فوتون را تولید می‌کند که به نوبه‌ی خود چهار فوتون را تولید می‌کنند. سپس این چهار فوتون، هشت فوتون را به وجود می‌آورند (البته پس از برهمکنش با چهار اتم متفاوت) و به همین ترتیب. این فرآیند به عنوان تقویت توسط گسیلش القایی تابش (فرودی) شناخته می‌شود. به صورت تجربی، دو مورد تقویت تابش از این نوع صورت گرفته است و به کاربردهای گسترده‌ای انجامیده‌اند: یک مورد در حوزه‌ی میکروموج که به عنوان میزر (تقویت میکروموج توسط گسیلش القایی تابش) نامیده می‌شود. دیگری در حوزه‌ی موج‌های نوری که لیزر (تقویت نور توسط گسیلش القایی تابش) نامیده می‌شود. با پیروی از رهیافتی که به آهنگ‌های گذار (۱۰-۵۴) از (۱۰-۵۰) انجامید، به آسانی می‌توانیم نشان دهیم که آهنگ‌های گذار برای گسیل القایی و جذب متناظر با (۱۰-۹۳) از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$\Gamma_{i \rightarrow f}^{\text{گسیل}} = \frac{4\pi^2 e^2}{m_e^2 \omega V} \left| \langle \psi_f | e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{P} | \psi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega) \quad (۱۰-۹۵)$$

$$\Gamma_{i \rightarrow f}^{\text{جذب}} = \frac{4\pi^2 e^2}{m_e^2 \omega V} \left| \langle \psi_f | e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{P} | \psi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad (۱۰-۹۶)$$

هنگامی که به تابش به صورت کلاسیکی پرداخته می‌شود، این رابطه‌ها عبارت‌هایی را برای آهنگ‌های گذار نمایش می‌دهند.

اما هنگامی که تابشی وجود نداشته باشد، چه اتفاقی می‌افتد؟ اگر $\mathbf{A} = 0$ باشد (یعنی اتم در خلأ قرار داشته باشد) آنگاه معادله‌های (۱۰-۹۵) و (۱۰-۹۶) بیان می‌کنند که هیچ گذاری روی نخواهد داد زیرا همانطور که معادله‌ی (۱۰-۸۷) نشان می‌دهد، هرگاه $\mathbf{A} = 0$ باشد آنگاه اختلال صفر خواهد شد از این رو $\Gamma_{i \rightarrow f}^{\text{گسیل}} = 0$ و $\Gamma_{i \rightarrow f}^{\text{جذب}} = 0$ می‌شود. در نتیجه، بحث کلاسیکی نمی‌تواند گسیلش خودبه‌خودی را که حتی در غیاب یک میدان اختلالی روی می‌دهد، توضیح دهد. این بیان می‌کند که به عنوان مثال، اتم

هیدروژن در ویژه حالت انرژی $2 \geq n$ در این ویژه حالت باقی می‌ماند مگر آن که به وسیله‌ی یک میدان خارجی مختل شود که در تضاد کامل با مشاهده‌های تجربی است. این مشاهده‌ها نشان می‌دهند که اتم‌ها در حالت‌های $2 \geq n$ گسیل‌های خودبه‌خودی انجام می‌دهند و حتی زمانی که هیچ اختلال خارجی وجود ندارد، تابش الکترومغناطیسی گسیل می‌کنند. گسیل خودبه‌خودی یک اثر صرفاً کوانتومی است.

۱۰-۵-۲ کوانتس میدان الکترومغناطیسی

دیدیم که بحث کلاسیکی تابش به آهنگ‌های گذاری منجر می‌شود که تنها فرآیندهای جذب و گسیل القایی را توضیح می‌دهند؛ گسیل خودبه‌خودی فوتون‌ها توسط اتم‌ها پدیده‌ای واقعی است که بحث کلاسیکی نمی‌تواند آن را توضیح دهد و به تنهایی نمی‌تواند آن را پیش‌بینی کند. بحث کلاسیکی تنها زمانی معتبر است که تعداد زیادی از فوتون‌ها در تابش سهیم باشند. یعنی هنگامی که شدت تابش به اندازه‌ای زیاد باشد که تنها جنبه‌ی موجی آن مهم باشد. در شدت‌های بسیار پایین نمی‌توان از طبیعت ذره‌ای تابش چشم پوشید. در این حالت، باید بحث کوانتومی تابش الکترومغناطیسی را در نظر بگیریم. برای به‌دست آوردن توصیفی کوانتومی از تابش، لزوماً باید میدان‌های مختلف (مانند $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ ، $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ و پتانسیل برداری $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$) را با عملگرها جایگزین کنیم.

در غیاب بار و جریان، میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی به وسیله‌ی پتانسیل برداری $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ به صورت کامل مشخص می‌شوند. چون $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ عرضی (عمود بر بردار موج \mathbf{k}) است، تنها دو مؤلفه‌ی غیرصفر در امتداد جهت‌های دو بردار (یکه‌ی) قطبش (ϵ_1 و ϵ_2) است که در صفحه‌ی عمود بر \mathbf{k} قرار می‌گیرند. بنابراین می‌توانیم $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ را به صورت زیر برحسب سری فوریه بسط دهیم:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda=1}^2 \left[A_{\lambda, \mathbf{k}} \epsilon_{\lambda} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)} + A_{\lambda, \mathbf{k}}^* \epsilon_{\lambda}^* e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)} \right] \quad (97-10)$$

که در آن فرض کرده‌ایم که میدان الکترومغناطیسی به یک حجم بزرگ V با شرایط مرزی دوره‌ای محدود شده است. می‌خواهیم ببینیم که در تشابه با کوانتس نوسانگر هماهنگ کلاسیک، آیا می‌توان با نوشتن میدان الکترومغناطیسی برحسب عملگرهای آفرینش و نابودی، به کوانتس تابش رسید.

هامیلتونی کل سیستم (اتم و تابش خارجی) برابر است با $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_r + \hat{V}(t)$ که در آن \hat{H}_0 هامیلتونی اتم مختل نشده، \hat{H}_r هامیلتونی میدان الکترومغناطیسی و $\hat{V}(t)$ برهمکنش اتم با تابش است. برای یافتن \hat{H}_r باید انرژی میدان الکترومغناطیسی را که می‌توان آن را از (97-10) به‌دست آورد، کوانتیده کنیم:

$$\mathcal{H}_r = \frac{1}{\lambda \pi} \int d^3r \left(\mathbf{E}^2(\mathbf{r}, t) + \mathbf{B}^2(\mathbf{r}, t) \right) = \frac{V}{\lambda \pi c^2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda=1}^2 (\hbar \mathbf{k})^2 A_{\lambda, \mathbf{k}}^* A_{\lambda, \mathbf{k}} \quad (98-10)$$

با $|\epsilon_\lambda|^2 = 1$ که در آن از $\omega_k = ck$ استفاده می‌کنیم. به جای دو متغیر $A_{\lambda,k}$ و $A_{\lambda,k}^*$ می‌توانیم مجموعه‌ی جدیدی از دو متغیر مزدوج بندادی زیر را معرفی کنیم:

$$Q_{\lambda,k} = \frac{1}{\sqrt{4\pi c^2}} (A_{\lambda,k}^* + A_{\lambda,k}), \quad P_{\lambda,k} = \frac{i\omega_k}{\sqrt{4\pi c^2}} (A_{\lambda,k}^* - A_{\lambda,k}) \quad (99-10)$$

با ترکیب (۹۸-۱۰) و (۹۹-۱۰) می‌توانیم بنویسیم:

$$H_r = \sum_k \sum_{\lambda=1}^2 \left(\frac{1}{2} P_{\lambda,k}^2 + \frac{\omega_k^2}{2} Q_{\lambda,k}^2 \right) \quad (100-10)$$

این عبارت دارای ساختار هامیلتونی مجموعه‌ای از نوسانگرهای هماهنگ مستقل است و با این واقعیت که موج‌های الکترومغناطیسی در خلاء از نوسان‌های (هماهنگ) میدان الکترومغناطیسی نتیجه می‌شوند، سازگار است. از این رو می‌توان آنها را با برهنه‌ی خطی مدهای ارتعاشی مستقل توصیف کرد. برای کوانتیده کردن (۱۰۰-۱۰)، تنها باید عملگرهای $\hat{P}_{\lambda,k}$ و $\hat{Q}_{\lambda,k}$ را بیاییم که به ترتیب متناظر با متغیرهای $Q_{\lambda,k}$ و $P_{\lambda,k}$ هستند به طوری که از رابطه‌های جابه‌جایی بندادی پیروی می‌کنند:

$$\left[\hat{Q}_{\lambda_1, k_1}, \hat{P}_{\lambda_2, k_2} \right] = i\hbar \delta_{\lambda_1, \lambda_2} \delta_{k_1, k_2} \quad (101-10)$$

با پیروی از همان روند کوانتش نوسانگر هماهنگ کلاسیک و با معرفی عملگرهای پایین‌برنده و بالا‌برنده ی

$$\hat{a}_{\lambda,k} = \sqrt{\frac{\omega_k}{2\hbar}} \hat{Q}_{\lambda,k} + \frac{i}{\sqrt{2\hbar\omega_k}} \hat{P}_{\lambda,k}, \quad \hat{a}_{\lambda,k}^\dagger = \sqrt{\frac{\omega_k}{2\hbar}} \hat{Q}_{\lambda,k} - \frac{i}{\sqrt{2\hbar\omega_k}} \hat{P}_{\lambda,k} \quad (102-10)$$

که به $\hat{Q}_{\lambda,k} = \sqrt{\hbar/2\omega_k} (\hat{a}_{\lambda,k}^\dagger + \hat{a}_{\lambda,k})$ و $\hat{P}_{\lambda,k} = i\sqrt{\hbar\omega_k/2} (\hat{a}_{\lambda,k}^\dagger - \hat{a}_{\lambda,k})$ می‌انجامند، می‌توانیم نشان دهیم که عملگر هامیلتونی متناظر با (۱۰۰-۱۰) از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$H_r = \sum_k \sum_{\lambda=1}^2 \hbar\omega_k \left(\hat{N}_{\lambda,k} + \frac{1}{2} \right) \quad (103-10)$$

$$\hat{N}_{\lambda,k} = \hat{a}_{\lambda,k}^\dagger \hat{a}_{\lambda,k}$$

در تشابه با نوسانگر هماهنگ، عملگرهای $\hat{a}_{\lambda,k}$ و $\hat{a}_{\lambda,k}^\dagger$ از رابطه‌های جابه‌جایی زیر پیروی می‌کنند:

$$\left[\hat{a}_{\lambda_1, k_1}, \hat{a}_{\lambda_2, k_2}^\dagger \right] = \delta_{\lambda_1, \lambda_2} \delta_{k_1, k_2}, \quad \left[\hat{a}_{\lambda_1, k_1}, \hat{a}_{\lambda_2, k_2} \right] = \left[\hat{a}_{\lambda_1, k_1}^\dagger, \hat{a}_{\lambda_2, k_2}^\dagger \right] = 0 \quad (104-10)$$

که به ترتیب برای نابودی و آفرینش یک فوتون با عدد موج k و قطبش λ عمل می‌کنند. ویژه‌مقدارهای $\hat{N}_{\lambda,k}$ عبارتند از $n_{\lambda,k} = 0, 1, 2, \dots$ و در تشابه با نوسانگر هماهنگ، ویژه‌بردارهای آن عبارتند از

$$|n_{\lambda,k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_{\lambda,k}!}} \left(\hat{a}_{\lambda,k}^\dagger \right)^{n_{\lambda,k}} |0\rangle \quad (105-10)$$

که در آن $|0\rangle$ حالت بدون فوتون (حالت خلاء) و $|n_{\lambda,k}\rangle$ حالت میدان الکترومغناطیسی با $n_{\lambda,k}$ فوتون با بردار موج \mathbf{k} و قطبش λ است. بنابراین عدد $n_{\lambda,k}$ مد عدد اشغال را نمایش می‌دهد. اثر $\hat{a}_{\lambda,k}^\dagger$ و $\hat{a}_{\lambda,k}$ روی $|n_{\lambda,k}\rangle$ از رابطه‌های زیر به دست می‌آید:

$$\hat{a}_{\lambda,k}|n_{\lambda,k}\rangle = \sqrt{n_{\lambda,k}}|n_{\lambda,k}-1\rangle, \quad \hat{a}_{\lambda,k}^\dagger|n_{\lambda,k}\rangle = \sqrt{n_{\lambda,k}+1}|n_{\lambda,k}+1\rangle \quad (106-10)$$

می‌توان ویژه حالت‌های هامیلتونی $(103-10)$ را از $(105-10)$ نتیجه گرفت:

$$|n_{\lambda_1, \mathbf{k}_1}, n_{\lambda_2, \mathbf{k}_2}, n_{\lambda_3, \mathbf{k}_3}, \dots\rangle = \prod_j |n_{\lambda_j, \mathbf{k}_j}\rangle \quad (107-10)$$

با ویژه مقدرهای انرژی (تابشی)

$$E_r = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda} \hbar \omega_{\mathbf{k}} \left(n_{\lambda, \mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right) \quad (108-10)$$

حالت $|n_{\lambda_1, \mathbf{k}_1}, n_{\lambda_2, \mathbf{k}_2}, n_{\lambda_3, \mathbf{k}_3}, \dots\rangle$ یک میدان الکترومغناطیسی با $n_{\lambda_1, \mathbf{k}_1}$ فوتون در مد $(\lambda_1, \mathbf{k}_1)$ (یعنی $n_{\lambda_1, \mathbf{k}_1}$ فوتون با بردار موج \mathbf{k}_1 و قطبش λ_1)، $n_{\lambda_2, \mathbf{k}_2}$ فوتون در مد $(\lambda_2, \mathbf{k}_2)$ را توصیف می‌کند و به همین ترتیب. با جاگذاری $(99-10)$ در $(102-10)$ ، به دست می‌آوریم: $\hat{A}_{\lambda, \mathbf{k}} = \sqrt{\omega_{\mathbf{k}} / (2\pi\hbar c^2)} \hat{A}_{\lambda, \mathbf{k}}$ و $\hat{A}_{\lambda, \mathbf{k}}^\dagger = \sqrt{\omega_{\mathbf{k}} / (2\pi\hbar c^2)} \hat{A}_{\lambda, \mathbf{k}}^\dagger$ از این رو

$$\hat{A}_{\lambda, \mathbf{k}} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{k}}}} \hat{a}_{\lambda, \mathbf{k}}, \quad \hat{A}_{\lambda, \mathbf{k}}^\dagger = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{k}}}} \hat{a}_{\lambda, \mathbf{k}}^\dagger \quad (109-10)$$

وارد کردن این دو رابطه در $(97-10)$ عملگر پتانسیل برداری را نتیجه می‌دهد:

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda=1}^2 \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{k}} V}} \left[\hat{a}_{\lambda, \mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)} \boldsymbol{\epsilon}_{\lambda} + \hat{a}_{\lambda, \mathbf{k}}^\dagger e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)} \boldsymbol{\epsilon}_{\lambda}^* \right] \quad (110-10)$$

برهمکنش $\hat{V}(t)$ که با $(107-10)$ داده می‌شود، به $\hat{V}(t) = (e/m_e c) \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{P}$ یا

$$\hat{V}(t) = \frac{e}{m_e} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_{\mathbf{k}} V}} \left[\hat{a}_{\lambda, \mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \boldsymbol{\epsilon}_{\lambda} \cdot \mathbf{P} e^{i\omega_{\mathbf{k}} t} + \hat{a}_{\lambda, \mathbf{k}}^\dagger e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \boldsymbol{\epsilon}_{\lambda}^* \cdot \mathbf{P} e^{-i\omega_{\mathbf{k}} t} \right] \quad (111-10)$$

یا

$$\hat{V}(t) = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda=1}^2 \left(\hat{v}_{\lambda, \mathbf{k}} e^{i\omega_{\mathbf{k}} t} + \hat{v}_{\lambda, \mathbf{k}}^\dagger e^{-i\omega_{\mathbf{k}} t} \right) \quad (112-10)$$

کاهش می‌یابد که در آن

$$\hat{v}_{\lambda, \mathbf{k}} = \frac{e}{m_e} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_{\mathbf{k}} V}} \hat{a}_{\lambda, \mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \boldsymbol{\epsilon}_{\lambda} \cdot \mathbf{P}, \quad \hat{v}_{\lambda, \mathbf{k}}^\dagger = \frac{e}{m_e} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_{\mathbf{k}} V}} \hat{a}_{\lambda, \mathbf{k}}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \boldsymbol{\epsilon}_{\lambda}^* \cdot \mathbf{P} \quad (113-10)$$

است. جمله‌های $\hat{v}_{\lambda, \mathbf{k}}$ و $\hat{v}_{\lambda, \mathbf{k}}^\dagger$ به ترتیب متناظر با جذب (نابودی) و گسیل (آفرینش) یک فوتون توسط اتم هستند. همانند حالت کلاسیک، برهمکنش $(112-10)$ دارای ساختار یک اختلال هماهنگ است.

ملاحظات

کوانتش تابش از نوشتن میدان الکترومغناطیسی برحسب عملگرهای آفرینش و نابودی (در تشابه با نوسانگر هماهنگ) به دست می‌آید. این فرآیند که کوانتش دوم نامیده می‌شود، به جایگزینی میدان‌های مختلف (مانند پتانسیل برداری $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ ، میدان الکتریکی $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ و میدان مغناطیسی $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$) با کمیت‌های عملگرایی می‌انجامد که به نوبه‌ی خود برحسب عملگرهای آفرینش و نابودی بیان می‌شوند. به‌عنوان مثال، هامیلتونی و پتانسیل برداری تابش در نمایش کوانتش دوم به ترتیب از معادله‌های $(10-10^3)$ و $(10-110)$ به دست می‌آیند.

۱۰-۵-۳ آهنگ‌های گذار برای جذب و گسیل تابش

قبل از این که اتم و تابش با هم برهمکنش داشته باشند، حالت اولیه‌ی آنها از $|\Phi_i\rangle = |\psi_i\rangle |n_{\lambda, \mathbf{k}}\rangle$ به دست می‌آید که در آن $|\psi_i\rangle$ حالت اتم مختل نشده و $|n_{\lambda, \mathbf{k}}\rangle$ بردار حالت تابش است. پس از آن که برهمکنش روی می‌دهد، حالت سیستم از f $|\Phi_f\rangle = |\psi_f\rangle |n_{\lambda, \mathbf{k}}\rangle$ به دست می‌آید.

ابتدا بیابید نگاهی به حالت گسیل یک فوتون بیندازیم. اگر اتم پس از برهمکنش یک فوتون گسیل کند آنگاه حالت نهایی سیستم از f $|\Phi_f\rangle = |\psi_f\rangle |n_{\lambda, \mathbf{k}} + 1\rangle$ به دست خواهد آمد، زیرا میدان الکترومغناطیسی یک فوتون به دست می‌آورد؛ از این رو حالت آن از $|n_{\lambda, \mathbf{k}} + 1\rangle$ به $|n_{\lambda, \mathbf{k}}\rangle$ تغییر می‌کند. به شکل رسمی، می‌توان با آفرینش یک فوتون به این فرآیند رسید، یعنی با اعمال $\hat{a}_{\lambda, \mathbf{k}}^\dagger$ یا $\hat{a}_{\lambda, \mathbf{k}}^\dagger$ بر حالت فوتونی $|n_{\lambda, \mathbf{k}}\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_f | \hat{a}_{\lambda, \mathbf{k}}^\dagger | \Phi_i \rangle &= \frac{e}{m_e} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_k V}} \langle \psi_f | e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda}^* \cdot \hat{\mathbf{P}} | \psi_i \rangle \langle n_{\lambda, \mathbf{k}} + 1 | \hat{a}_{\lambda, \mathbf{k}}^\dagger | n_{\lambda, \mathbf{k}} \rangle \\ &= \frac{e}{m_e} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_k V}} \sqrt{n_{\lambda, \mathbf{k}} + 1} \langle \psi_f | e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda}^* \cdot \hat{\mathbf{P}} | \psi_i \rangle \end{aligned} \quad (10-114)$$

هنگامی که $n_{\lambda, \mathbf{k}} = 0$ است (یعنی تابشی وجود ندارد)، معادله‌ی $(10-114)$ نشان می‌دهد که حتی در غیاب تابش خارجی، این نظریه می‌تواند رویدادهایی را که در آنها گسیل فوتون وجود دارد، توصیف نماید. این پدیده، گسیل خودبه‌خودی نامیده می‌شود. نمی‌توان این پدیده را با بحث کلاسیکی تابش توصیف کرد. ولی اگر $n_{\lambda, \mathbf{k}} \neq 0$ باشد آنگاه $n_{\lambda, \mathbf{k}}$ مسئول گسیلش‌های القایی است. هرچه $n_{\lambda, \mathbf{k}}$ بزرگ‌تر باشد، احتمال گسیل بیشتر می‌شود. در حالت جذب یک فوتون، سیستم گذاری از حالت اولیه‌ی $|\Phi_i\rangle = |\psi_i\rangle |n_{\lambda, \mathbf{k}}\rangle$ به حالت نهایی $|\Phi_f\rangle = |\psi_f\rangle |n_{\lambda, \mathbf{k}} - 1\rangle$ انجام می‌دهد که به صورت رسمی می‌توان آن را با اعمال عملگر نابودی $\hat{a}_{\lambda, \mathbf{k}}$ روی $|n_{\lambda, \mathbf{k}}\rangle$ انجام داد:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_f | \hat{a}_{\lambda, \mathbf{k}} | \Phi_i \rangle &= \frac{e}{m_e} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_k V}} \langle \psi_f | e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda} \cdot \hat{\mathbf{P}} | \psi_i \rangle \langle n_{\lambda, \mathbf{k}} - 1 | \hat{a}_{\lambda, \mathbf{k}} | n_{\lambda, \mathbf{k}} \rangle \\ &= \frac{e}{m_e} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_k V}} \sqrt{n_{\lambda, \mathbf{k}}} \langle \psi_f | e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda} \cdot \hat{\mathbf{P}} | \psi_i \rangle \end{aligned} \quad (10-115)$$

در تشابه با (۹۵-۱۰) و (۹۶-۱۰)، از (۱۱۴-۱۰) و (۱۱۵-۱۰) می‌توان آهنگ‌های گذار متناظر با گسیل یا جذب فوتون با انرژی $\hbar\omega_k = \hbar ck$ عدد موج k و قطبش λ را به دست آورد:

$$\Gamma_{i \rightarrow f}^{\text{گسیل}} = \frac{4\pi^2 e^2}{m_e^2 \omega_k V} (n_{\lambda, k} + 1) \left| \langle \psi_f | e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda}^* \cdot \mathbf{P} | \psi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega_k) \quad (116-10)$$

$$\Gamma_{i \rightarrow f}^{\text{جذب}} = \frac{4\pi^2 e^2}{m_e^2 \omega_k V} n_{\lambda, k} \left| \langle \psi_f | e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda} \cdot \mathbf{P} | \psi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega_k) \quad (117-10)$$

۴-۵-۱۰ آهنگ‌های گذار در چارچوب تقریب دوقطبی

می‌توان عبارت‌های تقریبی آهنگ‌های گذار (۱۱۶-۱۰) و (۱۱۷-۱۰) را با بسط $e^{\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ به دست آورد:

$$e^{\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 1 \pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \frac{1}{2}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})^2 \mp \dots = 1 \pm i\frac{\omega}{c}\mathbf{n}\cdot\mathbf{r} - \frac{1}{2}\frac{\omega^2}{c^2}(\mathbf{n}\cdot\mathbf{r})^2 \mp \dots \quad (118-10)$$

درست بودن این بسط به این واقعیت مربوط می‌شود که $(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ یک کمیت کوچک است زیرا طول موج تابش (مرئی یا ماوراء بنفش) در مقایسه با اندازه‌ی اتم بسیار بزرگ است: $kr = 2\pi a_0 / \lambda \sim 10^{-3} \sim 10^{-6} \text{ m} / 10^{-10} \text{ m} \times 2\pi$. در حالت تابش هسته‌ای (مانند تابش γ) نیز kr در محدوده‌ی 10^{-3} با 10^{-15} m هسته r است.

تقریب دوقطبی الکتریکی متناظر با نگاه‌داشتن تنها جمله‌ی اصلی در بسط (۱۱۸-۱۰) است: $e^{\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \simeq 1$ از این رو

$$\langle \psi_f | e^{\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda} \cdot \mathbf{P} | \psi_i \rangle \simeq \boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda} \cdot \langle \psi_f | \mathbf{P} | \psi_i \rangle \quad (119-10)$$

این جمله موجب گذارهای دوقطبی الکتریکی یا گذارهای $E1$ می‌شود. برای محاسبه‌ی این جمله باید از رابطه‌ی زیر استفاده کنیم:

$$\left[\hat{X}, \hat{H}_0 \right] = \left[\hat{X}, \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m_e} + \hat{V}(\mathbf{r}) \right] = \left[\hat{X}, \frac{\hat{P}_x^2}{2m_e} \right] = \frac{i\hbar}{m_e} \hat{P}_x \quad (120-10)$$

که می‌توان آن را به $i\hbar\hat{\mathbf{P}}/m_e = [\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}_0]$ تعمیم داد. از این رو با وارد کردن $[\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}_0]$ در (۱۱۹-۱۰) و استفاده از $\hat{H}_0 |\psi_i\rangle = E_i |\psi_i\rangle$ و $\hat{H}_0 |\psi_f\rangle = E_f |\psi_f\rangle$ داریم:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda} \cdot \langle \psi_f | \mathbf{P} | \psi_i \rangle &= \frac{m_e}{i\hbar} \boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda} \cdot \langle \psi_f | [\mathbf{r}, \hat{H}_0] | \psi_i \rangle = \frac{m_e}{i\hbar} (E_i - E_f) \boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda} \cdot \langle \psi_f | \mathbf{r} | \psi_i \rangle \\ &= im_e \omega_{fi} \boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda} \cdot \langle \psi_f | \mathbf{r} | \psi_i \rangle \end{aligned} \quad (121-10)$$

جاگذاری این جمله در (۱۱۹-۱۰) به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\langle \psi_f | e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda} \cdot \mathbf{P} | \psi_i \rangle = im_e \omega_{fi} \boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda} \cdot \langle \psi_f | \mathbf{r} | \psi_i \rangle \quad (122-10)$$

با وارد کردن (۱۲۲-۱۰) در (۱۱۶-۱۰) و (۱۱۷-۱۰)، آهنگ‌های گذار در چارچوب تقریب دوقطبی را برای گسیل و جذب یک فوتون با انرژی $\hbar\omega_k$ توسط اتم به دست می‌آوریم:

$$\Gamma_{i \rightarrow f}^{\text{گسیل}} = \frac{4\pi^2 e^2 \omega_{fi}^2}{\omega_k V} (n_{\lambda, k} + 1) |\varepsilon_{\lambda}^* \langle \psi_f | \mathbf{r} | \psi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega_k) \quad (123-10)$$

$$\Gamma_{i \rightarrow f}^{\text{جذب}} = \frac{4\pi^2 e^2 \omega_{fi}^2}{\omega_k V} n_{\lambda, k} |\varepsilon_{\lambda} \langle \psi_f | \mathbf{r} | \psi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega_k) \quad (124-10)$$

۱۰-۵-۵ قاعده‌های گزینش دوقطبی الکتریکی

چون \mathbf{r} در مختصات کروی از $\mathbf{r} = (r \sin \theta \cos \phi)\mathbf{i} + (r \sin \theta \sin \phi)\mathbf{j} + (r \cos \theta)\mathbf{k}$ به دست می‌آید، می‌توانیم رابطه‌ی زیر را بنویسیم:

$$\varepsilon_{\lambda} \cdot \mathbf{r} = r(\varepsilon_x \sin \theta \cos \phi + \varepsilon_y \sin \theta \sin \phi + \varepsilon_z \cos \theta) \quad (125-10)$$

با استفاده از رابطه‌های $\sin \theta \cos \phi = i\sqrt{2\pi/3}(Y_{11} + Y_{1-1})$ و $\sin \theta \sin \phi = -\sqrt{2\pi/3}(Y_{11} - Y_{1-1})$ می‌توانیم $\cos \theta = \sqrt{4\pi/3}Y_{10}$ و Y_{1-1} را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$\varepsilon_{\lambda} \cdot \mathbf{r} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r \left(\frac{-\varepsilon_x + i\varepsilon_y}{\sqrt{2}} Y_{11} + \frac{\varepsilon_x + i\varepsilon_y}{\sqrt{2}} Y_{1-1} + \varepsilon_z Y_{10} \right) \quad (126-10)$$

که به نوبه‌ی خود به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\langle \psi_f | \varepsilon_{\lambda} \cdot \mathbf{r} | \psi_i \rangle = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \int_0^{\infty} r^2 R_{n_f l_f}^*(r) R_{n_i l_i}(r) dr \times \int Y_{l_f m_f}^*(\theta, \varphi) \left(\frac{-\varepsilon_x + i\varepsilon_y}{\sqrt{2}} Y_{11} + \frac{\varepsilon_x + i\varepsilon_y}{\sqrt{2}} Y_{1-1} + \varepsilon_z Y_{10} \right) Y_{l_i m_i}(\theta, \varphi) d\Omega \quad (127-10)$$

که در آن از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که $\langle \mathbf{r} | \psi_i \rangle = R_{n_i l_i}(\mathbf{r}) Y_{l_i m_i}(\Omega)$ و $\langle \mathbf{r} | \psi_f \rangle = R_{n_f l_f}(\mathbf{r}) Y_{l_f m_f}(\Omega)$ است.

می‌توان انتگرال‌گیری روی درجه‌های آزادی زاویه‌ای را به وسیله‌ی قضیه‌ی ویگنر-اکارت محاسبه کرد. در فصل ۷ نشان دادیم که

$$\begin{aligned} \int d\Omega Y_{l_f m_f}^* Y_{l_i m_i} Y_{l_f m_f} Y_{l_i m_i} &= \langle l_f, m_f | Y_{l_f m_f} | l_i, m_i \rangle \\ &= \sqrt{\frac{3(2l_i + 1)}{4\pi(2l_f + 1)}} \langle l_i, 1; 0, 0 | l_f, 0 \rangle \langle l_i, 1; m_i, m' | l_f, m_f \rangle \end{aligned} \quad (128-10)$$

با وارد کردن (۱۲۸-۱۰) در (۱۲۳-۱۰) و (۱۲۴-۱۰) و $\Gamma_{i \rightarrow f}^{\text{گسیل}} \sim \langle l_i, 1; m_i, m' | l_f, m_f \rangle^2$ و $\Gamma_{i \rightarrow f}^{\text{جذب}} \sim \langle l_i, 1; m_i, m' | l_f, m_f \rangle^2$ را به دست می‌آوریم. بنابراین قاعده‌های گزینش دوقطبی به وسیله‌ی قاعده‌های گزینش ضریب کلبش-گوردن $\langle l_i, 1; m_i, m' | l_f, m_f \rangle$ مشخص می‌شوند:

- آهنگ‌های گذار صفرند مگر آن‌که مقادیرهای m_f و m_i در شرط $m_f - m_i = m_i + m' = m_f$ یا $m_f - m_i = m'$ صدق کنند. ولی چون m' تنها سه مقدار را به خود می‌گیرد ($m' = -1, 0, 1$)، داریم:

$$m_f - m_i = -1, 0, 1 \quad (10-129)$$

- مقادیرهای مجاز l_f باید بین $l_i - 1$ و $l_i + 1$ قرار داشته باشند (یعنی $l_i - 1 \leq l_f \leq l_i + 1$) بنابراین داریم: $l_f - l_i \leq 1$ یا $-1 \leq l_f - l_i$

$$l_f - l_i = -1, 0, 1 \quad (10-130)$$

توجه کنید که چون ضریب کلبش-گوردن $\langle l_i, 1; m_i, m' | l_f, m_f \rangle$ به‌ازای $l_i = l_f = 0$ صفر می‌شود، هیچ گذاری بین $l_i = 0$ و $l_f = 0$ مجاز نیست.

- سرانجام، چون ضریب $\langle l_i, 1; 0, 0 | l_f, 0 \rangle$ صفر می‌شود مگر آن‌که $l_i = l_f = 0$ یا $l_i - l_f = -1$ باشد آنگاه $(l_i - l_f)$ باید یک عدد صحیح فرد باشد:

$$l_f - l_i = \text{عدد صحیح فرد} \quad (10-131)$$

این بدان معنی است که در حالت گذارهای دوقطبی الکتریکی، حالت‌های نهایی و اولیه باید پاریته‌های متفاوتی داشته باشند. در نتیجه، گذارهای دوقطبی الکتریکی مانند $2s \rightarrow 3p, 1s \rightarrow 2p$ و به همین ترتیب، ممنوع‌اند در حالی که گذارهایی مانند $2p \rightarrow 3s, 1s \rightarrow 2p$ و به همین ترتیب، مجاز هستند.

۱۰-۵-۶ گسیلش خودبه‌خودی

از (۱۰-۱۲۳) روشن است که آهنگ گسیل یک فوتون از یک اتم، حتی در غیاب یک میدان تابشی خارجی ($n_{\lambda, k} = 0$)، صفر نیست. این حالت متناظر با گسیل خودبه‌خود یک فوتون است. می‌توان با در نظر گرفتن $n_{\lambda, k} = 0$ ، آهنگ گذار کل متناظر با گسیلش خودبه‌خودی را از (۱۰-۱۲۳) نتیجه گرفت:

$$\Gamma_{i \rightarrow f}^{\text{گسیل}} = \frac{4\pi^2 \omega_{fi}^2}{\omega V} |\mathbf{e}_{\lambda}^* \cdot \mathbf{d}_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega) \quad (10-132)$$

که در آن \mathbf{d}_{fi} عنصر ماتریسی گشتاور دوقطبی الکتریکی الکترون ($\mathbf{d} = -e\mathbf{r}$) است:

$$\mathbf{d}_{fi} = \langle \psi_f | \mathbf{d} | \psi_i \rangle = -e \langle \psi_f | \mathbf{r} | \psi_i \rangle \quad (10-133)$$

رابطه‌ی (۱۰-۱۳۲) احتمال گذار در واحد زمان متناظر با گذار اتم از حالت اولیه‌ی $|\psi_i\rangle$ به حالت نهایی $|\psi_f\rangle$ در نتیجه‌ی گسیل خودبه‌خود یک فوتون با انرژی $\hbar\omega$ از آن است. بنابراین حالت‌های نهایی سیستم از تولید حالت‌های اتمی گسسته و پیوستاری از حالت‌های فوتونی تشکیل شده است. به‌صورت کلی، فوتون گسیل شده به‌صورت فوتونی با تکانه‌ی زاویه‌ای در بازه‌ی تکانه‌ی $(p, p + dp)$ واقع در

حول $p = \hbar k = \hbar \omega / c$ آشکارسازی خواهد شد. آنگاه باید آهنگ گذار ($10-132$) روی پیوستاری از حالت‌های فوتونی نهایی جمع بسته شود. تعداد حالت‌های فوتونی نهایی در داخل واحد حجم V (که تکانه‌های آنها در بازه $(p, p + dp)$ قرار دارند) از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$d^3n = \frac{V d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{V p^2 dp d\Omega}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{V \hbar^3 \omega^2}{(2\pi\hbar)^3 c^3} d\Omega d\omega = \frac{V \omega^2}{(2\pi c)^3} d\Omega d\omega \quad (10-134)$$

بنابراین آهنگ گذار متناظر با گسیل یک فوتون در زاویه‌ی فضایی $d\Omega$ از انتگرال‌گیری ($10-132$) روی $d\omega$ به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} dW_{i \rightarrow f}^{\text{گسیل}} &= \frac{V}{(2\pi)^3 c^3} d\Omega \int \omega^2 \Gamma_{i \rightarrow f}^{\text{گسیل}} d\omega \\ &= \frac{1}{2\pi c^3} |\epsilon_{fi}^* \cdot \mathbf{d}_{fi}|^2 d\Omega \int \omega_{fi}^2 \omega \delta(E_f - E_i + \hbar\omega) d\omega \\ &= \frac{1}{2\pi \hbar c^3} |\epsilon_{\lambda}^* \cdot \mathbf{d}_{fi}|^2 d\Omega \int \omega_{fi}^2 \omega \delta(\omega_{if} - \omega) d\omega \end{aligned} \quad (10-135)$$

که در آن از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که $\delta(E_f - E_i + \hbar\omega) = (1/\hbar)\delta(\omega_{if} - \omega)$ با $\omega_{if} = (E_i - E_f)/\hbar$. با انتگرال‌گیری، می‌توانیم ($10-135$) را به رابطه‌ی زیر کاهش دهیم:

$$dW_{i \rightarrow f}^{\text{گسیل}} = \frac{\omega^3}{2\pi \hbar c^3} |\epsilon_{\lambda}^* \cdot \mathbf{d}_{fi}|^2 d\Omega \quad (10-136)$$

آهنگ گذار ($10-136$) متناظر با یک قطبش خاص است یعنی فوتون گسیل شده در جهت \mathbf{n} حرکت می‌کند (زیرا $\mathbf{k} = k\mathbf{n}$) که عمود بر ϵ_{λ}^* است. برای یافتن آهنگ گذار متناظر با هر قطبش، باید روی دو قطبش فوتون جمع ببندیم:

$$\sum_{\lambda=1}^2 |\epsilon_{\lambda}^* \cdot \mathbf{d}_{fi}|^2 = |\epsilon_1^* \cdot \mathbf{d}_{fi}|^2 + |\epsilon_2^* \cdot \mathbf{d}_{fi}|^2 = |\mathbf{d}_{fi}|^2 - |(d_{fi})_3|^2 \quad (10-137)$$

چون سه جهت \mathbf{d}_{fi} معادل‌اند، داریم:

$$\langle |(d_{fi})_1|^2 \rangle = \langle |(d_{fi})_2|^2 \rangle = \langle |(d_{fi})_3|^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle |\mathbf{d}_{fi}|^2 \rangle \quad (10-138)$$

بنابراین میانگین‌گیری روی قطبش، نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\sum_{\lambda=1}^2 |\epsilon_{\lambda}^* \cdot \mathbf{d}_{fi}|^2 = |\mathbf{d}_{fi}|^2 - \frac{1}{3} |\mathbf{d}_{fi}|^2 = \frac{2}{3} |\mathbf{d}_{fi}|^2 \quad (10-139)$$

با جاگذاری ($10-139$) در ($10-136$)، آهنگ گذار میانگین متناظر با گسیل فوتون در داخل زاویه‌ی فضایی $d\Omega$ را به دست می‌آوریم:

$$dW_{i \rightarrow f}^{\text{گسیل}} = \frac{\omega^3}{3\pi \hbar c^3} |\mathbf{d}_{fi}|^2 d\Omega \quad (10-140)$$

انتگرال‌گیری روی تمام جهت‌های (فوتونی) ممکن $|\mathbf{d}_{fi}|^2$ در انتگرال‌گیری در نظر گرفته نشده است زیرا تنها روی قسمت زاویه‌ای درجه‌های آزادی فوتون انتگرال می‌گیریم و نه روی قسمت زاویه‌ای درجه‌های آزادی الکترون، $\int d\Omega = 4\pi$ را نتیجه می‌دهد. بنابراین آهنگ گذار وابسته به گسیل فوتون برابر است با

$$W_{i \rightarrow f}^{\text{گسیل}} = \frac{4}{3} \frac{\omega^3}{\hbar c^3} |\mathbf{d}_{fi}|^2 = \frac{4}{3} \frac{\omega^3 e^2}{\hbar c^3} |\langle \psi_f | \mathbf{r} | \psi_i \rangle|^2 \quad (141-10)$$

که در آن $\omega = (E_f - E_i)/\hbar$ است.

توان (یا شدت) کل تابشی توسط الکترون، از ضرب آهنگ‌های کل (۱۴۱-۱۰) در $\hbar\omega$ به دست می‌آید:

$$I_{i \rightarrow f} = \hbar\omega W_{i \rightarrow f}^{\text{گسیل}} = \frac{4}{3} \frac{\omega^4}{c^3} |\mathbf{d}_{fi}|^2 = \frac{4}{3} \frac{\omega^4 e^2}{c^3} |\langle \psi_f | \mathbf{r} | \psi_i \rangle|^2 \quad (142-10)$$

آهنگ‌های گذار به دست آمده در بالا (۱۴۱-۱۰) و (۱۴۲-۱۰) برای اتم‌های تک‌الکترونی به دست آمده‌اند. برای اتم‌هایی که دارای Z الکترون‌اند، باید گشتاور دوقطبی $\mathbf{d} = -e\mathbf{r}$ را با گشتاور دوقطبی تمام Z الکترون جایگزین کنیم: $\mathbf{d} = -e \sum_{j=1}^Z \mathbf{r}_j$.

می‌توان عمر میانگین τ یک حالت برانگیخته را با جمع احتمال‌های گذار کل در واحد زمان (۱۴۱-۱۰) به‌ازای تمام حالت‌های نهایی ممکن به دست آورد:

$$\tau = \frac{1}{W} = \frac{1}{\sum_f W_{i \rightarrow f}} \quad (143-10)$$

مثال ۱۰-۳

ذره‌ای با بار q و جرم m در پتانسیل یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی با بسامد ω حرکت می‌کند. (الف) آهنگ گسیل خودبه‌خودی را برای یک گذار از حالت برانگیخته‌ی $|n\rangle$ به حالت پایه بیابید. (ب) هنگامی که ذره یک الکترون و $\omega = 3 \times 10^{14} \text{ rad s}^{-1}$ باشد، تخمینی برای آهنگ محاسبه شده در (الف) و عمر میانگین حالت $|n\rangle$ به دست آورید.

(پ) شرطی را به دست آورید که تحت آن، تقریب دوقطبی برای ذره‌ی (ب) معتبر باشد.

حل

(الف) آهنگ گسیل خودبه‌خودی برای یک گذار از حالت برانگیخته‌ی $|n\rangle$ به $|0\rangle$ از (۱۴۱-۱۰)

به دست می‌آید:

$$W_{n \rightarrow 0}^{\text{گسیل}} = \frac{4}{3} \frac{\omega^3 q^2}{\hbar c^3} \left| \langle 0 | \hat{X} | n \rangle \right|^2 \quad (144-10)$$

که در آن $\omega = (E_n - E_0)/\hbar = (n + \frac{1}{2})\omega_0 - \frac{1}{2}\omega_0 = n\omega_0$. چون $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ و $\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ با توجه به این که $\hat{X} = \sqrt{\hbar/(2m\omega_0)}(\hat{a}^\dagger + \hat{a})$ داریم:

$$\langle 0|\hat{X}|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\langle 0|\hat{a}^\dagger + \hat{a}|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\left[\sqrt{n+1}\delta_{0,n+1} + \sqrt{n}\delta_{0,n-1}\right] \quad (۱۴۵-۱۰)$$

بنابراین تنها یک گذار از $|1\rangle$ به $|0\rangle$ امکان پذیر است از این رو $n = 1$ ، $\omega = \omega_0$ و $\langle 0|\hat{X}|1\rangle = \sqrt{\hbar/(2m\omega_0)}$ است. آنگاه آهنگ گسیل (۱۴۴-۱۰) به صورت زیر در می آید:

$$W_{1 \rightarrow 0}^{\text{گسیل}} = \frac{4}{3} \frac{\omega_0^3 q^2}{\hbar c^3} \left| \langle 0|\hat{X}|1\rangle \right|^2 = \frac{4}{3} \frac{\omega_0^3 q^2}{\hbar c^3} \frac{\hbar}{2m\omega_0} = \frac{2}{3} \frac{\omega_0^2 q^2}{m c^3} \quad (۱۴۶-۱۰)$$

(ب) اگر ذره یک الکترون باشد آنگاه $q = -e$ است و داریم:

$$W_{1 \rightarrow 0}^{\text{گسیل}} = \frac{2}{3} \frac{\omega_0^2 e^2}{m_e c^3} = \frac{2}{3} \frac{\omega_0^2 \hbar}{m_e c^2} = \frac{2}{3} \frac{\hbar c}{m_e c^2} \frac{\omega_0^2}{c} \quad (۱۴۷-۱۰)$$

با استفاده از $\hbar c = 197,33 \text{ MeV fm}$ و $m_e c^2 = 0,511 \text{ MeV}$ داریم:

$$W_{1 \rightarrow 0}^{\text{گسیل}} = \frac{2}{3} \frac{\hbar c}{m_e c^2} \frac{\omega_0^2}{c} = \frac{2}{3 \times 137} \frac{197,33 \text{ MeV fm}}{0,511 \text{ MeV}} \frac{9 \times 10^{28} \text{ s}^{-2}}{3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}} = 5,6 \times 10^5 \text{ s}^{-1} \quad (۱۴۸-۱۰)$$

عمر میانگین حالت $|1\rangle$ برابر است با

$$\tau = \frac{1}{W_{1 \rightarrow 0}^{\text{گسیل}}} = \frac{3 m_e c^3}{2 \omega_0^2 e^2} = \frac{1}{5,6 \times 10^5 \text{ s}^{-1}} = 0,18 \times 10^{-5} \text{ s} \quad (۱۴۹-۱۰)$$

(پ) برای این که تقریب دوقطبی معتبر باشد، باید داشته باشیم: $kx \ll 1$ که در آن x به ازای $n = 1$ در (۱۴۵-۱۰) محاسبه شد: $x = \sqrt{\hbar/(2m_e\omega_0)}$. در رابطه با k باید گفت که یک تقریب نه چندان دقیق، $k = \omega/c = (E_1 - E_0)/(\hbar c) = \omega_0/c$ را نتیجه می دهد. بنابراین داریم:

$$kx = \frac{\omega_0}{c} \sqrt{\frac{\hbar}{2m_e\omega_0}} = \sqrt{\frac{\hbar\omega_0}{2m_e c^2}} \ll 1 \implies \hbar\omega_0 \ll 2m_e c^2 \quad (۱۵۰-۱۰)$$

که در واقع درست است زیرا $2m_e c^2 = 1,022 \text{ MeV}$ در مقایسه با

$$\hbar\omega_0 = \hbar c \frac{\omega_0}{c} = 197,33 \text{ MeV fm} \times \frac{3 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}}{3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}} = 2,0 \times 10^{-7} \text{ MeV} \quad (۱۵۱-۱۰)$$

بسیار بزرگ است.

۶-۱۰ مسأله‌های حل شده

مسأله‌ی ۱-۱۰

(الف) عملگرهای مکان و تکانه $(\hat{X}_H(t))$ و $(\hat{P}_H(t))$ در تصویر هایزنبرگ را برای یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی محاسبه کنید.

(ب) معادله‌ی حرکت هایزنبرگ را برای $\hat{X}_H(t)$ و $\hat{P}_H(t)$ بیابید.

حل

در تصویر شرودینگر که در آن عملگرها به صورت صریح به زمان بستگی ندارند، هامیلتونی یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{X}^2 \quad (۱۵۲-۱۰)$$

(الف) با استفاده از رابطه‌های جابه‌جایی

$$[\hat{H}, \hat{X}] = \frac{1}{2m}[\hat{P}^2, \hat{X}] = -\frac{i\hbar}{m}\hat{P} \quad (۱۵۳-۱۰)$$

$$[\hat{H}, \hat{P}] = \frac{1}{2}m\omega^2[\hat{X}^2, \hat{P}] = i\hbar m\omega^2 \hat{X} \quad (۱۵۴-۱۰)$$

همراه با

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{1}{3!}[\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots \quad (۱۵۵-۱۰)$$

می‌توانیم بنویسیم (معادله‌ی (۱۱-۱۰) را ببینید):

$$\begin{aligned} \hat{X}_H(t) &= e^{it\hat{H}/\hbar} \hat{X} e^{-it\hat{H}/\hbar} = \hat{X} + \frac{it}{\hbar}[\hat{H}, \hat{X}] + \frac{1}{2!} \left(\frac{it}{\hbar}\right)^2 [\hat{H}, [\hat{H}, \hat{X}]] + \dots \\ &= \hat{X} + \frac{t}{m}\hat{P} - \frac{(\omega t)^2}{2!}\hat{X} - \frac{(\omega t)^3}{3!}\frac{1}{m\omega}\hat{P} + \frac{(\omega t)^4}{4!}\hat{X} + \frac{(\omega t)^5}{5!}\frac{1}{m\omega}\hat{P} + \dots \\ &= \hat{X} \left[1 - \frac{(\omega t)^2}{2!} + \frac{(\omega t)^4}{4!} + \dots \right] + \frac{1}{m\omega}\hat{P} \left[(\omega t) - \frac{(\omega t)^3}{3!} + \frac{(\omega t)^5}{5!} + \dots \right] \end{aligned} \quad (۱۵۶-۱۰)$$

یا

$$\hat{X}_H(t) = \hat{X} \cos(\omega t) + \frac{1}{m\omega}\hat{P} \sin(\omega t) \quad (۱۵۷-۱۰)$$

محاسبه‌ای مشابه، نتیجه‌ی زیر را می‌دهد (معادله‌ی (۱۱-۱۰) را ببینید):

$$\begin{aligned}\hat{P}_H(t) &= e^{it\hat{H}/\hbar} \hat{P} e^{-it\hat{H}/\hbar} = \hat{P} + \frac{it}{\hbar} [\hat{H}, \hat{P}] + \frac{1}{2!} \left(\frac{it}{\hbar}\right)^2 [\hat{H}, [\hat{H}, \hat{P}]] + \dots \\ &= \hat{P} \left[1 - \frac{(\omega t)^2}{2!} + \frac{(\omega t)^4}{4!} + \dots \right] - m\omega \hat{X} \left[(\omega t) - \frac{(\omega t)^3}{3!} + \frac{(\omega t)^5}{5!} + \dots \right]\end{aligned}\quad (۱۵۸-۱۰)$$

یا

$$\hat{P}_H(t) = \hat{P} \cos(\omega t) - m\omega \hat{X} \sin(\omega t) \quad (۱۵۹-۱۰)$$

(ب) برای یافتن معادله‌های حرکت $\hat{X}_H(t)$ و $\hat{P}_H(t)$ باید از معادله‌ی هایزنبرگ $d\hat{A}_H(t)/dt = (\hat{A}_H(t), \hat{H})$ استفاده کنیم که همراه با (۱۵۳-۱۰) و (۱۵۴-۱۰) به رابطه‌های زیر می‌انجامد:

$$\frac{d\hat{X}_H(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{X}_H(t), \hat{H}] = \frac{1}{i\hbar} e^{it\hat{H}/\hbar} [\hat{X}, \hat{H}] e^{-it\hat{H}/\hbar} = \frac{1}{i\hbar} \frac{i\hbar}{m} e^{it\hat{H}/\hbar} \hat{P} e^{-it\hat{H}/\hbar} \quad (۱۶۰-۱۰)$$

$$\frac{d\hat{P}_H(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{P}_H(t), \hat{H}] = \frac{1}{i\hbar} e^{it\hat{H}/\hbar} [\hat{P}, \hat{H}] e^{-it\hat{H}/\hbar} = \frac{(-i\hbar m\omega^2)}{i\hbar} e^{it\hat{H}/\hbar} \hat{X} e^{-it\hat{H}/\hbar} \quad (۱۶۱-۱۰)$$

یا

$$\frac{d\hat{X}_H(t)}{dt} = \frac{1}{m} \hat{P}_H(t), \quad \frac{d\hat{P}_H(t)}{dt} = -m\omega^2 \hat{X}_H(t) \quad (۱۶۲-۱۰)$$

مسئله‌ی ۲-۱۰

با استفاده از عبارت‌های به‌دست آمده در مسئله‌ی حل شده‌ی ۱-۱۰ برای $\hat{P}_H(t)$ و $\hat{X}_H(t)$ ، جابه‌جاگرهای زیر را برای یک نوسانگر هماهنگ حساب کنید:

$$[\hat{H}_H(t_1), \hat{P}_H(t_2)], \quad [\hat{X}_H(t_1), \hat{X}_H(t_2)], \quad [\hat{P}_H(t_1), \hat{P}_H(t_2)]$$

حل

با استفاده از (۱۵۷-۱۰) و (۱۵۹-۱۰) همراه با رابطه‌های جابه‌جایی $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$ و $[\hat{X}, \hat{X}] = 0$ داریم:

$$\begin{aligned}[\hat{X}_H(t_1), \hat{P}_H(t_2)] &= \left[\hat{X} \cos(\omega t_1) + \frac{1}{m\omega} \hat{P} \sin(\omega t_1), \hat{P} \cos(\omega t_2) - m\omega \hat{X} \sin(\omega t_2) \right] \\ &= [\hat{X}, \hat{P}] \cos(\omega t_1) \cos(\omega t_2) - [\hat{P}, \hat{X}] \sin(\omega t_1) \sin(\omega t_2) \\ &= i\hbar [\cos(\omega t_1) \cos(\omega t_2) + \sin(\omega t_1) \sin(\omega t_2)]\end{aligned}\quad (۱۶۳-۱۰)$$

یا

$$[\hat{X}_H(t_1), \hat{P}_H(t_2)] = i\hbar \cos[\omega(t_1 - t_2)] \quad (۱۶۴-۱۰)$$

محاسبه‌ای مشابه، نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\begin{aligned} [\hat{X}_H(t_1), \hat{H}_H(t_2)] &= \left[\hat{X} \cos(\omega t_1) + \frac{1}{m\omega} \hat{P} \sin(\omega t_1), \hat{X} \cos(\omega t_2) + \frac{1}{m\omega} \hat{P} \sin(\omega t_2) \right] \\ &= \frac{1}{m\omega} [\hat{X}, \hat{P}] \cos(\omega t_1) \sin(\omega t_2) + \frac{1}{m\omega} [\hat{P}, \hat{X}] \sin(\omega t_1) \cos(\omega t_2) \\ &= \frac{i\hbar}{m\omega} [\cos(\omega t_1) \sin(\omega t_2) - \sin(\omega t_1) \cos(\omega t_2)] \quad (۱۶۵-۱۰) \end{aligned}$$

یا

$$[\hat{X}_H(t_1), \hat{X}_H(t_2)] = -\frac{i\hbar}{m\omega} \sin[\omega(t_1 - t_2)] \quad (۱۶۶-۱۰)$$

به صورت مشابه، داریم:

$$\begin{aligned} [\hat{P}_H(t_1), \hat{P}_H(t_2)] &= \left[\hat{X} \cos(\omega t_1) - m\omega \hat{X} \sin(\omega t_1), \hat{P} \cos(\omega t_2) - m\omega \hat{X} \sin(\omega t_2) \right] \\ &= -m\omega [\hat{P}, \hat{X}] \cos(\omega t_1) \sin(\omega t_2) - m\omega [\hat{X}, \hat{P}] \sin(\omega t_1) \cos(\omega t_2) \\ &= -i\hbar m\omega [\sin(\omega t_1) \cos(\omega t_2) - \cos(\omega t_1) \sin(\omega t_2)] \quad (۱۶۷-۱۰) \end{aligned}$$

یا

$$[\hat{P}_H(t_1), \hat{P}_H(t_2)] = -i\hbar m\omega \sin[\omega(t_1 - t_2)] \quad (۱۶۸-۱۰)$$

مسأله‌ی ۳-۱۰

کمیت $\langle n | \hat{X}_H(t) \hat{X} | n \rangle$ را برای n امین حالت برانگیخته‌ی یک نوسانگر هماهنگ یک بعدی حساب کنید که در آن $\hat{X}_H(t)$ و \hat{X} عملگرهای مکان در تصویر هایزنبرگ و تصویر شرودینگر را نمایش می‌دهند.

حل

با استفاده از عبارت $\hat{X}_H(t)$ محاسبه شده در (۱۵۷-۱۰)، داریم:

$$\langle n | \hat{X}_H(t) \hat{X} | n \rangle = \langle n | \hat{X}^2 | n \rangle \cos(\omega t) + \frac{1}{m\omega} \langle n | \hat{P} \hat{X} | n \rangle \sin(\omega t) \quad (۱۶۹-۱۰)$$

چون برای یک نوسانگر هماهنگ \hat{P} و \hat{X} از رابطه‌های زیر به دست می‌آیند:

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}), \quad \hat{P} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \quad (۱۷۰-۱۰)$$

و $\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ و $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ است، داریم:

$$\langle n|\hat{X}^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n|\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} (2n+1) \quad (171-10)$$

$$\langle n|\hat{P}\hat{X}|n\rangle = \frac{i\hbar}{2} \langle n|\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 - \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = -\frac{i\hbar}{2} \quad (172-10)$$

زیرا $\langle n|\hat{a}^{\dagger 2}|n\rangle = \langle n|\hat{a}^2|n\rangle = 0$ ، $\langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = n$ و $\langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle = n+1$ است. با وارد کردن (۱۷۱-۱۰) و (۱۷۲-۱۰) در (۱۶۹-۱۰)، به دست می‌آوریم:

$$\langle n|\hat{X}_H(t)\hat{X}|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} [(2n+1)\cos(\omega t) - i\sin(\omega t)] \quad (173-10)$$

مسئله‌ی ۴-۱۰

هامیلتونی ناشی از برهمکنش ذره‌ای به جرم m ، بار q و اسپین S با یک میدان مغناطیسی در امتداد محور z برابر با $\hat{H} = -(qB/mc)\hat{S}_z$ است. معادله‌های حرکت هایزنبرگ را برای عملگرهای اسپینی وابسته به زمان $\hat{S}_x(t)$ ، $\hat{S}_y(t)$ و $\hat{S}_z(t)$ بنویسید و آنها را برای به دست آوردن این عملگرها به صورت تابع‌هایی از زمان حل کنید.

حل

\hat{H} را به شکل سبک‌تر $\hat{H} = \omega\hat{S}_z$ می‌نویسیم که در آن $\omega = -qB/mc$ است. می‌توان جابه‌جایی \hat{H} با مؤلفه‌های عملگر اسپین را یک‌باره از $[\hat{S}_x, \hat{S}_z] = -i\hbar\hat{S}_y$ و $[\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x$ نتیجه گرفت:

$$[\hat{S}_x, \hat{H}] = -i\hbar\omega\hat{S}_y, \quad [\hat{S}_y, \hat{H}] = i\hbar\omega\hat{S}_x, \quad [\hat{S}_z, \hat{H}] = 0 \quad (174-10)$$

می‌توان معادله‌های حرکت هایزنبرگ مربوط به $\hat{S}_x(t)$ ، $\hat{S}_y(t)$ و $\hat{S}_z(t)$ را از

$$d\hat{A}_H(t)/dt = (\backslash/i\hbar)[\hat{A}_H(t), \hat{H}] = (\backslash/i\hbar)e^{it\hat{H}/\hbar}[\hat{A}(\circ), \hat{H}]e^{-it\hat{H}/\hbar}$$

به دست آورد که با استفاده از (۱۷۴-۱۰) به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{S}_x(t)}{dt} &= \frac{\backslash}{i\hbar}[\hat{S}_x(t), \hat{H}] = \frac{\backslash}{i\hbar}e^{it\hat{H}/\hbar}[\hat{S}_x(\circ), \hat{H}]e^{-it\hat{H}/\hbar} \\ &= \frac{-i\hbar\omega}{i\hbar}e^{it\hat{H}/\hbar}\hat{S}_y(\circ)e^{-it\hat{H}/\hbar} = -\omega\hat{S}_y(t) \end{aligned} \quad (175-10)$$

به صورت مشابه، داریم:

$$\frac{d\hat{S}_y(t)}{dt} = \frac{\backslash}{i\hbar}e^{it\hat{H}/\hbar}[\hat{S}_y(\circ), \hat{H}]e^{-it\hat{H}/\hbar} = \frac{i\hbar\omega}{i\hbar}e^{it\hat{H}/\hbar}\hat{S}_x(\circ)e^{-it\hat{H}/\hbar} = \omega\hat{S}_x(t) \quad (176-10)$$

$$\frac{d\hat{S}_z(t)}{dt} = \frac{\backslash}{i\hbar}e^{it\hat{H}/\hbar}[\hat{S}_z(\circ), \hat{H}]e^{-it\hat{H}/\hbar} = 0 \quad (177-10)$$

برای حل (۱۷۵-۱۰) و (۱۷۶-۱۰) می‌توانیم آنها را به دو معادله‌ی مناسب‌تر زیر بنویسیم:

$$\frac{d\hat{S}_{\pm}(t)}{dt} = \pm i\omega \hat{S}_{\pm}(t) \quad (۱۷۸-۱۰)$$

که در آن $\hat{S}_{\pm}(t) = \hat{S}_x(t) \pm i\hat{S}_y(t)$ است. جواب‌های (۱۷۸-۱۰) عبارتند از $\hat{S}_{\pm}(t) = \hat{S}_{\pm}(\circ)e^{\pm i\omega t}$ که هنگامی که با $\hat{S}_x(t) = \frac{1}{2}[\hat{S}_+(t) + \hat{S}_-(t)]$ و $\hat{S}_y(t) = \frac{1}{2i}[\hat{S}_+(t) - \hat{S}_-(t)]$ ترکیب شوند، به رابطه‌های زیر می‌انجامند:

$$\hat{S}_x(t) = \hat{S}_x(\circ) \cos(\omega t) - \hat{S}_y(\circ) \sin(\omega t) \quad (۱۷۹-۱۰)$$

$$\hat{S}_y(t) = \hat{S}_y(\circ) \cos(\omega t) + \hat{S}_x(\circ) \sin(\omega t) \quad (۱۸۰-۱۰)$$

جواب (۱۷۷-۱۰) روشن است:

$$\frac{d\hat{S}_z(t)}{dt} = 0 \quad \implies \quad \hat{S}_z(t) = \hat{S}_z(\circ) \quad (۱۸۱-۱۰)$$

مسأله‌ی ۵-۱۰

یک ذره‌ی بدون اسپین به جرم m که در یک چاه پتانسیل نامتناهی یک بعدی با دیواره‌هایی در $x = 0$ و $x = a$ حرکت می‌کند را در نظر بگیرید.

(الف) $\hat{X}_H(t)$ و $\hat{P}_H(t)$ را در تصویر هایزنبرگ بیابید.

(ب) اگر در $t = 0$ ذره در حالت $[\phi_1(x) + \phi_2(x)]/\sqrt{2}$ باشد که در آن $\phi_1(x)$ و $\phi_2(x)$ به ترتیب حالت‌های پایه و نخستین حالت برانگیخته با $\phi_n(x) = \sqrt{2/a} \sin(n\pi x/a)$ هستند، بردار حالت $\psi(x, t)$ را به ازای $t > 0$ در تصویر شرودینگر بیابید.

(پ) $\langle \psi(x, t) | \hat{X} | \psi(x, t) \rangle$ و $\langle \psi(x, t) | \hat{P} | \psi(x, t) \rangle$ را به صورت تابعی از زمان در تصویر شرودینگر حساب کنید.

(ت) $\langle \psi(x, t) | \hat{X}_H(t) | \psi(x, t) \rangle$ و $\langle \psi(x, t) | \hat{P}_H(t) | \psi(x, t) \rangle$ را به صورت تابعی از زمان در تصویر شرودینگر حساب کنید.

حل

(الف) چون هامیلتونی ذره صرفاً جنبشی است $(\hat{H} = \hat{P}^2/2m)$ ، داریم: $[\hat{H}, \hat{P}] = 0$ و

$$[\hat{H}, \hat{X}] = \frac{1}{2m} [\hat{P}^2, \hat{X}] = -\frac{i\hbar}{m} \hat{P} \quad (۱۸۲-۱۰)$$

با استفاده از این رابطه‌ها همراه با (۱۵۵-۱۰)، به دست می‌آوریم:

$$\hat{X}_H(t) = e^{it\hat{H}/\hbar} \hat{X} e^{-it\hat{H}/\hbar} = \hat{X} + \frac{it}{\hbar} [\hat{H}, \hat{X}] + \frac{1}{2!} \left(\frac{it}{\hbar}\right)^2 [\hat{H}, [\hat{H}, \hat{X}]] + \dots \quad (۱۸۳-۱۰)$$

و چون $[\hat{H}, [\hat{H}, \hat{X}]] = -(i\hbar/m)[\hat{H}, \hat{P}] = 0$ است، به نتیجه‌ی زیر می‌رسیم:

$$\hat{X}_H(t) = \hat{X} + \frac{t}{m}\hat{P} \quad (۱۸۴-۱۰)$$

از سوی دیگر، چون $[\hat{H}, \hat{P}] = 0$ است، داریم:

$$\hat{P} = \hat{P}_H(t) \quad (۱۸۵-۱۰)$$

(ب) چون انرژی تراز n م از $E_n = n^2\pi^2\hbar^2/(2ma^2)$ به دست می‌آید، داریم:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\phi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + \phi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar} \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{a}} \left[e^{-iE_1t/\hbar} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + e^{-iE_2t/\hbar} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \right] \end{aligned} \quad (۱۸۶-۱۰)$$

(پ) با استفاده از (۱۸۶-۱۰)، می‌توانیم بنویسیم:

$$\begin{aligned} \langle \psi(x, t) | \hat{X} | \psi(x, t) \rangle &= \frac{1}{2} \left[\langle \phi_1 | \hat{X} | \phi_1 \rangle + \langle \phi_2 | \hat{X} | \phi_2 \rangle + \langle \phi_1 | \hat{X} | \phi_2 \rangle e^{-i(E_2 - E_1)t/\hbar} \right. \\ &\quad \left. + \langle \phi_2 | \hat{X} | \phi_1 \rangle e^{i(E_2 - E_1)t/\hbar} \right] \end{aligned} \quad (۱۸۷-۱۰)$$

چون $\langle \phi_n | \hat{X} | \phi_n \rangle = a/2$ است (فصل ۴) و داریم

$$\langle \phi_1 | \hat{X} | \phi_2 \rangle = \langle \phi_2 | \hat{X} | \phi_1 \rangle = \frac{2}{a} \int_0^a x \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx = -\frac{16a}{9\pi^2} \quad (۱۸۸-۱۰)$$

می‌توانیم (۱۸۷-۱۰) را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$\begin{aligned} \langle \psi(x, t) | \hat{X} | \psi(x, t) \rangle &= \frac{1}{2} \left[\frac{a}{2} + \frac{a}{2} - \frac{16a}{9\pi^2} \left(e^{-i(E_2 - E_1)t/\hbar} + e^{i(E_2 - E_1)t/\hbar} \right) \right] \\ &= \frac{a}{2} - \frac{16a}{9\pi^2} \cos\left(\frac{3\pi^2\hbar t}{2ma^2}\right) \end{aligned} \quad (۱۸۹-۱۰)$$

زیرا $E_2 - E_1 = 3\pi^2\hbar^2/(2ma^2)$

محاسبه‌ای مشابه که در آن از $\langle \phi_n | \hat{P} | \phi_n \rangle = 0$ استفاده می‌شود و داریم

$$\langle \phi_1 | \hat{P} | \phi_2 \rangle = -i\hbar \frac{2\pi}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx = \frac{\hbar i}{3a} = -\langle \phi_2 | \hat{P} | \phi_1 \rangle \quad (۱۹۰-۱۰)$$

به

$$\langle \psi(x, t) | \hat{P} | \psi(x, t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\langle \phi_1 | \hat{P} | \phi_1 \rangle + \langle \phi_2 | \hat{P} | \phi_2 \rangle + \langle \phi_1 | \hat{P} | \phi_2 \rangle e^{-i(E_2 - E_1)t/\hbar} + \langle \phi_2 | \hat{P} | \phi_1 \rangle e^{i(E_2 - E_1)t/\hbar} \right] \quad (191-10)$$

یا به

$$\begin{aligned} \langle \psi(x, t) | \hat{P} | \psi(x, t) \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{\lambda i \hbar}{\sqrt{2} a} e^{-i(E_2 - E_1)t/\hbar} - \frac{\lambda i \hbar}{\sqrt{2} a} e^{i(E_2 - E_1)t/\hbar} \right] \\ &= \frac{\lambda \hbar}{\sqrt{2} a} \sin \left(\frac{\sqrt{2} \pi^2 \hbar t}{2 m a \sqrt{2}} \right) \end{aligned} \quad (192-10)$$

می‌انجامد.

(ت) از (۱۸۴-۱۰) داریم:

$$\langle \psi(x, t) | \hat{X}_H(t) | \psi(x, t) \rangle = \langle \psi(x, t) | \hat{X} | \psi(x, t) \rangle + \frac{t}{m} \langle \psi(x, t) | \hat{P} | \psi(x, t) \rangle \quad (193-10)$$

با وارد کردن عبارت‌های مربوط به $\langle \psi(x, t) | \hat{X} | \psi(x, t) \rangle$ و $\langle \psi(x, t) | \hat{P} | \psi(x, t) \rangle$ که در (۱۸۹-۱۰) و (۱۹۲-۱۰) محاسبه شدند، رابطه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$\langle \psi(x, t) | \hat{X}_H(t) | \psi(x, t) \rangle = \frac{a}{\sqrt{2}} - \frac{16a}{9\pi^2} \cos \left(\frac{\sqrt{2} \pi^2 \hbar t}{2 m a \sqrt{2}} \right) + \frac{\lambda \hbar t}{\sqrt{2} m a} \sin \left(\frac{\sqrt{2} \pi^2 \hbar t}{2 m a \sqrt{2}} \right) \quad (194-10)$$

و $\langle \psi(x, t) | \hat{P}_H(t) | \psi(x, t) \rangle$ از (۱۹۲-۱۰) به دست می‌آید:

$$\langle \psi(x, t) | \hat{P}_H(t) | \psi(x, t) \rangle = \langle \psi(x, t) | \hat{P} | \psi(x, t) \rangle = \frac{\lambda \hbar}{\sqrt{2} a} \sin \left(\frac{\sqrt{2} \pi^2 \hbar t}{2 m a \sqrt{2}} \right) \quad (195-10)$$

زیرا همانطور که در (۱۸۵-۱۰) نشان داده شد، داریم: $\hat{P}_H(t) = \hat{P}$.

مسأله‌ی ۶-۱۰

ذره‌ای در ابتدا (یعنی $t \rightarrow -\infty$) در حالت پایه‌ی خود در یک چاه پتانسیل نامتناهی با دیوارهایی واقع در $x = 0$ و $x = a$ قرار دارد و در $t = 0$ تحت تأثیر اختلال وابسته به زمان $\hat{V}(t) = \varepsilon \hat{x} e^{-t}$ قرار می‌گیرد که در آن ε یک عدد حقیقی کوچک است. احتمال آن که ذره پس از مدت زمان به اندازه‌ی کافی طولانی (یعنی $t \rightarrow \infty$) در نخستین حالت برانگیخته‌اش یافت شود را محاسبه کنید.

حل

احتمال گذار از حالت پایه $n = 1$ (که در آن $t \rightarrow -\infty$) به نخستین حالت برانگیخته $n = 2$ (که در آن $t \rightarrow \infty$) از (۴۱-۱۰) به دست می‌آید:

$$P_{1 \rightarrow 2} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \psi_2 | \hat{V}(t) | \psi_1 \rangle e^{i\omega_{21}t} dt \right|^2 \quad (196-10)$$

که در آن

$$\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = \frac{4\pi^2\hbar}{2ma^2} - \frac{\pi^2\hbar}{2ma^2} = \frac{3\pi^2\hbar}{2ma^2} \quad (197-10)$$

$$\langle \psi_2 | \hat{V}(t) | \psi_1 \rangle = \frac{2\varepsilon}{a} e^{-t^2} \int_0^a x \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx = -\frac{16\varepsilon a}{9\pi^2} e^{-t^2} \quad (198-10)$$

زیرا $E_n = n^2\pi^2\hbar^2/(2ma^2)$ و $\psi_n(x) = \sqrt{2/a} \sin(n\pi x/a)$ با وارد کردن (197-10) و (198-10) در (196-10)، داریم:

$$P_{1 \rightarrow 2} = \left(\frac{16\varepsilon a}{9\pi^2\hbar} \right)^2 \left| \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega_{21}t - t^2} dt \right|^2 \quad (199-10)$$

تغییر متغیر $y = t - \frac{i}{2}\omega_{21}$ رابطه‌های $y = t - \frac{i}{2}\omega_{21}$ و $dt = dy$ و $i\omega_{21}t - t^2 = -\omega_{21}^2/4 - y^2$ را نتیجه می‌دهد:

$$P_{1 \rightarrow 2} = \left(\frac{16\varepsilon a}{9\pi^2\hbar} \right)^2 \left| e^{-\omega_{21}^2/4} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} dy \right|^2 = \pi \left(\frac{16\varepsilon a}{9\pi^2\hbar} \right)^2 \exp\left(-\frac{9\pi^2\hbar^2}{4\pi^2 a^2}\right) \quad (200-10)$$

زیرا $\omega_{21} = 3\pi^2\hbar/(2ma^2)$ است.

مسئله ۱۰-۷

ذره‌ای در ابتدا (یعنی $t = 0$) در حالت پایه‌ی خود در پتانسیل یک نوسانگر هماهنگ یک بعدی قرار دارد. در $t = 0$ اختلال $\hat{V}(x, t) = V_0 \hat{x}^2 e^{-t/\tau}$ روشن می‌شود. احتمال آن که پس از مدت زمان به اندازه‌ی کافی طولانی (یعنی $t \rightarrow \infty$) سیستم گذاری به یک حالت برانگیخته‌ی معلوم انجام دهد را تا مرتبه‌ی نخست محاسبه کنید. تمام حالت‌های نهایی را در نظر بگیرید.

حل

احتمال گذار از حالت پایه $n = 0$ به حالت برانگیخته‌ی n از (10-41) به دست می‌آید:

$$P_{0 \rightarrow n} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^{+\infty} \langle n | \hat{V}(t) | 0 \rangle e^{i\omega_{n0}t} dt \right|^2 = \frac{V_0^2}{\hbar^2} \left| \langle n | \hat{x}^2 | 0 \rangle \right|^2 \left| \int_0^{+\infty} e^{-(1/\tau - in\omega)t} dt \right|^2 \quad (201-10)$$

که در آن $\omega_{n0} = \frac{E_n - E_0}{\hbar} = n\omega$ است (زیرا $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$) و انتگرال زمان در (10-63)

محاسبه شد:

$$\left| \int_0^{+\infty} e^{-(1/\tau - in\omega)t} dt \right|^2 = \frac{1}{n^2\omega^2 + 1/\tau^2} \quad (202-10)$$

چون $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ و $\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ است و با توجه به این که

$$\hat{X}^2 = (\hbar/2m\omega)^{2/2} (\hat{a}^\dagger + \hat{a})(\hat{a}^\dagger + \hat{a} + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1)$$

است، تنها جمله‌هایی که در $\langle n|\hat{x}^3|0\rangle$ باقی می‌مانند، عبارتند از

$$\langle n|\hat{X}^3|0\rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2} \langle n|\hat{a}^{\dagger 3} + 3\hat{a}\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^{\dagger 3}|0\rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2} (\sqrt{6}\delta_{n,3} + 3\delta_{n,1}) \quad (203-10)$$

این رابطه بیان می‌کند که پس از مدت زمان طولانی می‌توان ذره را تنها در نخستین یا سومین حالت برانگیخته یافت.

با وارد کردن $(202-10)$ و $(203-10)$ در $(201-10)$ می‌توانیم ثابت کنیم که احتمال‌های متناظر با گذار از حالت پایه به حالت‌های برانگیخته‌ی نخست، دوم یا سوم به ترتیب از رابطه‌های زیر به دست می‌آید:

$$P_{0 \rightarrow 1} = \frac{V_0^2}{\hbar^2} \left| \langle 1|\hat{x}^3|0\rangle \right|^2 \left| \int_0^{+\infty} e^{-(1/\tau - i\omega)t} dt \right|^2 = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^3 \frac{9V_0^2}{(\hbar\omega)^2 + \hbar^2/\tau^2} \quad (204-10)$$

$$P_{0 \rightarrow 2} = 0 \quad (205-10)$$

$$P_{0 \rightarrow 3} = \frac{V_0^2}{\hbar^2} \left| \langle 3|\hat{x}^3|0\rangle \right|^2 \left| \int_0^{+\infty} e^{-(1/\tau - 3i\omega)t} dt \right|^2 = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^3 \frac{6V_0^2}{(3\hbar\omega)^2 + \hbar^2/\tau^2} \quad (206-10)$$

بنابراین سیستم نمی‌تواند گذارهایی به دومین حالت برانگیخته و حالت‌های برانگیخته‌ی بالاتر از $n = 3$ انجام دهد یعنی $P_{0 \rightarrow 2} = 0$ زیرا $\langle 2|\hat{X}^3|0\rangle = 0$ و هنگامی که $n > 3$ است، $P_{0 \rightarrow n} = 0$ زیرا به‌ازای $n > 3$ ، $\langle n|\hat{X}^3|0\rangle = 0$ است.

مسأله‌ی ۸-۱۰

یک اتم هیدروژن که در ابتدا (یعنی $t \rightarrow -\infty$) در حالت پایه‌ی خود است، با شروع لحظه‌ی $t = 0$ در میدان الکتریکی وابسته به زمان $\mathbf{E}(t) = E_0 \tau \mathbf{k} / (\tau^2 + t^2)$ در امتداد محور z قرار داده می‌شود که در آن τ ثابتی با بعد زمان است. احتمال آن که اتم پس از مدت زمان به اندازه‌ی کافی طولانی (یعنی $t \rightarrow \infty$) در حالت $2p$ یافت شود را محاسبه کنید.

حل

چون پتانسیل حاصل از برهمکنش الکترون هیدروژن با میدان خارجی $\mathbf{E}(t)$ برابر با $V(t) = -e r \cdot \mathbf{E}(t)$ است، به صورت زیر می‌توانیم از $(41-10)$ احتمال گذار از حالت $1s$ به حالت $2p$ را بنویسیم:

$$P_{1s \rightarrow 2p} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \langle 210|V(t)|100\rangle e^{i\omega_{fi}t} dt \right|^2 \quad (207-10)$$

که در آن

$$\langle 210 | V(t) | 100 \rangle = \langle 210 | (-er \cdot \mathbf{E}) | 100 \rangle = -\frac{eE_0 \tau}{\tau^2 + t^2} \langle 210 | z | 100 \rangle \quad (208-10)$$

چون $z = r \cos \theta$ است و داریم

$$\psi_{1s} = R_{10}(r)Y_{00}(\Omega) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0},$$

$$\psi_{2p} = R_{21}(r)Y_{10}(\Omega) = \frac{1}{\sqrt{4\pi a_0^3}} \frac{r}{2a_0} e^{-r/2a_0} \cos \theta \quad (209-10)$$

و با استفاده از $\int_0^\pi \sin \theta \cos^2 \theta d\theta = \int_{-1}^1 x^2 dx = \frac{2}{3}$ خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} \langle 210 | z | 100 \rangle &= \int_0^\infty r^2 R_{21}^*(r) R_{10}(r) dr \int_0^\pi \sin \theta \cos^2 \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \\ &= \frac{4\pi}{3} \frac{1}{4\pi a_0^3 \sqrt{2}} \int_0^\infty r^2 e^{-2r/2a_0} dr = \frac{2^4 a_0}{3^2 \sqrt{2}} \end{aligned} \quad (210-10)$$

با وارد کردن (208-10) و (210-10) در (207-10)، داریم:

$$P_{1s \rightarrow 2p} = \frac{2^{15} e^2 E_0^2 \tau^2 a_0^2}{3^{10} \hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i\omega_f t}}{\tau^2 + t^2} dt \right|^2 \quad (211-10)$$

می‌توانیم این انتگرال را با استفاده از روش مانده‌ها و با بستن پربند در نیمه‌ی بالایی صفحه‌ی t محاسبه کنیم. چون نیمه‌ی بالایی نامتناهی سهمی، انتگرال ندارد، قطب واقع در $t = i\tau$ نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i\omega_f t}}{\tau^2 + t^2} dt &= 2\pi i \operatorname{Res} \left[\frac{e^{i\omega_f t}}{\tau^2 + t^2} \right]_{t=i\tau} = 2\pi i \lim_{t \rightarrow i\tau} \left[\frac{e^{i\omega_f t}}{\tau^2 + t^2} \times (t - i\tau) \right] \\ &= 2\pi i \lim_{t \rightarrow i\tau} \left[\frac{e^{i\omega_f t} (t - i\tau)}{(t + i\tau)(t - i\tau)} \right] = \frac{\pi}{\tau} e^{-\omega_f \tau} \end{aligned} \quad (212-10)$$

که در آن

$$\omega_f = \frac{1}{\hbar} (E_f - E_i) = \frac{1}{\hbar} (E_{2p} - E_{1s}) = \frac{1}{\hbar} \left(\frac{1}{4} E_{1s} - E_{1s} \right) = -\frac{3}{4\hbar} E_{1s} = \frac{3R_y}{4\hbar} \quad (213-10)$$

و R_y ثابت ریذبرگ است: $R_y = 13.6 \text{ eV}$. با وارد کردن (212-10) در (211-10)، احتمال گذار را

به‌دست می‌آوریم:

$$P_{1s \rightarrow 2p} = \frac{2^{15} e^2 \pi^2 E_0^2 a_0^2}{3^{10} \hbar^2} \exp(-2\omega_f \tau) = \frac{2^{15} e^2 \pi^2 E_0^2 a_0^2}{3^{10} \hbar^2} \exp\left(-\frac{3R_y}{2\hbar} \tau\right) \quad (214-10)$$

مسأله‌ی ۹-۱۰

یک اتم هیدروژن در حالت برانگیخته‌ی $2p$ ی خود قرار دارد. آهنگ گذار وابسته به گذارهای $2p \rightarrow 1s$ (لیمن) و عمر میانگین حالت $2p$ را محاسبه کنید.

حل

عبارت نخست مربوط به آهنگ گذار کل از $(10-14)$ به دست می‌آید:

$$W_{2p \rightarrow 1s} = \frac{4\omega_{2p \rightarrow 1s}^3}{3\hbar c^3} |\mathbf{d}_{2p \rightarrow 1s}|^2 \quad (10-215)$$

که در آن

$$|\mathbf{d}_{2p \rightarrow 1s}|^2 = e^2 |\langle 2p | \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{r} | 1s \rangle|^2 = e^2 \left| \int_0^\infty r^3 R_{2p}^*(r) R_{10}(r) dr \int d\Omega Y_{1m}^* \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{r} Y_{00} \right|^2 \quad (10-216)$$

ابتدا باید $\langle 2p | \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{r} | 1s \rangle$ را محاسبه کنیم. انتگرال شعاعی از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\int_0^\infty r^3 R_{2p}^*(r) R_{10}(r) dr = \frac{1}{a_0^2 \sqrt{6}} \int_0^\infty r^4 e^{-3r/2a_0} dr = \frac{2^4 a_0}{3^2 \sqrt{6}} \quad (10-217)$$

به صورت زیر می‌توان قسمت شعاعی را از $(10-127)$ محاسبه نمود:

$$\begin{aligned} \int d\Omega Y_{1m}^*(\Omega) \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{r} Y_{00}(\Omega) &= \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \int Y_{1m}^* \left(\frac{-\varepsilon_x + i\varepsilon_y}{\sqrt{2}} Y_{11} + \frac{\varepsilon_x + i\varepsilon_y}{\sqrt{2}} Y_{1-1} + \varepsilon_z Y_{10} \right) Y_{00} d\Omega \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}} \int Y_{1m}^* \left(\frac{-\varepsilon_x + i\varepsilon_y}{\sqrt{2}} Y_{11} + \frac{\varepsilon_x + i\varepsilon_y}{\sqrt{2}} Y_{1-1} + \varepsilon_z Y_{10} \right) d\Omega \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{-\varepsilon_x + i\varepsilon_y}{\sqrt{2}} \delta_{m,1} + \frac{\varepsilon_x + i\varepsilon_y}{\sqrt{2}} \delta_{m,-1} + \varepsilon_z \delta_{m,0} \right) \quad (10-218) \end{aligned}$$

زیرا $\int Y_{1m}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) d\Omega = \delta_{l,1} \delta_{m,m_i}$ (۱۰-۲۱۸) و $(10-217)$ و $(10-218)$ در $(10-216)$ به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$|\mathbf{d}_{2p \rightarrow 1s}|^2 = 32 \left(\frac{2}{3} \right)^4 e^2 a_0^2 \left[\frac{1}{2} (\varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2) (\delta_{m,-1} + \delta_{m,1}) + \varepsilon_z^2 \delta_{m,0} \right] \quad (10-219)$$

که هنگامی که در $(10-215)$ وارد شود، به آهنگ گذار کل متناظر با مقدار مشخصی از عدد کوانتومی سمتی m می‌انجامد:

$$\begin{aligned} W_{2p \rightarrow 1s} &= \frac{4\omega_{2p \rightarrow 1s}^3}{3\hbar c^3} |\mathbf{d}_{fi}|^2 \\ &= \frac{128 e^2 a_0^2 \omega^3}{3\hbar c^3} \left(\frac{2}{3} \right)^4 \left[\frac{1}{2} (\varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2) (\delta_{m,-1} + \delta_{m,1}) + \varepsilon_z^2 \delta_{m,0} \right] \quad (10-220) \end{aligned}$$

با جمع بستن روی سه حالت ممکن $m = (-1, 0, 1)$:

$$\sum_{m=-1}^1 \left[\frac{1}{\sqrt{3}} (\varepsilon_x^m + \varepsilon_y^m) (\delta_{m,-1} + \delta_{m,1}) + \varepsilon_z^m \delta_{m,0} \right] = \varepsilon_x^0 + \varepsilon_y^0 + \varepsilon_z^0 = 1 \quad (221-10)$$

و همانطور که در (۲۱۳-۱۰) نشان داده شد، چون $\omega_{2p \rightarrow 1s} = (E_{2p} - E_{1s})/\hbar = 3Ry/(4\hbar) = 3e^2/(8\hbar a_0)$ (زیرا ثابت ری‌دبرگ Ry برابر با $e^2/(2\hbar a_0)$ است)، می‌توانیم (۲۲۰-۱۰) را به رابطه‌ی زیر کاهش دهیم:

$$W_{2p \rightarrow 1s} = \frac{128}{3\hbar c^3} \left(\frac{2}{3}\right)^4 e^2 a_0^2 \omega_{2p \rightarrow 1s}^3 = \left(\frac{2}{3}\right)^4 \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^4 \frac{c}{a_0} = \left(\frac{2}{3}\right)^4 \frac{c a_0^4}{a_0} \quad (222-10)$$

که در آن $\alpha = e^2/(\hbar c) = 1/137$ ثابت ساختار ریز و $a_0 = 0,529 \times 10^{-10} \text{ m}$ شعاع بوهر است. مقدار عددی آهنگ گذار برابر است با

$$W_{2p \rightarrow 1s} = \left(\frac{2}{3}\right)^4 \frac{c a_0^4}{a_0} \simeq \left(\frac{2}{3}\right)^4 \frac{3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}}{137^4 \times 0,529 \times 10^{-10} \text{ m}} = 0,628 \times 10^9 \text{ s}^{-1} \quad (223-10)$$

آنگاه عمر میانگین حالت $2p$ از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\tau = \frac{1}{W_{2p \rightarrow 1s}} = \left(\frac{3}{2}\right)^4 \frac{a_0}{c a_0^4} = \frac{1,5^4 \times 137^4 \times 0,529 \times 10^{-10} \text{ m}}{3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}} = 1,6 \times 10^{-9} \text{ s} \quad (224-10)$$

این مقدار در توافق بسیار خوبی با داده‌های تجربی است.

ملاحظات

راه دیگر به دست آوردن (۲۲۲-۱۰) استفاده از رابطه‌ی زیر است:

$$W_{2p \rightarrow 1s} = \frac{4e^2 \omega_{2p \rightarrow 1s}^3}{3\hbar c^3} \frac{1}{3} \sum_{m=-1}^1 |\langle 21m | \mathbf{r} | 100 \rangle|^2 \quad (225-10)$$

$$= \frac{4e^2 \omega_{2p \rightarrow 1s}^3}{9\hbar c^3} \sum_{m=-1}^1 \left[|\langle 21m | \hat{x} | 100 \rangle|^2 + |\langle 21m | \hat{y} | 100 \rangle|^2 + |\langle 21m | \hat{z} | 100 \rangle|^2 \right]$$

که در آن روی گذارهای مختلف میانگین گرفته‌ایم. با استفاده از رابطه‌های $x = r \sin \theta \cos \phi$ و $z = r \cos \theta$ و $y = r \sin \theta \sin \phi = i\sqrt{2\pi/3}r(Y_{11} + Y_{1-1})$ ، $-\sqrt{2\pi/3}r(Y_{11} - Y_{1-1})$ می‌توانیم نشان دهیم:

$$\begin{aligned} \langle 21m|\hat{x}|100\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\int_0^\infty r^2 R_{21}^*(r)R_{10}(r)dr \int Y_{2m}^*(\Omega)(Y_{11}-Y_{1-1})d\Omega \\ &= -\frac{1}{\sqrt{6}}\left[\frac{24}{\sqrt{6}}\left(\frac{2}{3}\right)^\Delta a_0\right](\delta_{m,1}-\delta_{m,-1}) \quad (226-10) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle 21m|\hat{y}|100\rangle &= \frac{i}{\sqrt{4\pi}}\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\int_0^\infty r^2 R_{21}^*(r)R_{10}(r)dr \int Y_{2m}^*(\Omega)(Y_{11}+Y_{1-1})d\Omega \\ &= \frac{i}{\sqrt{6}}\left[\frac{24}{\sqrt{6}}\left(\frac{2}{3}\right)^\Delta a_0\right](\delta_{m,1}+\delta_{m,-1}) \quad (227-10) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle 21m|\hat{z}|100\rangle &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\int_0^\infty r^2 R_{21}^*(r)R_{10}(r)dr \int Y_{2m}^*(\Omega)Y_{10}d\Omega \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}}\left[\frac{24}{\sqrt{6}}\left(\frac{2}{3}\right)^\Delta a_0\right]\delta_{m,0} \quad (228-10) \end{aligned}$$

ترکیب سه رابطه‌ی قبل به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\begin{aligned} \sum_{m=-1}^1 |\langle 21m|\mathbf{r}|100\rangle|^2 &= 96a_0^2 \left(\frac{2}{3}\right)^{10} \sum_m \left[\frac{1}{6}(\delta_{m,1}-\delta_{m,-1})^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{6}(\delta_{m,1}+\delta_{m,-1})^2 + \frac{1}{3}\delta_{m,0}^2 \right] \\ &= 96a_0^2 \left(\frac{2}{3}\right)^{10} \sum_m \left[\frac{1}{6}(\delta_{m,1}+\delta_{m,-1}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{6}(\delta_{m,1}+\delta_{m,-1}) + \frac{1}{3}\delta_{m,0} \right] \\ &= \frac{96a_0^2}{3} \left(\frac{2}{3}\right)^{10} \sum_{m=-1}^1 (\delta_{m,-1}+\delta_{m,1}+\delta_{m,0}) \\ &= 96 \left(\frac{2}{3}\right)^{10} a_0^2 \quad (229-10) \end{aligned}$$

سرانجام با جاگذاری (۲۲۹-۱۰) در (۲۲۵-۱۰) و استفاده از $\omega_{2p \rightarrow 1s} = 3e^2/(\lambda\hbar a_0)$ رابطه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$W_{2p \rightarrow 1s} = \frac{128e^2 a_0^2}{3\hbar c^3} \omega^3 \left(\frac{2}{3}\right)^{10} = \left(\frac{2}{3}\right)^\Delta \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^F \frac{c}{a_0} = \left(\frac{2}{3}\right)^\Delta \frac{c\alpha^F}{a_0} \quad (230-10)$$

مسئله‌ی ۱۰-۱۰

(الف) آهنگ گذار از نخستین حالت برانگیخته به حالت پایه را برای یک نوسانگر هماهنگ همسانگرد (سه‌بعدی) با بار q محاسبه کنید.

(ب) مقدار عددی آهنگ محاسبه شده در (الف) و همینطور عمر میانگین نخستین حالت برانگیخته را برای الکترونی (یعنی $m_e c^2 = 0.511 \text{ MeV}$) که با بسامد تابش نوری $\omega \simeq 10^{15} \text{ rad s}^{-1}$ نوسان می‌کند، بیابید.

حل

همانطور که در فصل ۶ یادآوری شد، حالت پایه‌ی یک نوسانگر هماهنگ همسانگرد، حالت $1s$ است عبارتند از $(n, l, m) = (0, 0, 0)$ که انرژی و تابع موج آن عبارتند از $E_0 = 3\hbar\omega/2$ و

$$\psi_{000}(r, \theta, \phi) = R_{00}(r)Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{2}{\sqrt{\sqrt{\pi}}} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{3/4} e^{-m\omega r^2/2\hbar} Y_{00}(\theta, \phi) \quad (231-10)$$

و نخستین حالت برانگیخته، حالت $1p$ $((n, l, m) = (1, 1, m))$ است که انرژی و تابع موج آن عبارتند از $E_1 = 5\hbar\omega/2$ و

$$\psi_{11m}(r, \theta, \phi) = R_{11}(r)Y_{1m}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{8}{3\sqrt{\pi}}} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{5/4} r e^{-m\omega r^2/2\hbar} Y_{1m}(\theta, \phi) \quad (232-10)$$

با استفاده از $\int_0^\infty x^2 e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{8}$ همراه با تغییر متغیر $x = \sqrt{m\omega/\hbar}r$ داریم:

$$\int_0^\infty r^3 R_{11}^*(r)R_{00}(r)dr = \frac{4}{3}\sqrt{\frac{2}{3\pi}} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2 \int_0^\infty r^4 e^{-m\omega r^2/\hbar} dr = \sqrt{\frac{3\hbar}{2m\omega}} \quad (233-10)$$

(الف) آهنگ گذار مربوط به گذار $1p \rightarrow 1s$ از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$W_{1p \rightarrow 1s} = \frac{4q^2\omega_{1p \rightarrow 1s}^3}{3\hbar c^3} \frac{1}{3} \sum_{m=-1}^1 |(\langle 11m | \mathbf{r} | 000 \rangle)|^2 \quad (234-10)$$

$$= \frac{4q^2\omega_{1p \rightarrow 1s}^3}{9\hbar c^3} \sum_{m=-1}^1 \left[|(\langle 11m | \hat{x} | 000 \rangle)|^2 + |(\langle 11m | \hat{y} | 000 \rangle)|^2 + |(\langle 11m | \hat{z} | 000 \rangle)|^2 \right]$$

در تشابه با (۲۲۶-۱۰) تا (۲۲۸-۱۰)، چون $x = r \sin \theta \cos \phi = -\sqrt{2\pi/3}r(Y_{11} - Y_{1-1})$ و $y = r \sin \theta \sin \phi = i\sqrt{2\pi/3}r(Y_{11} + Y_{1-1})$ و $z = r \cos \theta = \sqrt{4\pi/3}rY_{10}$ است و با استفاده از (۲۳۳-۱۰)، می‌توانیم نشان دهیم:

$$\langle 11m | \hat{x} | 000 \rangle = -\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sqrt{\frac{2\pi}{3}} \int_0^\infty r^3 R_{11}^*(r)R_{00}(r)dr \int Y_{1m}^*(\Omega)(Y_{11} - Y_{1-1})d\Omega$$

$$= -\frac{1}{\sqrt{6}} \sqrt{\frac{3\hbar}{2m\omega}} (\delta_{m,1} - \delta_{m,-1}) \quad (235-10)$$

$$\begin{aligned} \langle 11m | \hat{y} | 000 \rangle &= \frac{i}{\sqrt{4\pi}} \sqrt{\frac{2\pi}{3}} \int_0^\infty r^2 R_{11}^*(r) R_{00}(r) dr \int Y_{1m}^*(Y_{11} + Y_{1-1}) d\Omega \\ &= \frac{i}{\sqrt{6}} \sqrt{\frac{3\hbar}{2m\omega}} (\delta_{m,1} + \delta_{m,-1}) \quad (236-10) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle 11m | \hat{z} | 000 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \int_0^\infty r^2 R_{11}^*(r) R_{00}(r) dr \int Y_{1m}^* Y_{10} d\Omega \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}} \sqrt{\frac{3\hbar}{2m\omega}} \delta_{m,0} \quad (237-10) \end{aligned}$$

ترکیب سه رابطه‌ی قبل به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\begin{aligned} \sum_{m=-1}^1 |\langle 11m | r | 000 \rangle|^2 &= \frac{3\hbar}{2m\omega} \sum_m \left[\frac{1}{6} (\delta_{m,1} - \delta_{m,-1})^2 + \frac{1}{6} (\delta_{m,1} + \delta_{m,-1})^2 + \frac{1}{3} \delta_{m,0}^2 \right] \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \sum_{m=-1}^1 (\delta_{m,-1} + \delta_{m,1} + \delta_{m,0}) = \frac{3\hbar}{2m\omega} \quad (238-10) \end{aligned}$$

با جاگذاری (۲۳۸-۱۰) در (۲۳۴-۱۰) و استفاده از ω استفاده از $\omega_{1p \rightarrow 1s} = (E_1 - E_0)/\hbar = (\frac{5}{2} - \frac{3}{2})\omega = \omega$ استفاده از ω ، رابطه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$W_{1p \rightarrow 1s} = \frac{4q^2 \omega_{1p \rightarrow 1s}^3}{9\hbar c^3} \frac{3\hbar}{2m\omega} = \frac{2q^2 \omega^2}{3mc^3} \quad (239-10)$$

(ب) در مورد یک الکترون $q = -e$ و $m_e c^2 = 0.511 \text{ MeV}$ که با بسامد $\omega \simeq 10^{15} \text{ s}^{-1}$ نوسان می‌کند، آهنگ گذار برابر است با

$$\begin{aligned} W_{1p \rightarrow 1s} &= \frac{2e^2 \omega^2}{3m_e c^3} = \frac{2\alpha}{3} \left(\frac{\hbar c}{m_e c^2} \right) \frac{\omega^2}{c} \\ &= \frac{2}{3} \frac{1}{137} \left(\frac{197 \text{ MeV fm}}{0.511 \text{ MeV}} \right) \frac{10^{30} \text{ s}^{-2}}{3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}} \simeq 0.64 \times 10^7 \text{ s}^{-1} \quad (240-10) \end{aligned}$$

که در آن $\alpha = e^2/(\hbar c) = 1/137$ ثابت ساختار ریز است. عمر میانگین حالت $1p$ برای این نوسانگر از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\tau = \frac{1}{W_{1p \rightarrow 1s}} = \frac{3m_e c^3}{2e^2 \omega^2} \simeq \frac{1}{0.64 \times 10^7 \text{ s}^{-1}} = 1.56 \times 10^{-7} \text{ s} \quad (241-10)$$

مسأله‌ی ۱۰-۱۱

نشان دهید که الکترون‌های آزاد فوتون‌ها را گسیل یا جذب نمی‌کنند.

حل

اگر الکترون قبل و بعد از برهم‌کنش با فوتون آزاد باشد آنگاه تابع‌های موج اولیه و نهایی آن با موج‌های تخت داده می‌شود: $\psi_i(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}$ و $\psi_f(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}}$ برای روشن‌تر شدن بحث، بیایید فرض کنیم که یک الکترون آزاد می‌تواند یک فوتون را جذب یا گسیل کند. آهنگ‌های گذار جذب و گسیل متناظر به صورت زیر به دست می‌آیند (۱۰-۹۵) و (۱۰-۹۶) را ببینید:

$$\Gamma_{i \rightarrow f}^{\text{جذب}} = \frac{4\pi^2 e^2}{m_e^2 \omega V} \left| (\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{k}_i) \langle \psi_f | e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} | \psi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad (242-10)$$

$$\Gamma_{i \rightarrow f}^{\text{گسیل}} = \frac{4\pi^2 e^2}{m_e^2 \omega V} \left| (\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{k}_i) \langle \psi_f | e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} | \psi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega) \quad (243-10)$$

که در آن از $\mathbf{P}\psi_i(\mathbf{r}) = \mathbf{k}_i\psi_i(\mathbf{r})$ استفاده کرده‌ایم. با توجه به این که داریم

$$\langle \psi_f | e^{\pm i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} | \psi_i \rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3r e^{i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f \pm \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} = \delta(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f \pm \mathbf{k}) \quad (244-10)$$

تابع‌های دلتای $\delta(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f \pm \mathbf{k})$ قانون‌های پایستگی تکانه‌ی خطی را برای فرآیندهای جذب و گسیل به دست می‌دهند.

بیایید ابتدا نشان دهیم که یک الکترون آزاد نمی‌تواند یک فوتون را جذب کند. بدین منظور، قصد داریم تا نشان دهیم که شرط پایستگی تکانه‌ی $\delta(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f + \mathbf{k})$ با شرط پایستگی انرژی $\delta(E_f - E_i - \hbar\omega)$ سازگاری ندارد. با ترکیب معادله‌های (۱۰-۲۴۲) و (۱۰-۲۴۴)، می‌بینیم که آهنگ جذب متناسب با حاصل ضرب دو تابع دلتا است: $\delta(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f + \mathbf{k})\delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \sim \Gamma_{i \rightarrow f}^{\text{جذب}}$ که یکی از آنها مربوط به پایستگی تکانه است:

$$\delta(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f + \mathbf{k}) \implies \mathbf{p}_i - \mathbf{p}_f + \mathbf{p}_{\text{فوتون}} = 0 \quad (245-10)$$

و دیگری با پایستگی انرژی سروکار دارد:

$$\delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \implies E_f - E_i - cp_{\text{فوتون}} = 0 \quad (246-10)$$

که در آنها $\mathbf{p}_i = \hbar\mathbf{k}_i$ و E_i تکانه و انرژی اولیه الکترون، $\mathbf{p}_f = \hbar\mathbf{k}_f$ و E_f تکانه و انرژی نهایی آن و $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ و $E = cp$ فوتون تکانه‌ی خطی و انرژی فوتون جذب شده هستند. اکنون آماده‌ایم تا نشان دهیم که شرط (۱۰-۲۴۵) با (۱۰-۲۴۶) ناسازگار است. اگر در چارچوب سکون الکترون اولیه کار کنیم آنگاه داریم: $\mathbf{p}_i = 0$. بنابراین از یک سو، (۱۰-۲۴۵) به $\mathbf{p}_f = \mathbf{p}_{\text{فوتون}}$ می‌انجامد و از سوی دیگر، (۱۰-۲۴۶) به $E_f = cp$ یا $E_f = cp_{\text{فوتون}} = p_f^2/2m_e$ منجر می‌شود. درواقع، شرط‌های (۱۰-۲۴۵) و (۱۰-۲۴۶) در

تضاد با هم هستند زیرا با وارد کردن $\mathbf{p} = \mathbf{p}_f + \mathbf{p}_i = 0$ فوتون در $(10-246)$ به رابطه‌ی $p_f^2/2m_e = cp_f$ یا $p_f = 2m_e c$ می‌رسیم. این رابطه پیشنهاد می‌کند که یا $v_f = 0$ است که بی‌معنی است زیرا با توجه به این که $\mathbf{p}_f = \mathbf{p}$ فوتون است، سرعت فوتون نیز صفر خواهد بود و یا $v_f = 2c$ که غیرممکن است. بنابراین هر دو نتیجه غیرممکن‌اند. به صورت خلاصه، با شروع از این فرض که یک الکترون آزاد می‌تواند یک فوتون را جذب کند $(10-242)$ ، به یک قانون پایستگی تکانه و یک قانون پایستگی انرژی رسیدیم که در تناقض با یکدیگرند. بنابراین یک الکترون آزاد نمی‌تواند یک فوتون را جذب کند.

همچنین با پیروی از همین روند، می‌توانیم نشان دهیم که فرض گسیل یک فوتون توسط الکترون آزاد به یک قانون پایستگی تکانه و انرژی می‌انجامد که ناسازگارند. بنابراین یک الکترون آزاد نمی‌تواند یک فوتون را گسیل کند.

مسأله‌ی ۱۰-۱۲

یک اتم هیدروژن که در حالت پایه‌ی خود است، در میدان الکتریکی نوسانی $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \sin(\omega t)$ با بسامد زاویه‌ای ω با $\hbar\omega > m_e e^4 / (2\hbar^2)$ قرار داده می‌شود.

(الف) آهنگ گذاری (احتمال در واحد زمان) که با آن اتم یونیده شود را بیابید.

(ب) از عبارت به دست آمده در (الف) استفاده کنید و آهنگ گذار بیشینه را بیابید.

حل

پس از یونیده شدن فرض می‌کنیم الکترون حرکت آزاد داشته باشد: انرژی الکترون صرفاً جنبشی است: $E_k = \hbar^2 k^2 / 2m_e$ و تابع موج آن موج تخت $\psi_k(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ است. چون اختلال حاصل از برهمکنش الکترون هیدروژن با میدان خارجی $\mathcal{E}(t)$ هماهنگ است:

$$\hat{V}(t) = -e\mathbf{r}\cdot\mathcal{E}(t) = -e\mathbf{r}\cdot\mathcal{E}_0 \sin(\omega t) = \frac{e}{\sqrt{2}} \mathbf{r}\cdot\mathcal{E}_0 e^{-i\omega t} - \frac{e}{\sqrt{2}} \mathbf{r}\cdot\mathcal{E}_0 e^{i\omega t} \quad (10-247)$$

در تشابه با روشی که از $(10-50)$ به $(10-54)$ انجامید، می‌توانیم آهنگ گذار برای یونش اتم هیدروژن را نتیجه بگیریم:

$$\Gamma_{0k} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \frac{e}{\sqrt{2}} \langle \psi_k | \mathbf{r}\cdot\mathcal{E}_0 | 100 \rangle \right|^2 \delta(E_k - E_0 + \hbar\omega) \quad (10-248)$$

$$+ \frac{2\pi}{\hbar} \left| -\frac{e}{\sqrt{2}} \langle \psi_k | \mathbf{r}\cdot\mathcal{E}_0 | 100 \rangle \right|^2 \delta(E_k - E_0 - \hbar\omega)$$

که در آن $E_k = \hbar^2 k^2 / 2m_e$ و $E_0 = -m_e e^4 / 2\hbar^2 = -13.6 \text{ eV}$ انرژی حالت پایه و

نهایی الکترون است. اولین عبارت دلتا $(\delta(E_k - E_0 + \hbar\omega))$ در $(10-248)$ سهم نیست زیرا اگر

$\hbar\omega = E_0 - E_k$ باشد آنگاه یونش نمی‌تواند روی دهد زیرا میدان الکتریکی برای یونیده کردن اتم به

اندازه‌ی کافی قوی نخواهد بود. آنگاه آهنگ گذار $(10-248)$ به صورت زیر در می‌آید:

$$\Gamma_{0k} = \frac{\pi e^2}{2\hbar} \left| \langle \psi_k | \mathbf{r}\cdot\mathcal{E}_0 | 100 \rangle \right|^2 \delta(E_k - E_0 - \hbar\omega) \quad (10-249)$$

برای محاسبه‌ی $\langle \psi_k | \mathbf{r} \cdot \mathcal{E}_0 | 1^0 0 \rangle$ بیاید \mathbf{k} را در امتداد محور z در نظر بگیریم. از این رو $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = kr \cos \theta$ و $\psi_k(\mathbf{r}) = (\sqrt{2}\pi)^{-3/2} e^{ikr \cos \theta}$ با در نظر گرفتن (θ, ϕ) و (α, β) به صورت زاویه‌های قطبی مربوط به \mathbf{r} و \mathcal{E}_0 داریم: $\mathbf{r} = r(\sin \theta \cos \phi \mathbf{i} + \sin \theta \sin \phi \mathbf{j} + \cos \theta \mathbf{k})$ و $\mathcal{E}_0 = \mathcal{E}_0(\sin \alpha \cos \beta \mathbf{i} + \sin \alpha \sin \beta \mathbf{j} + \cos \alpha \mathbf{k})$ از این رو

$$\begin{aligned} \mathbf{r} \cdot \mathcal{E}_0 &= r \mathcal{E}_0 (\sin \theta \cos \phi \sin \alpha \cos \beta + \sin \theta \sin \phi \sin \alpha \sin \beta + \cos \theta \cos \alpha) \\ &= r \mathcal{E}_0 [\sin \theta \sin \alpha \cos(\phi - \beta) + \cos \theta \cos \alpha] \end{aligned} \quad (250-10)$$

چون $\psi_{1s} = (\pi a_0^3)^{-1/2} e^{-r/a_0}$ و $d^3r = r^2 dr \sin \theta \cos \phi d\theta d\phi$ است، داریم:

$$\begin{aligned} \langle \psi_k | \mathbf{r} \cdot \mathcal{E}_0 | 1^0 0 \rangle &= \frac{1}{(\sqrt{2}\pi)^{3/2}} \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \int d^3r (\mathbf{r} \cdot \mathcal{E}_0) e^{-ikr \cos \theta - r/a_0} \\ &= \frac{\mathcal{E}_0}{\sqrt{8\pi^3 a_0^3}} \int_0^\infty r^2 e^{-r/a_0} dr \\ &\quad \int_0^\pi \sin \theta e^{-ikr \cos \theta} d\theta \int_0^{2\pi} [\sin \theta \sin \alpha \cos(\phi - \beta) + \cos \theta \cos \alpha] d\phi \\ &= \frac{2\pi \mathcal{E}_0 \cos \alpha}{\sqrt{8\pi^3 a_0^3}} \int_0^\infty r^2 e^{-r/a_0} dr \int_0^\pi \sin \theta \cos \theta e^{-ikr \cos \theta} d\theta \quad (251-10) \end{aligned}$$

که در آن از $\int_0^{2\pi} \cos(\phi - \beta) d\phi = 0$ استفاده کرده‌ایم زیرا $\int_0^{2\pi} \sin \phi d\phi = 0$ و $\int_0^{2\pi} \cos \phi d\phi = 0$ است. تغییر متغیر $x = \cos \theta$ و انتگرال‌گیری جزء به جزء به نتیجه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\begin{aligned} \int_0^\pi \sin \theta \cos \theta e^{-ikr \cos \theta} d\theta &= \int_{-1}^1 x e^{-ikrx} dx \\ &= \frac{1}{-ikr} x e^{-ikrx} \Big|_{-1}^1 - \frac{1}{(-ikr)^2} e^{-ikrx} \Big|_{-1}^1 \\ &= \frac{i}{kr} [e^{-ikr} + e^{ikr}] + \frac{1}{k^2 r^2} [e^{-ikr} - e^{ikr}] \quad (252-10) \end{aligned}$$

هنگامی که این انتگرال را در (251-10) وارد کنیم، هنوز باید چهار انتگرال شعاعی محاسبه شوند که می‌توان آنها را به صورت جزء به جزء انتگرال‌گیری نمود:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty r e^{\pm ikr - r/a_0} dr &= \frac{1}{\pm ik - 1/a_0} r e^{\pm ikr - r/a_0} \Big|_0^\infty - \frac{1}{(\pm ik - 1/a_0)^2} e^{\pm ikr - r/a_0} \Big|_0^\infty \\ &= \frac{a_0^2}{(\pm i a_0 k - 1)^2} \quad (253-10) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} r^2 e^{\pm ikr - r/a_0} dr &= \frac{1}{\pm ik - 1/a_0} r^2 e^{\pm ikr - r/a_0} \Big|_0^{\infty} - \frac{2}{\pm ik - 1/a_0} \int_0^{\infty} r e^{\pm ikr - r/a_0} dr \\ &= -\frac{2}{(\pm ik - 1/a_0)^2} r e^{\pm ikr - r/a_0} \Big|_0^{\infty} + \frac{2}{(\pm ik - 1/a_0)^2} e^{\pm ikr - r/a_0} \Big|_0^{\infty} \\ &= -\frac{2a_0^3}{(\pm ia_0 k - 1)^2} \end{aligned} \quad (254-10)$$

با وارد کردن (۲۵۲-۱۰) تا (۲۵۴-۱۰) در (۲۵۱-۱۰)، عبارت زیر را به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} \langle \psi_k | \mathbf{r} \cdot \mathcal{E}_0 | 100 \rangle &= \frac{2\pi \mathcal{E}_0 \cos \alpha}{\sqrt{4\pi^2 a_0^3}} \left[\frac{a_0^2}{k^2 (-ia_0 k - 1)^2} - \frac{a_0^2}{k^2 (ia_0 k - 1)^2} - \frac{2ia_0^3}{k(ia_0 k - 1)^3} \right. \\ &\quad \left. - \frac{2ia_0^3}{k(-ia_0 k - 1)^3} \right] \\ &= -\frac{16\mathcal{E}_0 \cos \alpha}{\pi \sqrt{2} a_0^5} \frac{ia_0^2 k}{(a_0^2 k^2 + 1)^3} \end{aligned} \quad (255-10)$$

جاگذاری این عبارت در (۲۴۹-۱۰) به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\Gamma_{\circ k} = \frac{\pi e^2 \cdot 128 \mathcal{E}_0^2 \cos^2 \alpha}{2\hbar} \frac{k^2 a_0^2}{(\pi^2 a_0^5)} \frac{k^2 a_0^2}{(a_0^2 k^2 + 1)^6} \delta(E_k - E_0 + \hbar\omega) \quad (256-10)$$

این رابطه آهنگ گذار برای تک‌حالت نهایی ψ_k ی متناظر با یک k معلوم را به دست می‌دهد. باید روی تمام حالت‌های نهایی الکترون جمع ببندیم. این کار، یک پیوستار را نمایش می‌دهد. پس از آن باید روی تمام جهت‌های گسیل و روی تمام تکانه‌های ممکن انتگرال بگیریم:

$$\begin{aligned} \Gamma_{\circ} &= \int \Gamma_{\circ k} d^3 k = \int k^2 dk \int_0^{\pi} \Gamma_{\circ k} \sin \alpha d\alpha \int_0^{2\pi} d\beta \\ &= 2\pi \frac{64 e^2 \mathcal{E}_0^2 a_0^4}{\pi \hbar} \int \frac{k^2 \delta(E_k - E_0 - \hbar\omega)}{(a_0^2 k^2 + 1)^6} dk \int_0^{\pi} \sin \alpha \cos^2 \alpha d\alpha \quad (257-10) \\ &= \frac{256 e^2 \mathcal{E}_0^2 a_0^4}{3\hbar} \int \frac{k^2 \delta(E_k - E_0 - \hbar\omega)}{(a_0^2 k^2 + 1)^6} dk \end{aligned}$$

که در آن از $\int_0^{\pi} \sin \alpha \cos^2 \alpha d\alpha = \int_{-1}^1 x^2 dx = \frac{2}{3}$ استفاده کرده‌ایم. می‌توان انتگرال‌گیری روی k را به انتگرال‌گیری روی انرژی نهایی E_k تبدیل کرد: چون $E_k = \hbar^2 k^2 / (2m_e)$ است، تغییر متغیر $k = \sqrt{2m_e E_k / \hbar^2}$ (و از این رو $k dk = (m_e / \hbar^2) dE_k$) رابطه‌ی (۲۵۷-۱۰) را به رابطه‌ی زیر کاهش می‌دهد:

$$\begin{aligned} \Gamma_0 &= \frac{256e^{\gamma} \mathcal{E}_0^{\gamma} a_0^{\gamma}}{3\hbar} \int \frac{k^{\gamma} \delta(E_k - E_0 - \hbar\omega)}{(a_0^{\gamma} k^{\gamma} + 1)^6} k dk \\ &= \frac{m_e}{\hbar^{\gamma}} \frac{256e^{\gamma} \mathcal{E}_0^{\gamma} a_0^{\gamma}}{3\hbar} \int \frac{(\sqrt{m_e} E_k / \hbar^{\gamma})^{\gamma/2} \delta(E_k - E_0 - \hbar\omega)}{(\sqrt{m_e} a_0^{\gamma} E_k / \hbar^{\gamma} + 1)^6} dE_k \\ &= \frac{256e^{\gamma} m_e \mathcal{E}_0^{\gamma} a_0^{\gamma}}{3\hbar^{\gamma}} \frac{(\sqrt{m_e} / \hbar^{\gamma})^{\gamma/2} (E_0 + \hbar\omega)^{\gamma/2}}{[\sqrt{m_e} a_0^{\gamma} (E_0 + \hbar\omega) / \hbar^{\gamma} + 1]^6} \quad (258-10) \end{aligned}$$

اگر از $E_0 + \hbar\omega = \hbar(\omega - \omega_0) = \hbar\omega_0(\omega/\omega_0 - 1)$ که $E_0 = -m_e e^{\gamma} / (2\hbar^{\gamma}) = -\hbar\omega_0$ را به دست می‌دهد، استفاده کنیم آنگاه می‌توانیم رابطه بالا را ساده‌تر کنیم. چون $a_0 = \hbar^{\gamma} / (m_e e^{\gamma})$ است، داریم:

$$\hbar\omega_0 a_0^{\gamma} = m_e e^{\gamma} \hbar^{\gamma} / (2\hbar^{\gamma} m_e^{\gamma} e^{\gamma}) = \hbar^{\gamma} / (2m_e)$$

$$2m_e a_0^{\gamma} (E_0 + \hbar\omega) / \hbar^{\gamma} = 2m_e \hbar\omega_0 a_0^{\gamma} (\omega/\omega_0 - 1) / \hbar^{\gamma} = \omega/\omega_0 - 1$$

بنابراین با وارد کردن عبارتهای $E_0 + \hbar\omega = \hbar\omega_0(\omega/\omega_0 - 1)$ و $2m_e a_0^{\gamma} (E_0 + \hbar\omega) / \hbar^{\gamma} + 1 = \omega/\omega_0$ در (۲۵۸-۱۰)، رابطه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$\Gamma_0 = \frac{256e^{\gamma} m_e \mathcal{E}_0^{\gamma} a_0^{\gamma}}{3\hbar^{\gamma}} \frac{(\sqrt{m_e} / \hbar^{\gamma})^{\gamma/2} (\hbar\omega_0)^{\gamma/2} (\omega/\omega_0 - 1)^{\gamma/2}}{(\omega/\omega_0)^6} \quad (259-10)$$

سرانجام با توجه به $(\sqrt{m_e} / \hbar^{\gamma})^{\gamma/2} (\hbar\omega_0)^{\gamma/2} = (\sqrt{m_e} / \hbar^{\gamma})^{\gamma/2} (m_e e^{\gamma} / 2\hbar^{\gamma})^{\gamma/2} = m_e^{\gamma} e^{\gamma} / \hbar^{\gamma}$ با استفاده از $a_0^{\gamma} = \hbar^{\gamma} / (m_e^{\gamma} e^{\gamma})$ می‌توانیم (۲۵۹-۱۰) را به صورت زیر بنویسیم:

$$\Gamma_0 = \frac{256 \mathcal{E}_0^{\gamma} a_0^{\gamma}}{3\hbar} \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^6 \left(\frac{\omega}{\omega_0} - 1\right)^{\gamma/2} \quad (260-10)$$

اگر بسامد میدان الکتریکی نوسانی کوچک‌تر یا مساوی با ω باشد آنگاه اتم یونیده نخواهد شد. در $\omega = \omega_0$ احتمال یونش صفر خواهد بود.

(ب) آهنگ گذار بیشینه با مشتق‌گیری از (۲۶۰-۱۰) به دست می‌آید:

$$\frac{d\Gamma_0}{d\omega} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\gamma}{\omega} \left(\frac{\omega}{\omega_0} - 1\right) = \frac{1}{2\omega_0} \quad \Rightarrow \quad \omega = \frac{\gamma}{3}\omega_0 \quad (261-10)$$

با وارد کردن $\omega = \frac{\gamma}{3}\omega_0$ در (۲۶۰-۱۰)، آهنگ گذار بیشینه را به دست می‌آوریم:

$$\Gamma_{0, \max} = \frac{256 \mathcal{E}_0^{\gamma} a_0^{\gamma}}{3\hbar} \left(\frac{3}{\gamma}\right)^6 \left(\frac{\gamma}{3} - 1\right)^{\gamma/2} = \frac{\mathcal{E}_0^{\gamma} a_0^{\gamma}}{\hbar} \frac{3^{\gamma/2}}{\gamma^{\gamma/2}} \quad (262-10)$$

۷-۱۰ تمرین‌ها

۱. یک ذره‌ی بدون اسپین و به جرم m را در نظر بگیرید که در یک چاه پتانسیل نامتناهی یک‌بعدی با دیواره‌هایی در $x = a$ و $x = 0$ حرکت می‌کند و در ابتدا (یعنی در $t = 0$) در حالت $\psi(x, 0) = [\phi_1(x) + \phi_3(x)]/\sqrt{2}$ قرار دارد که در آن $\phi_1(x)$ و $\phi_3(x)$ به ترتیب حالت پایه و دومین حالت برانگیخته با $\phi_n(x) = \sqrt{2/a} \sin(n\pi x/a)$ هستند.

(الف) بردار حالت $\psi(x, t)$ به‌ازای $t > 0$ در تصویر شرودینگر چیست؟

(ب) $\langle \hat{X} \rangle$ ، $\langle \hat{P} \rangle$ ، $\langle \hat{X}^2 \rangle$ و $\langle \hat{P}^2 \rangle$ را در تصویر شرودینگر به‌صورت تابع‌هایی از زمان به‌ازای $t > 0$ حساب کنید.

(پ) قسمت (ب) را در تصویر هایزنبرگ تکرار کنید: یعنی $\langle \hat{X} \rangle_H$ ، $\langle \hat{P} \rangle_H$ ، $\langle \hat{X}^2 \rangle_H$ و $\langle \hat{P}^2 \rangle_H$ را در تصویر هایزنبرگ به‌صورت تابع‌هایی از زمان به‌ازای $t > 0$ حساب کنید.

۲. مقدار چشمداشتی $\langle \hat{X}_H(t) \hat{P} \rangle$ را برای سومین حالت برانگیخته‌ی یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی حساب کنید.

۳. مقدار چشمداشتی $\langle \hat{X} \hat{P}_H(t) \rangle_n$ را برای n امین حالت برانگیخته‌ی یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی حساب کنید.

۴. یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی را در نظر بگیرید که در ابتدا (یعنی در $t = 0$) در حالت $|\psi(0)\rangle = (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$ قرار دارد که در آن $|0\rangle$ و $|1\rangle$ به ترتیب حالت پایه و نخستین حالت برانگیخته‌اند.

(الف) در تصویر شرودینگر، به‌ازای حالت $t > 0$ ، بردار حالت $|\psi(t)\rangle$ چیست؟

(ب) در تصویر شرودینگر $\langle \hat{X} \rangle$ ، $\langle \hat{P} \rangle$ ، $\langle \hat{X}^2 \rangle$ و $\langle \hat{P}^2 \rangle$ را به‌ازای $t > 0$ به‌صورت تابع‌هایی از زمان حساب کنید.

(ب) قسمت (ب) را در تصویر هایزنبرگ تکرار کنید.

۵. (الف) در تصویر هایزنبرگ، عملگر مختصه‌ی $\hat{X}_H(t)$ را برای یک ذره‌ی آزاد در یک بعد محاسبه کنید. (ب) جابه‌جاگر $[\hat{X}_H(t), \hat{X}_H(0)]$ را حساب کنید.

۶. هامیلتونی $\hat{H} = -(eB/mc)\hat{S}_x = \omega\hat{S}_x$ را در نظر بگیرید.

(الف) معادله‌های حرکت هایزنبرگ را برای عملگرهای وابسته به زمان $\hat{S}_x(t)$ ، $\hat{S}_y(t)$ و $\hat{S}_z(t)$ بنویسید.

(ب) این معادله‌ها را برای به‌دست آوردن S_x ، S_y و S_z به‌صورت تابعی از زمان حل کنید.

۷. کمیت $\langle n | \hat{P}_H(t) \hat{P} | n \rangle$ را برای n امین حالت برانگیخته‌ی یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی حساب کنید که در آن \hat{P} و $\hat{P}_H(t)$ به ترتیب عملگرهای تکانه در تصویر هایزنبرگ و تصویر شرودینگر را نمایش می‌دهند.

۸. هامیلتونی ناشی از برهمکنش ذره‌ای به جرم m ، بار q (بار منفی است) و اسپین S با یک میدان مغناطیسی در امتداد محور y برابر با $\hat{H} = -(qB/mc)\hat{S}_y$ است.
- (الف) از معادله‌ی هایزنبرگ استفاده کنید و $d\hat{S}_x/dt$ ، $d\hat{S}_y/dt$ و $d\hat{S}_z/dt$ را محاسبه نمایید.
- (ب) این معادله‌ها را برای به دست آوردن مؤلفه‌های عملگر اسپین به صورت تابع‌هایی از زمان حل کنید.
۹. ذره‌ای در ابتدا (یعنی هنگامی که $t < 0$ است) در پتانسیل یک نوسانگر هماهنگ یک بعدی در حالت پایه‌ی خود است. در $t = 0$ ، اختلال $\hat{V}(x, t) = V_0 \hat{x}^2 e^{-t/\tau}$ روشن می‌شود. احتمال آن که پس از مدت زمان به اندازه‌ی کافی طولانی (یعنی $t \rightarrow \infty$) سیستم گذاری به یک حالت برانگیخته‌ی معلوم انجام دهد را تا مرتبه‌ی نخست محاسبه کنید. تمام حالت‌های نهایی را در نظر بگیرید.
۱۰. ذره‌ای در ابتدا (یعنی هنگامی که $t < 0$ است) در یک چاه پتانسیل نامتناهی که دیواره‌های آن در $x = 0$ و $x = a$ واقع شده‌اند، در حالت پایه‌ی خود قرار دارد و در لحظه‌ی $t = 0$ تحت تأثیر اختلال وابسته به زمان $\hat{V}(t) = V_0 \hat{x}^2 e^{-t/\tau}$ که در آن V_0 یک پارامتر کوچک است، قرار می‌گیرد. احتمال آن که ذره در $t = +\infty$ در دومین حالت برانگیخته‌ی خود یافت شود را محاسبه کنید.
۱۱. شدت وابسته به گذار $2p \rightarrow 3s$ را در اتم هیدروژن بیابید.
۱۲. یک اتم هیدروژن که در حالت پایه‌ی خود قرار دارد، در ناحیه‌ای که در آن (در $t = 0$) میدان الکتریکی وابسته به زمان زیر روشن می‌شود، قرار می‌گیرد:

$$\mathbf{E}(t) = E_0(\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k})e^{-t/\tau}$$

- که در آن τ یک عدد حقیقی مثبت است. با استفاده از نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان مرتبه‌ی اول، احتمال آن که پس از مدت زمان به اندازه‌ی کافی طولانی (یعنی $t \gg \tau$) اتم در هر یک از حالت‌های $n = 2$ یافت شود را محاسبه کنید (یعنی گذار به تمام حالت‌های تراز $n = 2$ را در نظر بگیرید). راهنمایی: می‌توانید از $(\frac{2}{3})^5 (24a_0/\sqrt{6})$ استفاده کنید.
۱۳. (الف) عنصر ماتریسی کاهش یافته‌ی $\langle 1 || Y_1 || 2 \rangle$ را محاسبه کنید. راهنمایی: برای این کار، ممکن است به محاسبه‌ی $\langle 1, 0 | Y_1 | 2, 0 \rangle$ ، به صورت مستقیم و سپس از قضیه‌ی ویگنر-اکارت نیاز پیدا کنید.
- (ب) با استفاده از قضیه‌ی ویگنر-اکارت و ضریب‌های کلیش-گوردن مربوطه از جدول‌ها، $\langle 1, m | Y_{1m} | 2, m' \rangle$ را به ازای تمام مقادیرهای ممکن m ، m' و m'' محاسبه کنید.
- (پ) با استفاده از نتیجه‌های قسمت (ب)، آهنگ گذار $3d \rightarrow 2p$ مربوط به اتم هیدروژن را در تقریب دوقطبی محاسبه کنید و یک مقدار عددی ارائه نمایید. راهنمایی: می‌توانید از انتگرال $(\frac{6}{5})^5 (64a_0/15\sqrt{5})$ و $\int_0^\infty r^3 R_{21}^*(r) R_{32}(r) dr$ و ضریب‌های کلیش-گوردن زیر استفاده کنید:

$$\langle j, 1; m, 0 | (j-1), m \rangle = -\sqrt{(j-m)(j+m)/[j(2j+1)]}$$

$$\langle j, 1; (m-1), 1 | (j-1), m \rangle = \sqrt{(j-m)(j-m+1)/[2j(2j+1)]}$$

$$\langle j, 1; (m+1), -1 | (j-1), m \rangle = \sqrt{(j+m)(j+m+1)/[2j(2j+1)]}$$

۱۴. ذره‌ای در ابتدا در حالت پایه‌ی خود در یک جعبه‌ی پتانسیل یک‌بعدی نامتناهی با دیواره‌هایی در $x = 0$ و $x = a$ قرار دارد. اگر دیواره‌ی جعبه در $x = a$ ناگهان به $x = 1^0 a$ حرکت کند آنگاه احتمال یافتن ذره را در حالت‌های زیر محاسبه کنید:

(الف) چهارمین حالت برانگیخته‌ی ($n = 5$) جعبه‌ی جدید و

(ب) نهمین حالت برانگیخته‌ی ($n = 10$) جعبه‌ی جدید.

۱۵. ذره‌ای به جرم m در حالت پایه‌ی یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی، در اختلال $\hat{V}(t) = -V_0 \hat{x} e^{-t/\tau}$ قرار داده می‌شود. پس از مدت زمان طولانی، احتمال یافتن ذره در نخستین حالت برانگیخته‌اش را تا اختلال مرتبه‌ی اول محاسبه کنید.

۱۶. ذره‌ای در ابتدا (یعنی هنگامی که $t < 0$ است) در یک چاه پتانسیل نامتناهی که دیواره‌های آن در $x = 0$ و $x = a$ واقع شده‌اند، در نخستین حالت برانگیخته‌ی خود قرار دارد و در لحظه‌ی $t = 0$ تحت تأثیر اختلال وابسته به زمان $\hat{V}(t) = V_0 \tau \hat{x} / (t^2 + \tau^2)$ که در آن V_0 یک عدد حقیقی کوچک است، قرار می‌گیرد. احتمال آن که ذره در $t = +\infty$ در دومین حالت برانگیخته‌ی خود یافت شود را محاسبه کنید.

۱۷. ثابت فنر یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی ناگهان به نصف کاهش می‌یابد.

(الف) اگر در ابتدا نوسانگر در حالت پایه‌ی خود باشد آنگاه احتمال آن که نوسانگر در حالت پایه باقی بماند را بیابید.

(ب) کار وابسته به این فرآیند را بیابید.

۱۸. (الف) آهنگ‌گذار وابسته به واپاشی یک نوسانگر هماهنگ با بار q و جرم m از m امین حالت برانگیخته به حالت پایینی آن را بیابید.

(ب) توان تابیده شده توسط این نوسانگر در نتیجه‌ی واپاشی آن را بیابید.

(پ) عمر میانگین m امین حالت برانگیخته را بیابید.

(ت) مرتبه‌ی اندازه‌ی آهنگ‌گذار، توان و عمر میانگین پنجمین حالت برانگیخته ($n = 5$) را در مورد یک الکترون (یعنی $q = e$) که به صورت هماهنگ نوسان می‌کند، در حالت تابش نوری $\omega \simeq 10^{15} \text{ rad s}^{-1}$ تخمین بزنید.

۱۹. فرض کنید $\langle \psi_f | \mathbf{r} | \psi_i \rangle$ تقریباً برابر با اندازه‌ی سیستم مورد مطالعه است. از یک محاسبه‌ی نه‌چندان

دقیق برای تخمین عمر میانگین

(الف) یک گذار دوقطبی الکتریکی در یک اتم که در آن $\hbar\omega \sim 10 \text{ eV}$ است و

(ب) یک گذار دوقطبی الکتریکی در یک هسته که در آن $\hbar\omega \sim 1 \text{ MeV}$ است استفاده کنید.

۲۰. ذره‌ای در ابتدا (یعنی هنگامی که $t < 0$ است) در پتانسیل $V(x) = -V_0 \delta(x)$ با $V_0 > 0$ در حالت پایه‌ی خود است.

(الف) اگر قدرت پتانسیل به آرامی به $3V_0$ تغییر یابد آنگاه انرژی و تابع موج ذره در پتانسیل جدید را بیابید.
 (ب) کار انجام شده در این فرآیند را محاسبه کنید. اگر این ذره یک الکترون و $V_0 = 20 \text{ MeV fm}$ باشد آنگاه مقدار عددی این کار را برحسب MeV بیابید.

(ب) اگر قدرت پتانسیل ناگهان به $3V_0$ تغییر یابد آنگاه احتمال یافتن ذره در حالت پایه‌ی پتانسیل جدید را محاسبه کنید.

۲۱. یک اتم هیدروژن که در حالت پایه‌ی خود است، در لحظه‌ی $t = 0$ در میدان الکتریکی یکنواخت طولانی $\mathbf{E}(t) = E_0 \hat{j} e^{-t/\tau}$ در جهت y قرار داده می‌شود. احتمال آن که پس از مدت زمان به اندازه‌ی کافی طولانی ($t = +\infty$)، اتم در هر یک از حالت‌های $n = 2$ یافت شود را تا اختلال مرتبه‌ی اول محاسبه کنید.

۲۲. ذره‌ای در ابتدا (یعنی هنگامی که $t < 0$ است) در یک چاه پتانسیل نامتناهی با دیواره‌هایی در $x = 0$ و $x = a$ ، در حالت پایه‌ی خود قرار دارد و در لحظه‌ی $t = 0$ تحت تأثیر اختلال وابسته به زمان $\hat{V}(t) = V_0 \hat{x} \delta(x - 3a/4) e^{-t/\tau}$ که در آن V_0 یک پارامتر کوچک است، قرار می‌گیرد. احتمال آن که در $t = +\infty$ ذره در نخستین حالت برانگیخته‌ی خود ($n = 2$) یافت شود را محاسبه کنید.

۲۳. یک نوسانگر هماهنگ همسانگرد (سه‌بعدی) را در نظر بگیرید که گذاری از دومین حالت برانگیخته به نخستین حالت برانگیخته (یعنی $1p \rightarrow 2s$) انجام می‌دهد.

(الف) آهنگ گذار متناظر با $1p \rightarrow 2s$ را محاسبه کنید.

(ب) شدت وابسته به گذار $1p \rightarrow 2s$ را بیابید.

۲۴. ذره‌ای را در نظر بگیرید که در ابتدا (یعنی هنگامی که $t < 0$ است) در جعبه‌ی پتانسیل سه‌بعدی زیر در حالت پایه‌ی خود قرار دارد:

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 & 0 < x < a, 0 < y < 2a, 0 < z < 4a \\ +\infty & \text{در جاهای دیگر} \end{cases}$$

(الف) انرژی و تابع موج حالت پایه و نخستین حالت برانگیخته را بیابید.

(ب) آنگاه در لحظه‌ی $t = 0$ این ذره تحت تأثیر اختلال وابسته به زمان $\hat{V}(t) = V_0 \hat{x} \hat{z} e^{-t/\tau}$ که در

آن V_0 یک پارامتر کوچک است، قرار می‌گیرد. احتمال آن که ذره پس از مدتی طولانی ($t = +\infty$) در نخستین حالت برانگیخته یافت شود را محاسبه کنید.

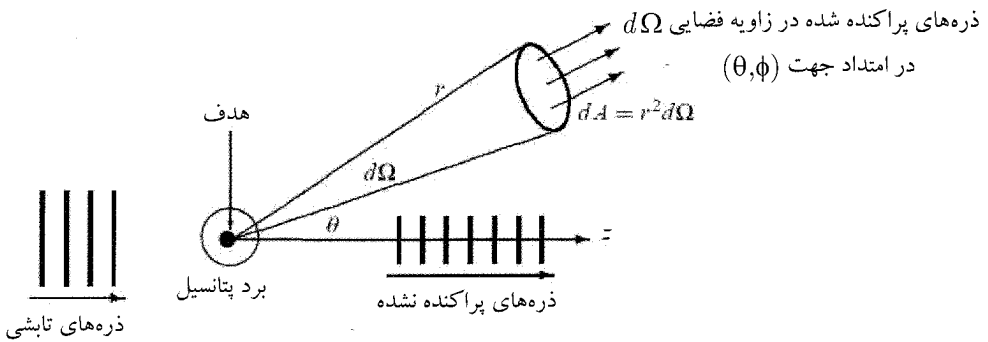
فصل یازدهم

نظریه‌ی پراکندگی

بیشتر درک ما از ساختار ماده از پراکندگی ذره‌ها به دست می‌آید. اگر به دلیل پراکندگی نبود، ساختار دنیای میکروفیزیکی برای بشر غیرقابل دسترس باقی می‌ماند. از طریق آزمایش‌های پراکندگی است که اجزای سازنده‌ی ماده از قبیل هسته‌ی اتم، نوکلئون‌ها و کوارک‌های گوناگون کشف شده‌اند.

۱-۱۱ پراکندگی و سطح مقطع

در یک آزمایش پراکندگی، برخورد باریکه‌ای فرودی از ذره‌ها و یک ماده‌ی هدف مورد مشاهده قرار می‌گیرد. تعداد کل برخوردها در طول مدت زمان آزمایش متناسب با تعداد کل ذره‌های فرودی و تعداد ذره‌های هدف در واحد سطح در مسیر باریکه است. در این آزمایش‌ها، محصولات برخورد که از هدف بیرون می‌آیند، شمارش می‌شوند. پس از پراکندگی، ذره‌هایی که با هدف برهمکنش ندارند (بدون آشفتگی) به حرکت خود در جهت رو به جلو ادامه می‌دهند ولی ذره‌هایی که با هدف برهمکنش دارند، با زاویه‌ای که در شکل ۱-۱۱ نشان داده شده است، پراکنده (منحرف) می‌شوند. تعداد ذره‌های خارج شده از هدف از جهت به جهت دیگر تغییر می‌کند. تعداد ذره‌های پراکنده شده در زاویه‌ی فضایی $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ متناسب با کمیتی است که نقشی اساسی در فیزیک پراکندگی ایفا می‌کند: سطح مقطع دیفرانسیلی. سطح مقطع دیفرانسیلی که با $d\sigma(\theta, \varphi)/d\Omega$ نمایش داده می‌شود، به صورت تعداد ذره‌های پراکنده شده



شکل ۱۱-۱ پراکندگی بین باریکه‌ای فرودی از ذره‌ها و یک هدف ثابت: ذره‌های پراکنده شده در داخل زاویه‌ی فضایی $d\Omega$ در امتداد جهت (θ, φ) آشکارسازی می‌شوند.

در المان زاویه‌ی فضایی $d\Omega$ در جهت (θ, φ) در واحد زمان و شار فرودی تعریف می‌شود:

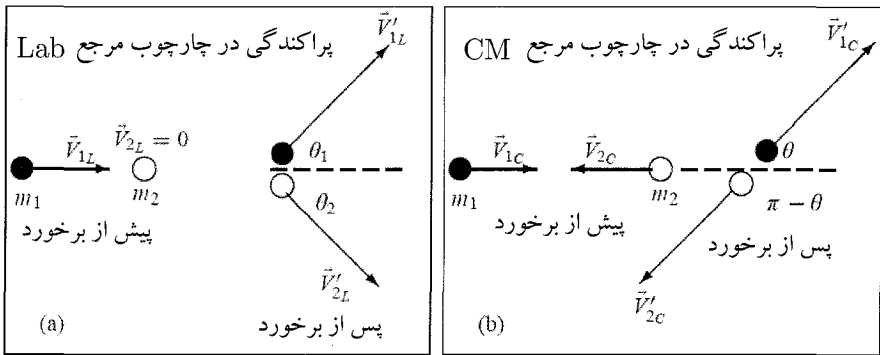
$$\frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} = \frac{1}{J_{inc}} \frac{dN(\theta, \varphi)}{d\Omega} \quad (۱-۱۱)$$

که در آن J_{inc} شار فرودی (یا چگالی جریان فرودی) و برابر با تعداد ذره‌های فرودی در واحد سطح و در واحد زمان است. می‌توانیم ثابت کنیم که $d\sigma/d\Omega$ دارای ابعاد سطح است از این رو مناسب است آن را سطح مقطع دیفرانسیلی بنامیم.

رابطه‌ی بین $d\sigma/d\Omega$ و سطح مقطع کل σ واضح است:

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} \frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} d\varphi \quad (۲-۱۱)$$

بیشتر آزمایش‌های پراکندگی در چارچوب آزمایشگاه (Lab) انجام می‌شوند که در آن هدف در ابتدا ساکن است در حالی که پرتابه‌ها در حال حرکت‌اند. به صورت کلی، محاسبه‌ی سطح مقطع‌ها در چارچوب مرکز جرم (CM) که در آن مرکز جرم سیستم پرتابه‌ها-هدف (قبل و بعد از برخورد) ساکن است، ساده‌تر است. برای مقایسه‌ی اندازه‌گیری‌های تجربی با محاسبات نظری، باید چگونگی تبدیل سطح مقطع‌ها از یک چارچوب به چارچوب دیگر را بدانیم. باید یادآوری کنیم که سطح مقطع کل σ در هر دو چارچوب یکسان است زیرا تعداد کل برخوردهایی که روی می‌دهند به چارچوبی که در آن مشاهده انجام می‌شود، بستگی ندارد. در رابطه با سطح مقطع‌های دیفرانسیلی $d\sigma(\theta, \varphi)/d\Omega$ باید گفت که در هر دو چارچوب یکسان نیستند زیرا زاویه‌های پراکندگی (θ, φ) به چارچوب مرجع بستگی دارند.



شکل ۱۱-۲ پراکندگی کشسان دو ذره بدون ساختار در چارچوب‌های Lab و CM: ذره‌ای به جرم m_1 به ذره‌ی m_2 که در ابتدا ساکن است، برخورد می‌کند.

۱-۱-۱۱ ارتباط بین زاویه‌ها در چارچوب‌های Lab و CM

برای یافتن ارتباط بین سطح مقطع‌های Lab و CM ابتدا باید بفهمیم که چگونه زاویه‌های پراکندگی در یک چارچوب به همتهای خود در چارچوب دیگر مربوط می‌شوند. ابتدا بیایید پراکندگی دو ذره‌ی (بدون ساختار و غیرنسبیتی) به جرم‌های m_1 و m_2 را بررسی کنیم. m_2 هدف را نمایش می‌دهد که در ابتدا ساکن بوده و m_1 پرتابه است. شکل ۱۱-۲ چنین پراکندگی‌ای را در چارچوب‌های Lab و CM نمایش می‌دهد که در آن θ و θ_1 به ترتیب زاویه‌های پراکندگی m_1 در چارچوب‌های Lab و CM هستند. در اینجا علاقمند به آشکارسازی m_1 هستیم. در ادامه، می‌خواهیم رابطه‌ی بین θ_1 و θ را بیابیم. اگر \mathbf{r}_{1C} و \mathbf{r}_{1L} به ترتیب مکان m_1 در چارچوب‌های Lab و CM را نمایش دهند و \mathbf{R} مکان مرکز جرم نسبت به چارچوب Lab را نمایش دهد آنگاه داریم: $\mathbf{r}_{1L} = \mathbf{r}_{1C} + \mathbf{R}$. مشتق زمانی این رابطه به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\mathbf{V}_{1L} = \mathbf{V}_{1C} + \mathbf{V}_{CM} \quad (۳-۱۱)$$

که در آن \mathbf{V}_{1C} و \mathbf{V}_{1L} سرعت‌های m_1 در چارچوب‌های Lab و CM قبل از برخورد هستند و \mathbf{V}_{CM} سرعت CM نسبت به چارچوب Lab است. به صورت مشابه، سرعت m_1 پس از برخورد برابر است با

$$\mathbf{V}'_{1L} = \mathbf{V}'_{1C} + \mathbf{V}_{CM} \quad (۴-۱۱)$$

از شکل ۱۱-۲ الف می‌توانیم مؤلفه‌های x و y (۴-۱۱) را نتیجه بگیریم:

$$V'_{1L} \cos \theta_1 = V'_{1C} \cos \theta + V_{CM} \quad (۵-۱۱)$$

$$V'_{1L} \sin \theta_1 = V'_{1C} \sin \theta \quad (۶-۱۱)$$

با تقسیم (۱۱-۶) بر (۱۱-۵) به نتیجه‌ی زیر می‌رسیم:

$$\tan \theta_1 = \frac{\sin \theta}{\cos \theta + V_{CM}/V'_{1C}} \quad (۷-۱۱)$$

که در آن می‌توان نشان داد که V_{CM}/V'_{1C} برابر با m_1/m_2 است. برای دیدن این موضوع، با توجه به این که $V_{2L} = 0$ است، داریم:

$$V_{CM} = \frac{m_1 V_{1L} + m_2 V_{2L}}{m_1 + m_2} = \frac{m_1}{m_1 + m_2} V_{1L} \quad (۸-۱۱)$$

که هنگامی که در (۱۱-۳) وارد شود، به $V_{1L} = V_{1C} + m_1 V_{1L}/(m_1 + m_2)$ می‌انجامد. از این رو

$$V_{1C} = \left(1 - \frac{m_1}{m_1 + m_2}\right) V_{1L} = \frac{m_2}{m_1 + m_2} V_{1L} \quad (۹-۱۱)$$

از سوی دیگر، چون مرکز جرم در چارچوب CM ساکن است، تکانه‌های کل قبل و بعد از برخوردها جداگانه صفرند:

$$p_c = m_1 V_{1C} - m_2 V_{2C} = 0 \quad \Rightarrow \quad V_{2C} = \frac{m_1}{m_2} V_{1C} \quad (۱۰-۱۱)$$

$$p'_{c_x} = m_1 V'_{1C} \cos \theta - m_2 V'_{2C} \cos \theta = 0 \quad \Rightarrow \quad V'_{2C} = \frac{m_1}{m_2} V'_{1C} \quad (۱۱-۱۱)$$

در حالت برخورد کشسان، سرعت ذره‌ها در چارچوب CM قبل و بعد از برخورد یکسان‌اند. برای دیدن این موضوع، با توجه به این که انرژی جنبشی پایسته است، جاگذاری (۱۰-۱۱) و (۱۱-۱۱) در

$$V'_{2C} = V_{2C} \text{ و } V'_{1C} = V_{1C} \text{ تساوی‌های } \frac{1}{2} m_1 V'_{1C}{}^2 + \frac{1}{2} m_2 V'_{2C}{}^2 = \frac{1}{2} m_1 V_{1C}{}^2 + \frac{1}{2} m_2 V_{2C}{}^2$$

را نتیجه می‌دهد. بنابراین می‌توانیم (۹-۱۱) را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$V'_{1C} = V_{1C} = \frac{m_2}{m_1 + m_2} V_{1L} \quad (۱۲-۱۱)$$

با تقسیم (۱۱-۸) بر (۱۲-۱۱)، به دست می‌آوریم:

$$\frac{V_{CM}}{V'_{1C}} = \frac{m_1}{m_2} \quad (۱۳-۱۱)$$

سرانجام جاگذاری (۱۳-۱۱) در (۷-۱۱) نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\tan \theta_1 = \frac{\sin \theta}{\cos \theta + V_{2C}/V_{1C}} = \frac{\sin \theta}{\cos \theta + m_1/m_2} \quad (۱۴-۱۱)$$

که با استفاده از $\cos \theta_1 = 1/\sqrt{\tan^2 \theta_1 + 1}$ به صورت زیر در می‌آید:

$$\cos \theta_1 = \frac{\cos \theta + \frac{m_1}{m_2}}{\sqrt{1 + \frac{m_1^2}{m_2^2} + 2 \frac{m_1}{m_2} \cos \theta}} \quad (۱۵-۱۱)$$

ملاحظات

در تشابه با تحلیل قبلی، می‌توانیم رابطه‌ای بین θ_2 و θ برقرار کنیم. از (۴-۱۱) داریم: $V'_{\gamma L} = V'_{\gamma C} + V_{CM}$. مؤلفه‌های x و y این رابطه عبارتند از

$$V'_{\gamma L} \cos \theta_2 = -V'_{\gamma C} \cos \theta + V_{CM} = (-\cos \theta + 1)V'_{\gamma C} \quad (۱۶-۱۱)$$

$$V'_{\gamma L} \sin \theta_2 = -V'_{\gamma C} \sin \theta \quad (۱۷-۱۱)$$

در به‌دست آوردن (۱۶-۱۱) از $V_{CM} = V'_{\gamma C} = V_{\gamma C}$ استفاده کرده‌ایم. ترکیب (۱۶-۱۱) و (۱۷-۱۱) به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\tan \theta_2 = \frac{\sin \theta}{-\cos \theta + V_{CM}/V'_{\gamma C}} = \frac{\sin \theta}{1 - \cos \theta} = \cos \left(\frac{\theta}{2} \right) \Rightarrow \theta_2 = \frac{\pi - \theta}{2} \quad (۱۸-۱۱)$$

۱-۱-۱۱ ارتباط بین سطح مقطع‌های Lab و CM

می‌توان ارتباط بین سطح مقطع‌های دیفرانسیلی در چارچوب‌های Lab و CM را از این واقعیت نتیجه گرفت که تعداد ذره‌های پراکنده شده‌ای که از داخل سطح مقطع بی‌نهایت کوچک $d\sigma$ عبور می‌کنند در هر دو چارچوب یکسان است: $d\sigma(\theta_1, \varphi_1) = d\sigma(\theta, \varphi)$. آنچه که تفاوت دارد زاویه‌ی فضایی $d\Omega$ است زیرا در چارچوب Lab از $d\Omega_1 = \sin \theta_1 d\theta_1 d\varphi_1$ و در چارچوب CM از $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$ به‌دست می‌آید. بنابراین داریم:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega_1} \right)_{Lab} d\Omega_1 = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{CM} d\Omega \Rightarrow \left(\frac{d\sigma}{d\Omega_1} \right)_{Lab} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{CM} \frac{\sin \theta}{\sin \theta_1} \frac{d\theta}{d\theta_1} \frac{d\varphi}{d\varphi_1} \quad (۱۹-۱۱)$$

که در آن زاویه‌های پراکندگی ذره‌ی m_1 در چارچوب Lab و (θ, φ) زاویه‌های آن در چارچوب CM هستند. چون حول جهت باریکه‌ی فرودی تقارن استوانه‌ای وجود دارد، داریم: $\varphi = \varphi_1$ و از این رو

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega_1} \right)_{Lab} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{CM} \frac{d(\cos \theta)}{d(\cos \theta_1)} \quad (۲۰-۱۱)$$

از (۱۵-۱۱) داریم:

$$\frac{d \cos \theta_1}{d \cos \theta} = \frac{1 + \frac{m_1}{m_\gamma} \cos \theta}{\left(1 + \frac{m_\gamma^2}{m_\gamma^2} + 2 \frac{m_1}{m_\gamma} \cos \theta \right)^{3/2}} \quad (۲۱-۱۱)$$

که هنگامی که در (۱۱-۲۰) جاگذاری شود، به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega_1}\right)_{Lab} = \frac{\left(1 + \frac{m_1^2}{m_2^2} + 2\frac{m_1}{m_2} \cos\theta\right)^{3/2}}{1 + \frac{m_1}{m_2} \cos\theta} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{CM} \quad (22-11)$$

به صورت مشابه، می‌توانیم نشان دهیم که (۱۱-۲۰) و (۱۱-۱۸) نتیجه‌ی زیر را می‌دهند:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega_2}\right)_{Lab} = \frac{1}{\cos\theta_2} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega_2}\right)_{CM} = \frac{1}{\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega_2}\right)_{CM} \quad (23-11)$$

حالت‌های حدی

(الف) اگر $m_2 \gg m_1$ باشد (یا هنگامی که $\frac{m_1}{m_2} \rightarrow 0$) آنگاه نتیجه‌های Lab و CM یکسان‌اند زیرا (۱۵-۱۱) به $\theta_1 = \theta$ و (۲۲-۱۱) به $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega_1}\right)_{Lab} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{CM}$ می‌انجامد. (ب) اگر $m_2 = m_1$ باشد آنگاه (۱۵-۱۱) به $\tan\theta_1 = \tan(\theta/2)$ یا $\theta_1 = \theta/2$ می‌انجامد. در این حالت (۲۲-۱۱) رابطه‌ی $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega_1}\right)_{Lab} = \frac{1}{\cos(\theta/2)} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{CM}$ را نتیجه می‌دهد.

مثال ۱۱-۱

در یک برخورد کشسان بین دو ذره با جرم‌های یکسان، نشان دهید که دو ذره در زاویه‌ی قائمه نسبت به یکدیگر در چارچوب Lab خارج می‌شوند.

حل

در حالت خاص $m_1 = m_2$ ، معادله‌های (۱۱-۱۴) و (۱۱-۱۸) به ترتیب به صورت‌های زیر در می‌آیند:

$$\tan\theta_1 = \tan\left(\frac{\theta}{2}\right), \quad \tan\theta_2 = \cot\left(\frac{\theta}{2}\right) = \tan\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}\right) \quad (24-11)$$

این دو معادله نتیجه‌های زیر را می‌دهند:

$$\theta_1 = \frac{\theta}{2}, \quad \theta_2 = \frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2} = \frac{\pi}{2} - \theta_1 \quad (25-11)$$

از این رو $\theta_1 + \theta_2 = \pi/2$ است. در این حالت‌ها، (۲۲-۱۱) و (۲۳-۱۱) نتیجه‌های زیر را می‌دهند:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega_1}\right)_{Lab} = \frac{1}{\cos\theta_1} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega_1}\right)_{CM} = \frac{1}{\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega_1}\right)_{CM} \quad (26-11)$$

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega_2}\right)_{Lab} = \frac{1}{\cos\theta_2} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega_2}\right)_{CM} = \frac{1}{\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega_2}\right)_{CM} \quad (27-11)$$

۲-۱۱ دامنه‌ی پراکندگی ذره‌های بدون اسپین

بحث قبلی به تعریف‌های سطح مقطع و چگونگی تبدیل آن از چارچوب Lab به چارچوب CM می‌پرداخت. نتیجه‌های به دست آمده هم برای مکانیک کلاسیک و هم برای مکانیک کوانتومی به کار می‌رود. در این بخش به توصیف کوانتومی پراکندگی می‌پردازیم. برای راحتی، حالت پراکندگی کشسان^۱ بین دو ذره‌ی غیرنسبیتی بدون اسپین به جرم‌های m_1 و m_2 را بررسی می‌کنیم. در طول فرآیند پراکندگی، ذره‌ها با یکدیگر برهمکنش می‌کنند. اگر برهمکنش مستقل از زمان باشد آنگاه می‌توانیم سیستم دو ذره‌ای را با حالت‌های مانا توصیف کنیم:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) e^{-iE_T t/\hbar} \quad (28-11)$$

که در آن انرژی کل و $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ جواب معادله‌ی شرودینگر مستقل از زمان است:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 + \hat{V}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right] \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E_T \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (29-11)$$

$\hat{V}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ پتانسیل نمایش‌دهنده‌ی برهمکنش بین دو ذره است.

در حالتی که در آن برهمکنش بین m_1 و m_2 تنها به فاصله‌ی نسبی $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ آنها بستگی دارد (یعنی $\hat{V}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \hat{V}(r)$)، همانطور که در فصل ۶ دیده شد، می‌توانیم مسأله‌ی ویژه‌مقدار (۲۹-۱۱) را به دو مسأله‌ی ویژه‌مقداری جدا از هم کاهش دهیم: یکی برای مرکز جرم (CM) که مانند یک ذره‌ی آزاد به جرم $M = m_1 + m_2$ حرکت می‌کند که در اینجا به آن کاری نداریم و دیگری برای یک ذره‌ی فرضی با جرم کاهش یافته‌ی $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ که در پتانسیل $\hat{V}(r)$ حرکت می‌کند:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + \hat{V}(r) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) \quad (30-11)$$

بنابراین مسأله‌ی پراکندگی بین دو ذره به حل این معادله کاهش می‌یابد. قصد داریم نشان دهیم که می‌توان سطح مقطع دیفرانسیلی در چارچوب CM را از شکل مجانبی جواب (۳۰-۱۱) به دست آورد. آنگاه می‌توان از جواب‌های آن برای محاسبه‌ی احتمال در واحد زاویه‌ی فضایی در واحد زمانی که ذره‌ی μ در داخل زاویه‌ی فضایی $d\Omega$ در جهت (θ, φ) پراکنده می‌شود، استفاده کرد. این احتمال از سطح مقطع دیفرانسیلی $d\sigma/d\Omega$ به دست می‌آید. در مکانیک کوانتومی، ذره‌ی فرودی به وسیله‌ی بسته‌ی موجی که با هدف برهمکنش می‌کند، توصیف می‌شود. بسته‌ی موج فرودی باید از نظر فضایی بزرگ باشد به طوری که پهن‌شدگی در طول آزمایش قابل ملاحظه نباشد. بسته‌ی موج باید در مقایسه با اندازه‌ی هدف بزرگ و در مقایسه با اندازه‌ی آزمایشگاه (Lab) کوچک باشد به طوری که به صورت همزمان با هدف و آشکارساز در پراکندگی کشسان، حالت‌های داخلی و ساختار ذره‌های برخوردکننده تغییر نمی‌کند.

(۱) در پراکندگی کشسان، حالت‌های داخلی و ساختار ذره‌های برخوردکننده تغییر نمی‌کند.

همپوشانی نکنند. پس از پراکندگی، تابع موج از یک قسمت پراکنده نشده که رو به جلو انتشار می‌یابد و یک قسمت پراکنده شده که در امتداد جهت (θ, φ) منتشر می‌شود، تشکیل شده است.

می‌توانیم (۱۱-۳۰) را به این صورت توصیف کنیم که نمایش‌دهنده‌ی پراکندگی ذره‌ی به جرم μ از یک مرکز پراکندگی ثابت است که با $V(r)$ بیان می‌شود، که در آن r فاصله‌ی ذره‌ی μ تا مرکز $V(r)$ است. فرض می‌کنیم که $V(r)$ دارای گستره‌ی متناهی a است. بنابراین برهمکنش بین ذره و پتانسیل تنها در ناحیه‌ی فضایی محدود $r \leq a$ روی می‌دهد که برد $V(r)$ یا ناحیه‌ی پراکندگی نامیده می‌شود. در خارج از برد $(r > a)$ پتانسیل صفر می‌شود ($V(r) = 0$) آنگاه مسأله‌ی ویژه‌مقدار (۱۱-۳۰) به صورت زیر در می‌آید:

$$(\nabla^2 + k_0^2) \phi_{inc}(\mathbf{r}) = 0 \quad (11-31)$$

که در آن $k_0^2 = 2\mu E / \hbar^2$ است. در این حالت μ قبل از برخورد به صورت یک ذره‌ی آزاد رفتار می‌کند و از این رو می‌توان آن را با یک موج تخت توصیف کرد:

$$\phi_{inc}(\mathbf{r}) = A e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} \quad (11-32)$$

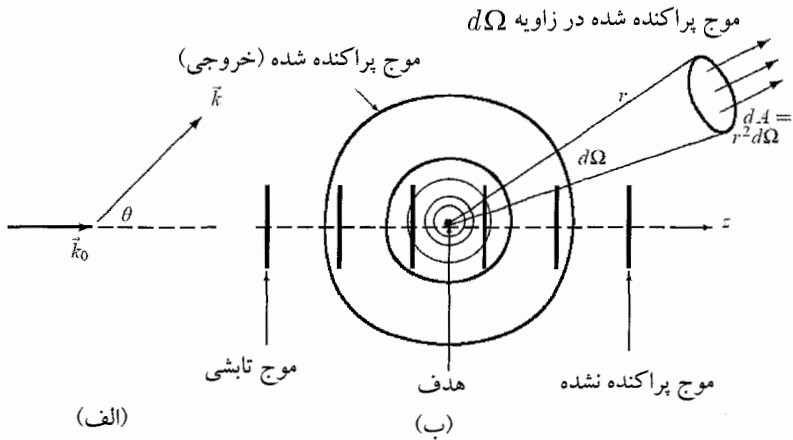
که در آن \mathbf{k}_0 بردار موج وابسته به ذره‌ی فرودی و A ضریب بهنجارش است. بنابراین ذره‌های باریکه‌ی فرودی قبل از برهمکنش با هدف، مستقل از یکدیگرند و مانند ذره‌های آزاد هر یک با تکانه‌ی $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}_0$ حرکت می‌کنند. هنگامی که موج فرودی (۱۱-۳۲) با هدف برخورد یا برهمکنش می‌کند، موج خروجی $\phi_{sc}(\mathbf{r})$ به بیرون پراکنده می‌شود. در حالت پراکندگی همسانگرد، موج پراکنده شده متقارن کروی و به شکل $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} / r$ است. به صورت کلی، موج پراکنده شده دارای تقارن کروی نیست و دامنه‌ی آن به جهت (θ, φ) در امتدادی که آشکارسازی می‌شود، بستگی دارد و از این رو

$$\phi_{sc}(\mathbf{r}) = A f(\theta, \varphi) \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{r} \quad (11-33)$$

که در آن $f(\theta, \varphi)$ دامنه‌ی پراکندگی نامیده می‌شود و \mathbf{k} بردار موج وابسته به ذره‌ی پراکنده شده است و همانطور که در شکل ۱۱-۳ نشان داده شده است، θ زاویه‌ی بین \mathbf{k}_0 و \mathbf{k} است. پس از این که پراکندگی روی می‌دهد (شکل ۱۱-۳ ب)، موج کل از برهنه‌ی موج تخت فرودی (۱۱-۳۲) و موج پراکنده شده‌ی (۱۱-۳۳) تشکیل می‌شود:

$$\psi(\mathbf{r}) = \phi_{inc}(\mathbf{r}) + \phi_{sc}(\mathbf{r}) \simeq A \left[e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{r} \right] \quad (11-34)$$

که در آن A ضریب بهنجارش است. همانطور که در (۱۱-۴۰) نشان داده خواهد شد، چون A اثری روی سطح مقطع ندارد، آن را در ادامه‌ی این فصل برابر با یک در نظر خواهیم گرفت. حال باید $f(\theta, \varphi)$ و $d\sigma/d\Omega$ را تعیین کنیم. در بخش بعد، قصد داریم نشان دهیم که سطح مقطع دیفرانسیلی برحسب دامنه‌ی پراکندگی از $d\sigma/d\Omega = |f(\theta, \varphi)|^2$ به دست می‌آید.



شکل ۳-۱۱ (الف) زاویه‌ی بین بردارهای موج فرودی و پراکنده شده‌ی \mathbf{k} و \mathbf{k}_0 . (ب) موج‌های فرودی و پراکنده شده: موج فرودی یک موج تخت است $(\phi_{inc}(\mathbf{r}) = Ae^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}})$ و موج پراکنده شده $(\phi_{sc}(\mathbf{r}) = Af(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r})$ موج خروجی است.

۱-۲-۱۱ دامنه‌ی پراکندگی و سطح مقطع دیفرانسیلی

دامنه‌ی پراکندگی $f(\theta, \varphi)$ نقشی اساسی در نظریه‌ی پراکندگی ایفا می‌کند زیرا سطح مقطع دیفرانسیلی را تعیین می‌کند. برای دیدن این موضوع ابتدا بیا باید چگالی‌های شار فرودی و پراکنده شده را معرفی کنیم:

$$\mathbf{J}_{inc} = \frac{i\hbar}{\mu} (\phi_{inc} \nabla \phi_{inc}^* - \phi_{inc}^* \nabla \phi_{inc}) \quad (۳۵-۱۱)$$

$$\mathbf{J}_{sc} = \frac{i\hbar}{\mu} (\phi_{sc} \nabla \phi_{sc}^* - \phi_{sc}^* \nabla \phi_{sc}) \quad (۳۶-۱۱)$$

با وارد کردن (۳۲-۱۱) در (۳۵-۱۱) و (۳۳-۱۱) در (۳۶-۱۱) و در نظر گرفتن دامنه‌ی عبارت‌های به‌دست آمده، به نتیجه‌ی زیر می‌رسیم:

$$J_{inc} = |A|^2 \frac{\hbar k_0}{\mu}, \quad J_{sc} = |A|^2 \frac{\hbar k}{\mu r^2} |f(\theta, \varphi)|^2 \quad (۳۷-۱۱)$$

حال به یاد بیاورید که تعداد $dN(\theta, \varphi)$ ذره‌ی پراکنده شده در المان زاویه‌ی فضایی $d\Omega$ در جهت (θ, φ) و عبوری از المان سطح $dA = r^2 d\Omega$ در واحد زمان به صورت زیر به دست می‌آید (۱-۱۱) را ببینید):

$$dN(\theta, \varphi) = J_{sc} r^2 d\Omega \quad (۳۸-۱۱)$$

این رابطه هنگامی که با (۳۷-۱۱) ترکیب شود، نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\frac{dN}{d\Omega} = J_{sc} r^2 = |A|^2 \frac{\hbar k}{\mu} |f(\theta, \varphi)|^2 \quad (۳۹-۱۱)$$

حال با وارد کردن (۱۱-۳۹) و $J_{inc} = |A|^2 \hbar k_0 / \mu$ در (۱۱-۱) به نتیجه‌ی زیر می‌رسیم:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{J_{inc}} \frac{dN}{d\Omega} = \frac{k}{k_0} |f(\theta, \varphi)|^2 \quad (۱۱-۴۰)$$

چون ضریب بهنجارش A سهمی در سطح مقطع دیفرانسیلی ندارد، آن را برابر با یک در نظر خواهیم گرفت. برای پراکندگی کشسان، k_0 برابر با k است از این رو (۱۱-۴۰) به رابطه‌ی زیر کاهش می‌یابد:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \varphi)|^2 \quad (۱۱-۴۱)$$

بنابراین مسأله‌ی تعیین سطح مقطع دیفرانسیلی $d\sigma/d\Omega$ به مسأله‌ی یافتن دامنه‌ی پراکندگی $f(\theta, \varphi)$ منجر می‌شود.

۱۱-۲-۲ دامنه‌ی پراکندگی

در اینجا قصد داریم نشان دهیم که می‌توانیم سطح مقطع دیفرانسیلی در چارچوب CM را از شکل مجانبی جواب معادله‌ی شرودینگر (۱۱-۳۰) به دست آوریم. ابتدا تا بر روی تعیین $f(\theta, \varphi)$ متمرکز می‌شویم. می‌توان آن را از جواب‌های (۱۱-۳۰) به دست آورد که به نوبه‌ی خود می‌توان آن را به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(\mathbf{r}) = \frac{\gamma\mu}{\hbar^2} V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \quad (۱۱-۴۲)$$

جواب عمومی این معادله از جمع دو مؤلفه تشکیل شده است: یکی جواب عمومی معادله‌ی همگن:

$$(\nabla^2 + k_0^2)\psi_{homo}(\mathbf{r}) = 0 \quad (۱۱-۴۳)$$

و یک جواب خصوصی (۱۱-۴۲). ابتدا توجه کنید که $\psi_{homo}(\mathbf{r})$ چیزی جز موج تخت فرودی (۱۱-۳۲) نیست. در رابطه با جواب خصوصی (۱۱-۴۲) باید گفت که می‌توانیم آن را برحسب تابع گرین بیان کنیم. بنابراین جواب عمومی (۱۱-۴۲) از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\psi(\mathbf{r}) = \phi_{inc}(\mathbf{r}) + \frac{\gamma\mu}{\hbar^2} \int G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3 r' \quad (۱۱-۴۴)$$

که در آن $\phi_{inc}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}}$ و $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ تابع گرین متناظر با عملگر سمت چپ (۱۱-۴۳) است. تابع $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ از حل معادله‌ی منبع نقطه‌ای به دست می‌آید:

$$(\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (۱۱-۴۵)$$

که در آن $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ و $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ به صورت زیر از تبدیلات فوری‌ی آنها به دست می‌آیند:

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \tilde{G}(\mathbf{q}) d^3q \quad (۴۶-۱۱)$$

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} d^3q \quad (۴۷-۱۱)$$

جاگذاری (۴۶-۱۱) و (۴۷-۱۱) در (۴۵-۱۱) به نتیجه‌ی زیر می‌انجامد:

$$(-\mathbf{q}^2 + k^2) \tilde{G}(\mathbf{q}) = 1 \quad \Rightarrow \quad \tilde{G}(\mathbf{q}) = \frac{1}{k^2 - q^2} \quad (۴۸-۱۱)$$

عبارت مربوط به $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ از وارد کردن (۴۸-۱۱) در (۴۶-۱۱) به دست می‌آید:

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}}{k^2 - q^2} d^3q \quad (۴۹-۱۱)$$

برای انتگرال‌گیری روی زاویه‌ها در

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \frac{q^2 dq}{k^2 - q^2} \int_0^\pi e^{iq|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \cos \theta} \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \quad (۵۰-۱۱)$$

تنها باید تغییر متغیر $x = \cos \theta$ را انجام دهیم:

$$\int_0^\pi e^{iq|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \cos \theta} \sin \theta d\theta = \int_{-1}^1 e^{iq|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|x} dx = \frac{1}{iq|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \left(e^{iq|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - e^{-iq|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right) \quad (۵۱-۱۱)$$

از این رو (۵۰-۱۱) به صورت زیر در می‌آید:

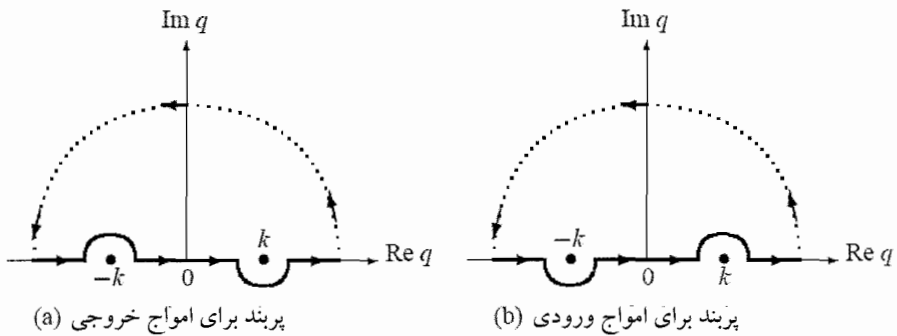
$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi^2 i |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \int_0^\infty \frac{q}{k^2 - q^2} \left(e^{iq|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - e^{-iq|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right) dq \quad (۵۲-۱۱)$$

یا

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi^2 i |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{q e^{iq|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{q^2 - k^2} dq \quad (۵۳-۱۱)$$

می‌توانیم این انتگرال را به روش مانده‌ها و با بستن پربند در نیمه‌ی بالایی صفحه‌ی q حساب کنیم که برابر با $2\pi i$ ضربدر مانده‌ی انتگرالده در قطب‌ها است. چون دو قطب ($q = \pm k$) وجود دارد، انتگرال دارای دو مقدار ممکن است. مقدار متناظر با قطب واقع در $q = k$ که درون پربند انتگرال در شکل ۴-۱۱ الف قرار می‌گیرد، از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$G_+(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (۵۴-۱۱)$$



شکل ۱۱-۴ پربندهای متناظر با موج‌های خروجی و ورودی.

و مقدار مربوط به قطب واقع در $q = -k$ (شکل ۱۱-۴ ب) برابر است با

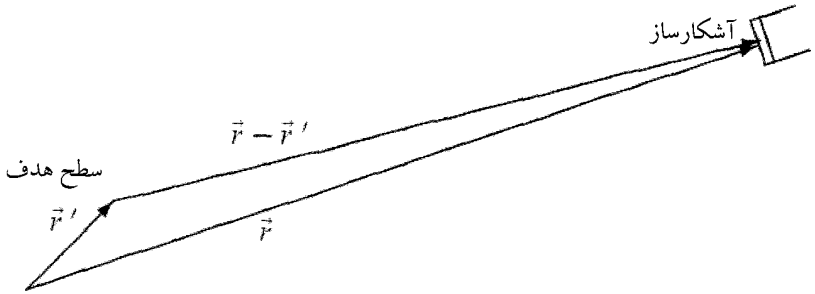
$$G_-(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{-ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (11-55)$$

تابع گرین $G_+(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ یک موج کروی خروجی گسیل شده از \mathbf{r}' را نمایش می‌دهد و تابع $G_-(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ متناظر با یک موج ورودی است که در \mathbf{r}' همگرا می‌شود. چون موج‌های پراکنده شده، موج‌های خروجی‌اند، تنها $G_+(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ مورد توجه ما است. با وارد کردن (۱۱-۵۴) در (۱۱-۴۴)، تابع موج پراکنده شده‌ی کل را به دست می‌آوریم:

$$\psi(\mathbf{r}) = \phi_{inc}(\mathbf{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3r' \quad (11-56)$$

این یک معادله‌ی انتگرالی است که هنوز جواب نامعلوم $\psi(\mathbf{r})$ را به دست نمی‌دهد ولی در انتگرالده آن را در خود دارد. تمام آنچه که انجام داده‌ایم، بازنویسی معادله‌ی (دیفرانسیلی) شرودینگر (۱۱-۳۰) به شکل انتگرالی (۱۱-۵۶) بوده است زیرا استفاده از شکل انتگرالی در نظریه‌ی پراکنندگی مناسب است. قصد داریم تا نشان دهیم که در حد مجانبی $r \rightarrow \infty$ ، (۱۱-۵۶) به (۱۱-۳۴) منجر می‌شود. اما ابتدا یادآوری می‌کنیم که به صورت تقریبی می‌توان (۱۱-۵۶) را به وسیله‌ی یک سری از تقریب‌های متوالی یا تکراری که به عنوان سری بورن شناخته می‌شوند، حل کرد. جواب مرتبه‌ی صفر از $\psi_0(\mathbf{r}) = \phi_{inc}(\mathbf{r})$ به دست می‌آید. جواب مرتبه‌ی نخست $\psi_1(\mathbf{r})$ از وارد کردن $\psi_0(\mathbf{r}) = \phi_{inc}(\mathbf{r})$ در علامت انتگرال (۱۱-۵۶) به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} \psi_1(\mathbf{r}) &= \phi_{inc}(\mathbf{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} V(\mathbf{r}_1) \psi_0(\mathbf{r}_1) d^3r_1 \\ &= \phi_{inc}(\mathbf{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} V(\mathbf{r}_1) \phi_{inc}(\mathbf{r}_1) d^3r_1 \end{aligned} \quad (11-57)$$



شکل ۵-۱۱ فاصله‌ی r از هدف تا آشکارساز در مقایسه با اندازه‌ی r' هدف بسیار بزرگ است: $r \gg r'$.

جواب مرتبه‌ی دوم از وارد کردن $\psi_1(\mathbf{r})$ در (۵۶-۱۱) به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} \psi_2(\mathbf{r}) &= \phi_{inc}(\mathbf{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}_2|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_2|} V(\mathbf{r}_2) \psi_1(\mathbf{r}_2) d^3r_2 \\ &= \phi_{inc}(\mathbf{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}_2|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_2|} V(\mathbf{r}_2) \phi_{inc}(\mathbf{r}_2) d^3r_2 \\ &\quad + \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}_2|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_2|} V(\mathbf{r}_2) d^3r_2 \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1|}}{|\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1|} V(\mathbf{r}_1) \phi_{inc}(\mathbf{r}_1) d^3r_1 \quad (58-11) \end{aligned}$$

با ادامه‌ی این روش، می‌توانیم $\psi(\mathbf{r})$ را تا مرتبه‌ی دلخواه به دست آوریم. تقریب مرتبه‌ی n ام برای تابع موج، یک سری است که در تشابه با (۵۷-۱۱) و (۵۸-۱۱) می‌توان آن را به دست آورد.

حد مجانبی تابع موج

حال قصد داریم تا نشان دهیم که به‌ازای مقدارهای بزرگ r ، (۵۶-۱۱) به (۳۴-۱۱) کاهش می‌یابد. در یک آزمایش پراکندگی، چون آشکارساز در فاصله‌هایی (دور از هدف) قرار دارد که بسیار بزرگ‌تر از اندازه‌ی هدف هستند (شکل ۵-۱۱)، داریم: $r \gg r'$ که در آن r فاصله‌ی بین هدف و آشکارساز و r' اندازه‌ی آشکارساز را نشان می‌دهند. اگر $r \gg r'$ باشد آنگاه می‌توانیم $k|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^{-1}$ و $k|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$ را با رابطه‌های زیر تقریب بزنیم:

$$k|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| = k\sqrt{r^2 - 2\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}' + r'^2} \simeq kr - k\frac{\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'}{r} = kr - \mathbf{k}\cdot\mathbf{r}' \quad (59-11)$$

$$\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = \frac{1}{r} \frac{1}{|1 - \mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'/r^2|} \simeq \frac{1}{r} \left(1 + \frac{\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'}{r^2}\right) \simeq \frac{1}{r} \quad (60-11)$$

که در آن $\mathbf{k} = k\hat{r}$ بردار موج وابسته به ذره‌ی پراکنده شده است. با توجه به دو تقریب قبلی، می‌توانیم شکل مجانبی (۵۶-۱۱) را به صورت زیر بنویسیم:

$$\psi(\mathbf{r}) \rightarrow e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta, \varphi) \quad (r \rightarrow \infty) \quad (61-11)$$

که در آن

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{\mu}{\sqrt{\pi}\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3r' = -\frac{\mu}{\sqrt{\pi}\hbar^2} \langle \phi | \hat{V} | \psi \rangle \quad (۶۲-۱۱)$$

و $\phi(\mathbf{r})$ یک موج تخت $(\phi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}})$ و \mathbf{k} بردار موج، موج پراکنده است. متغیر انتگرال گیری r' درجه های آزادی فضایی هدف را در بر می گیرد. آنگاه سطح مقطع دیفرانسیلی از رابطه ی زیر به دست می آید:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \varphi)|^2 = \frac{\mu^2}{\pi^2 \hbar^4} \left| \int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} \hat{V}(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3r' \right|^2 = \frac{\mu^2}{\pi^2 \hbar^4} \left| \langle \phi | \hat{V} | \psi \rangle \right|^2 \quad (۶۳-۱۱)$$

۱۱-۳ تقریب بورن

۱۱-۳-۱ تقریب نخست بورن

اگر پتانسیل $V(\mathbf{r})$ به اندازه ی کافی ضعیف باشد آنگاه موج تخت فرودی را تنها اندکی واپیچیده می کند. آنگاه تقریب نخست بورن از تقریب زدن تابع موج پراکنده شده ی $\psi(\mathbf{r})$ با یک موج تخت تشکیل می شود. این تقریب متناظر با نخستین تکرار (۱۱-۵۶) است یعنی $\psi(\mathbf{r})$ از (۱۱-۵۷) به دست می آید:

$$\psi(\mathbf{r}) \simeq \phi_{inc}(\mathbf{r}) - \frac{\mu}{\sqrt{\pi}\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \phi_{inc}(\mathbf{r}') d^3r' \quad (۶۴-۱۱)$$

بنابراین با استفاده از (۱۱-۶۲) و (۱۱-۶۳)، می توانیم دامنه و سطح مقطع پراکندگی دیفرانسیلی را در تقریب نخست بورن به صورت زیر بنویسیم:

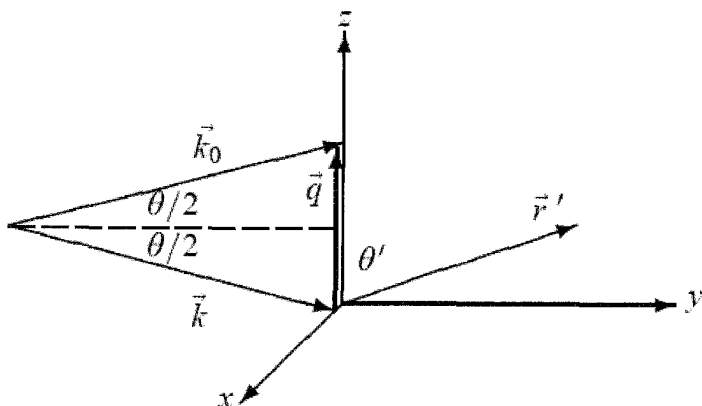
$$f(\theta, \varphi) = -\frac{\mu}{\sqrt{\pi}\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \phi_{inc}(\mathbf{r}') d^3r' = -\frac{\mu}{\sqrt{\pi}\hbar^2} \int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') d^3r' \quad (۶۵-۱۱)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \varphi)|^2 = \frac{\mu^2}{\pi^2 \hbar^4} \left| \int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') d^3r' \right|^2 \quad (۶۶-۱۱)$$

که در آن $\mathbf{q} = \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}$ و $\hbar\mathbf{q}$ انتقال تکانه است. $\hbar\mathbf{k}$ و $\hbar\mathbf{k}_0$ به ترتیب تکانه های خطی ذره های فرودی و پراکنده شده اند.

در پراکندگی کشسان، مقدارهای \mathbf{k} و \mathbf{k}_0 با هم برابرند (شکل ۱۱-۶) از این رو

$$q = |\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}| = \sqrt{k_0^2 + k^2 - 2kk_0 \cos \theta} = k \sqrt{2(1 - \cos^2 \theta)} = 2k \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (۶۷-۱۱)$$



شکل ۶-۱۱ انتقال تکانه برای پراکندگی کشسان: $k_0 = k$ با $q = |\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}| = 2k \sin(\theta/2)$.

اگر پتانسیل $V(\mathbf{r}') = V(r')$ متقارن کروی باشد و با انتخاب محور z در امتداد \mathbf{q} (شکل ۶-۱۱) آنگاه $\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}' = qr' \cos \theta'$ و بنابراین

$$\begin{aligned} \int e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') d^3 r' &= \int_0^\infty r'^2 V(r') dr' \int_0^\pi e^{iqr' \cos \theta'} \sin \theta' d\theta' \int_0^{2\pi} d\varphi' \\ &= 2\pi \int_0^\infty r'^2 V(r') dr' \int_{-1}^1 e^{iqr'x} dx \\ &= \frac{4\pi}{q} \int_0^\infty r' V(r') \sin(qr') dr' \end{aligned} \tag{۶۸-۱۱}$$

با وارد کردن (۶۸-۱۱) در (۶۵-۱۱) و (۶۶-۱۱)، رابطه‌های زیر را به دست می‌آوریم:

$$f(\theta) = -\frac{2\mu}{h^2 q} \int_0^\infty r' V(r') \sin(qr') dr' \tag{۶۹-۱۱}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \frac{4\mu^2}{h^4 q^2} \left| \int_0^\infty r' V(r') \sin(qr') dr' \right|^2 \tag{۷۰-۱۱}$$

به صورت خلاصه، نشان دادیم که با حل معادله‌ی شرودینگر (۱۱-۳) تا تقریب مرتبه‌ی نخست بورن (که در آن پتانسیل $V(\mathbf{r})$ به اندازه‌ی کافی ضعیف است به طوری که تابع موج پراکنده شده تنها اندکی با موج تخت فرودی تفاوت دارد)، سطح مقطع دیفرانسیلی به‌ازای یک پتانسیل متقارن کروی، از معادله‌ی (۱۱-۷۰) به دست می‌آید.

۱۱-۳-۲ اعتبار تقریب نخست بورن

هرگاه تابع موج $\psi(\mathbf{r})$ تنها اندکی با موج تخت فرودی تفاوت داشته باشد یعنی هرگاه جمله ی دوم در (۱۱-۶۴) در مقایسه با جمله ی اول بسیار کوچک باشد آنگاه تقریب نخست بورن معتبر است:

$$\left| \frac{\mu}{\sqrt{2\pi\hbar^2}} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(r') e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}'} d^3r' \right| \ll |\phi_{inc}(\mathbf{r})|^2 \quad (۱۱-۷۱)$$

چون $\phi_{inc} = e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}}$ است، داریم:

$$\left| \frac{\mu}{\sqrt{2\pi\hbar^2}} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(r') e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}'} d^3r' \right| \ll 1 \quad (۱۱-۷۲)$$

در پراکندگی کشسان $k_0 = k$ است و با فرض آن که پتانسیل پراکندگی در نزدیکی $r = 0$ دارای بیشترین مقدار است، داریم:

$$\left| \frac{\mu}{\hbar^2} \int_0^\infty r' e^{ikr'} V(r') \int_0^\pi e^{ikr' \cos \theta'} \sin \theta' d\theta' \right| \ll 1 \quad (۱۱-۷۳)$$

یا

$$\left| \frac{\mu}{\hbar^2 k} \int_0^\infty V(r') (e^{2ikr'} - 1) dr' \right| \ll 1 \quad (۱۱-۷۴)$$

چون انرژی ذره ی فرودی متناسب با k است (این انرژی صرفاً جنبشی است: $E_i = \hbar^2 k^2 / 2\mu$)، از (۱۱-۷۴) نتیجه می گیریم که تقریب بورن به ازای انرژی های فرودی بزرگ و پتانسیل های پراکندگی ضعیف معتبر است. یعنی هنگامی که انرژی برهمکنش میانگین بین ذره ی فرودی و پتانسیل پراکندگی بسیار کوچک تر از انرژی جنبشی فرودی ذره باشد، می توان موج پراکنده شده را به صورت یک موج تخت در نظر گرفت.

مثال ۱۱-۲

(الف) سطح مقطع دیفرانسیلی در تقریب نخست بورن را برای پتانسیل کولنی $V(r) = Z_1 Z_2 e^2 / r$ در آن $Z_1 e$ و $Z_2 e$ به ترتیب بارهای ذره های پرتابه و هدف هستند، محاسبه کنید.

(ب) برای داشتن ایده ای کمی پیرامون سطح مقطع به دست آمده در قسمت (الف)، پراکندگی یک ذره ی آلفا (یعنی هسته ی هلیوم با $Z_1 = 2$ و $A_1 = 4$) از یک هسته ی طلا ($Z_2 = 79$ و $A_2 = 197$) را در نظر بگیرید. (۱) اگر زاویه ی پراکندگی ذره ی آلفا در چارچوب Lab برابر با $\theta_1 = 60^\circ$ باشد آنگاه زاویه ی پراکندگی θ در چارچوب CM را بیابید. (۲) اگر انرژی فرودی ذره ی آلفا برابر با 8 MeV باشد آنگاه تخمینی عددی برای سطح مقطع به دست آمده در قسمت (الف) بیابید.

حل

(الف) در مورد پتانسیل کولنی $V(r) = Z_1 Z_2 e^2 / r$ ، معادله‌ی (۷۰-۱۱) به صورت زیر در می‌آید:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4 Z_1^2 Z_2^2 e^4 \mu^2}{\hbar^4 q^2} \left| \int_0^\infty \sin(qr) dr \right|^2 \quad (۷۵-۱۱)$$

که در آن

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \sin(qr) dr &= \lim_{\lambda \rightarrow 0} \int_0^\infty e^{-\lambda r} \sin(qr) dr \\ &= \frac{1}{2i} \lim_{\lambda \rightarrow 0} \left[\int_0^\infty e^{-(\lambda - iq)r} dr - \int_0^\infty e^{-(\lambda + iq)r} dr \right] \\ &= \frac{1}{2i} \lim_{\lambda \rightarrow 0} \left[\frac{1}{\lambda - iq} - \frac{1}{\lambda + iq} \right] = \frac{1}{q} \end{aligned} \quad (۷۶-۱۱)$$

حال با توجه به این که $q = 2k \sin(\theta/2)$ است، وارد کردن (۷۶-۱۱) در (۷۵-۱۱) به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{2 Z_1 \mu Z_2 e^2}{\hbar^2 q^2} \right)^2 = \left(\frac{Z_1 Z_2 \mu e^2}{2 \hbar^2 k^2} \right)^2 \sin^{-4} \left(\frac{\theta}{2} \right) = \frac{Z_1^2 Z_2^2 e^4}{16 E^2} \sin^{-4} \left(\frac{\theta}{2} \right) \quad (۷۷-۱۱)$$

که در آن $E = \hbar^2 k^2 / 2\mu$ انرژی جنبشی ذره‌ی فرودی است. این رابطه به عنوان فرمول رادرفورد یا سطح مقطع کولنی شناخته می‌شود.

(ب) (۱) چون نسبت جرمی ذره‌ی آلفا به هسته‌ی طلا تقریباً برابر با نسبت جرم‌های اتمی آنها است ($m_1/m_2 = A_1/A_2 = \frac{4}{197} = 0.0203$) و با توجه به این که $\theta_1 = 60^\circ$ است، معادله‌ی (۱۴-۱۱) مقدار زاویه‌ی پراکندگی در چارچوب CM را نتیجه می‌دهد:

$$\tan 60^\circ = \frac{\sin \theta}{\cos \theta + 0.0203} \implies \theta = 61^\circ \quad (۷۸-۱۱)$$

(۲) می‌توان تخمین عددی سطح مقطع را با یازنویسی (۷۷-۱۱) برحسب ثابت ساختار ریز $\hbar c = 197.33 \text{ MeV fm}$ و $\alpha = e^2 / \hbar c = \frac{1}{137}$ آسان‌تر کرد:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z_1^2 Z_2^2}{16 E^2} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 (\hbar c)^2 \sin^{-4} \left(\frac{\theta}{2} \right) = \left(\frac{Z_1 Z_2 \alpha}{4} \right)^2 \left(\frac{\hbar c}{E} \right)^2 \sin^{-4} \left(\frac{\theta}{2} \right) \quad (۷۹-۱۱)$$

چون $Z_2 = 79$ ، $Z_1 = 2$ ، $\theta = 61^\circ$ ، $\alpha = \frac{1}{137}$ ، $\hbar c = 197.33 \text{ MeV fm}$ و $E = 8 \text{ MeV}$ است، داریم:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \left(\frac{2 \times 79}{4 \times 137} \right)^2 \left(\frac{197.33 \text{ MeV fm}}{8 \text{ MeV}} \right)^2 \sin^{-4}(30.5^\circ) \\ &= 30.87 \text{ fm}^2 = 0.31 \times 10^{-28} \text{ m}^2 = 0.31 \text{ barn} \end{aligned} \quad (۸۰-۱۱)$$

که در آن $1 \text{ barn} = 10^{-28} \text{ m}^2$ است.

۱۱-۴ تحلیل پاره موجی

تا اینجا تنها محاسبه‌ای تقریبی از سطح مقطع دیفرانسیلی را مدنظر قرار داده‌ایم، که در آن برهمکنش بین ذره‌ی پرتابه و پتانسیل پراکندگی $V(\mathbf{r})$ در مقایسه با انرژی ذره‌ی فرودی کوچک در نظر گرفته می‌شود. در این بخش قصد داریم تا سطح مقطع را بدون قرار دادن هیچگونه محدودیتی روی قدرت پتانسیل $V(\mathbf{r})$ محاسبه کنیم.

۱۱-۴-۱ تحلیل پاره موجی برای پراکندگی کشسان

در اینجا فرض می‌کنیم پتانسیل متقارن کروی باشد. بنابراین تکانه‌ی زاویه‌ای ذره‌ی فرودی پایسته خواهد بود و ذره‌ی پراکنده شده از یک پتانسیل مرکزی همان تکانه‌ی قبل از برخورد را پس از برخورد خواهد داشت. با فرض آن که موج تخت فرودی در جهت z باشد و از این رو $\phi_{inc}(\mathbf{r}) = \exp(ikr \cos \theta)$ می‌توانیم آن را برحسب برهنه‌ی ویژه حالت‌های تکانه‌ی زاویه‌ای که هر یک دارای تکانه‌ی زاویه‌ای معین l هستند، بیان کنیم (فصل ۶):

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (۱۱-۸۱)$$

آنگاه می‌توانیم بررسی کنیم که پس از پراکنده شدن ذره از پتانسیل، چگونه هر یک از پاره‌ها توسط $V(r)$ واپیچیده می‌شوند. عمومی‌ترین جواب معادله‌ی شرودینگر (۱۱-۳۰) عبارت است از

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{lm} C_{lm} R_{kl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (۱۱-۸۲)$$

چون $V(r)$ مرکزی است، سیستم حول محور z متقارن (ناوردای چرخشی) است. در این صورت تابع موج پراکنده شده نباید به زاویه‌ی سمتی φ بستگی داشته باشد از این رو $m = 0$ است. بنابراین چون $Y_{l0}(\theta, \varphi) \sim P_l(\cos \theta)$ است، تابع موج پراکنده شده‌ی (۱۱-۸۲) به صورت زیر در می‌آید:

$$\psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} a_l R_{kl}(r) P_l(\cos \theta) \quad (۱۱-۸۳)$$

که در آن $R_{kl}(r)$ از معادله‌ی شعاعی زیر پیروی می‌کند (فصل ۶):

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] (r R_{kl}(r)) = \frac{\gamma m}{\hbar^2} V(r) (r R_{kl}(r)) \quad (۱۱-۸۴)$$

هر جمله‌ی (۱۱-۸۳) (که به عنوان یک پاره موج شناخته می‌شود) یک ویژه‌تابع مشترک \hat{L}_z^2 و \hat{L}^2 است. جاگذاری (۱۱-۸۱) در (۱۱-۳۴) با $\varphi = 0$ رابطه‌ی زیر را به دست می‌دهد:

$$\psi(r, \theta) \simeq \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (۱۱-۸۵)$$

از یک سو، تابع موج پراکنده شده از (۱۱-۸۳) و از سوی دیگر، از (۱۱-۸۵) به دست می‌آید.

تقریباً در تمام آزمایش‌های پراکندگی، آشکارسازها در فاصله‌هایی بسیار بزرگ‌تر از اندازه‌ی خود هدف واقع شده‌اند بنابراین اندازه‌گیری‌های انجام شده توسط آشکارسازها به توابع موج پراکنده شده در مقدارهای بزرگ r مربوط می‌شوند. در ادامه قصد داریم نشان دهیم که با ایجاد ارتباط بین شکل‌های مجانبی (۸۳-۱۱) و (۸۵-۱۱) می‌توانیم دامنه‌ی پراکندگی و از این رو سطح مقطع دیفرانسیلی را تعیین کنیم. ابتدا با توجه به این که حد تابع بسل $j_l(kr)$ به‌ازای مقدارهای بزرگ r از

$$j_l(kr) \rightarrow \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} \quad (r \rightarrow \infty) \quad (۸۶-۱۱)$$

به‌دست می‌آید (فصل ۶)، شکل مجانبی (۸۵-۱۱) به‌صورت زیر است:

$$\psi(r, \theta) \rightarrow \sum_{l=0}^{\infty} i^l (\nu l + 1) P_l(\cos \theta) \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (۸۷-۱۱)$$

و چون $\sin(kr - l\pi/2) = [(-i)^l e^{ikr} - i^l e^{-ikr}] / 2i$ است (زیرا $e^{\pm il\pi/2} = (e^{\pm i\pi/2})^l$) می‌توانیم (۸۷-۱۱) را به‌صورت زیر بنویسیم:

$$\psi(r, \theta) \rightarrow -\frac{e^{-ikr}}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} i^{\nu l} (\nu l + 1) P_l(\cos \theta) + \frac{e^{ikr}}{r} \left[f(\theta) + \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (-i)^l (\nu l + 1) P_l(\cos \theta) \right] \quad (۸۸-۱۱)$$

دوم این که برای یافتن شکل مجانبی (۸۳-۱۱) ابتدا باید شکل مجانبی تابع شعاعی $R_{kl}(r)$ را تعیین کنیم. در مقدارهای بزرگ r ، پتانسیل پراکندگی به‌صورت مؤثری صفر است چراکه کوتاه‌برد است. در این حالت، (۸۴-۱۱) به‌صورت زیر در می‌آید:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 \right) (r R_{kl}(r)) = 0 \quad (۸۹-۱۱)$$

همانطور که در فصل ۶ دیده شد، جواب عمومی این معادله از ترکیب خطی تابع‌های نیومن و بسل کروی به‌دست می‌آید:

$$R_{kl}(r) = A_l j_l(kr) + B_l n_l(kr) \quad (۹۰-۱۱)$$

که در آن شکل مجانبی تابع نیومن به‌صورت زیر است:

$$n_k(kr) \rightarrow -\frac{\cos(kr - l\pi/2)}{kr} \quad (r \rightarrow \infty) \quad (۹۱-۱۱)$$

با وارد کردن (۱۱-۸۶) و (۱۱-۹۱) در (۱۱-۹۰)، شکل مجانبی تابع شعاعی را به دست می‌آوریم:

$$R_{kl}(r) \rightarrow A_l \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} - B_l \frac{\cos(kr - l\pi/2)}{kr} \quad (r \rightarrow \infty) \quad (۹۲-۱۱)$$

اگر به ازای تمام مقدارهای r ، $V(r) = 0$ باشد (ذره‌ی آزاد) آنگاه جواب (۱۱-۸۴) $(rR_{kl}(r))$ باید در $r = 0$ صفر شود. بنابراین $R_{kl}(r)$ باید در مبدا متناهی باشد. چون تابع نیومن در $r = 0$ واگرا می‌شود، جمله‌ی کسینوسی در (۱۱-۹۲) یک جواب قابل قبول فیزیکی را نمایش نمی‌دهد از این رو باید در نزدیکی مبدا کنار گذاشته شود. با بازنویسی (۱۱-۹۲) به شکل

$$R_{kl}(r) \rightarrow C_l \frac{\sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)}{kr} \quad (r \rightarrow \infty) \quad (۹۳-۱۱)$$

داریم: $A_l = C_l \cos \delta_l$ و $B_l = -C_l \sin \delta_l$ از این رو $C_l = \sqrt{A_l^2 + B_l^2}$

$$\tan \delta_l = -\frac{B_l}{A_l} \implies \delta_l = -\tan^{-1} \left(\frac{B_l}{A_l} \right) \quad (۹۴-۱۱)$$

است. می‌بینیم که با $\delta_l = 0$ ، تابع شعاعی $R_{kl}(r)$ (۱۱-۹۳) در $r = 0$ متناهی است زیرا (۱۱-۹۳) به $j_l(kr)$ کاهش می‌یابد. بنابراین δ_l یک زاویه‌ی حقیقی است که در غیاب پتانسیل پراکندگی (یعنی $V = 0$) و به ازای تمام مقدارهای l صفر می‌شود. δ_l جابه‌جایی فاز نامیده می‌شود و در مقدارهای بزرگ r ، میزان تفاوت بین $R_{kl}(r)$ و $j_l(kr)$ را اندازه‌گیری می‌کند (به یاد بیاورید هنگامی که پراکندگی وجود نداشته باشد، $j_l(kr)$ تابع شعاعی است). چون این «وایچس» (یا تفاوت بین $R_{kl}(r)$ و $j_l(kr)$) ناشی از پتانسیل $V(r)$ است، انتظار داریم سطح مقطع به δ_l بستگی داشته باشد. با استفاده از (۱۱-۹۳) می‌توانیم حد مجانبی (۱۱-۸۳) را به صورت زیر بنویسیم:

$$\psi(r, \theta) \rightarrow \sum_{l=0}^{\infty} a_l P_l(\cos \theta) \frac{\sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)}{kr} \quad (r \rightarrow \infty) \quad (۹۵-۱۱)$$

این تابع موج به عنوان موج تخت واپیچیده شناخته می‌شود، زیرا با داشتن جابه‌جایی‌های فاز δ_l با موج تخت تفاوت دارد. چون $\sin(kr - l\pi/2 + \delta_l) = [(-i)^l e^{ikr} e^{i\delta_l} - i^l e^{-ikr} e^{-i\delta_l}] / 2i$ می‌توانیم (۱۱-۹۵) را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$\psi(r, \theta) \rightarrow -\frac{e^{-ikr}}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} a_l i^l e^{-i\delta_l} P_l(\cos \theta) + \frac{e^{ikr}}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} a_l (-i)^l e^{i\delta_l} P_l(\cos \theta) \quad (۹۶-۱۱)$$

تا اینجا نشان دادیم که شکل‌های مجانبی (۱۱-۸۳) و (۱۱-۸۵) به ترتیب از (۱۱-۹۶) و (۱۱-۸۸) به دست می‌آیند. با مساوی قرار دادن ضریب‌های e^{-ikr}/r در (۱۱-۸۸) و (۱۱-۹۶)،

$$a_l = (2l+1) i^l e^{i\delta_l} \quad \text{و از این رو} \quad (۹۷-۱۱)$$

را به دست می آوریم. با جاگذاری (۹۷-۱۱) در (۹۶-۱۱) و در این مرحله با مساوی قرار دادن ضریب e^{ikr}/r در عبارت به دست آمده با همتای آن در (۸۸-۱۱) داریم:

$$f(\theta) + \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (-i)^l (2l+1) P_l(\cos \theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l (-i)^l e^{i\delta_l} P_l(\cos \theta) \quad (98-11)$$

که زمانی که با $e^{i\delta_l} \sin \delta_l = (e^{2i\delta_l} - 1)/2i$ و $i^l (-i)^l = 1$ ترکیب شود، به رابطه زیر می انجامد:

$$\begin{aligned} f(\theta) &= \sum_{l=0}^{\infty} f_l(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) (e^{2i\delta_l} - 1) \\ &= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta) \end{aligned} \quad (99-11)$$

که در آن $f_l(\theta)$ به عنوان دامنه ی پاره موج شناخته می شود.

از (۹۹-۱۱) می توانیم سطح مقطع های دیفرانسیلی و کل را به دست آوریم:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 &= \frac{1}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \\ &\quad \sin \delta_l \sin \delta_{l'} P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) \end{aligned} \quad (100-11)$$

$$\begin{aligned} \sigma &= \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \sin \theta d\theta \\ &= \frac{2\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \sin \delta_l \sin \delta_{l'} \\ &\quad \int_0^\pi P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) \sin \theta d\theta \end{aligned} \quad (101-11)$$

با استفاده از رابطه $\int_0^\pi P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) \sin \theta d\theta = [2/(2l+1)] \delta_{ll'}$ می توانیم (۱۰۱-۱۱) را به رابطه زیر کاهش دهیم:

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (102-11)$$

که در آن σ_l ها سطح مقطع های جزئی متناظر با پراکندگی ذره ها در حالت های مختلف تکانه ی زاویه ای نامیده می شوند. سطح مقطع دیفرانسیلی (۱۰۰-۱۱) از برهمه نهی جمله هایی با تکانه های زاویه ای متفاوت تشکیل شده است که باعث ایجاد طرح های تداخلی، بین پاره موج های متفاوت متناظر با مقدارهای مختلف l می شود. هنگامی که انتگرال روی θ گرفته شود، جمله های تداخلی حذف می شوند. توجه کنید هنگامی که در همه جا $V=0$

است، تمام جابه‌جایی‌های فاز δ_l صفر می‌شوند و از این‌رو همان‌طور که در معادله‌های (۱۱-۹۹) و (۱۱-۱۰۲) نشان داده شد، $f(\theta)$ و σ به صورت سری‌های نامتناهی روی تکانه‌ی زاویه‌ای l به دست می‌آیند. به یاد می‌آوریم که در حالت‌های عملی مهم به استثنای پتانسیل کولنی، این سری‌ها پس از چند جمله‌ی متناهی همگرا می‌شوند. باید یادآوری کنیم که در حالت پراکندگی بین ذره‌هایی که در حالت‌های s خود قرار دارند ($l = 0$)، دامنه‌ی پراکندگی (۱۱-۹۹) به صورت زیر در می‌آید:

$$f_0 = \frac{1}{k} e^{i\delta_0} \sin \delta_0. \quad (l = 0) \quad (11-103)$$

که در آن از $P_0(\cos \theta) = 1$ استفاده کرده‌ایم. چون f_0 به θ بستگی ندارد، سطح مقطع‌های دیفرانسیلی و کل از رابطه‌های ساده‌ی زیر به دست می‌آیند:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_0|^2 = \frac{1}{k^2} \sin^2 \delta_0, \quad \sigma = 4\pi |f_0|^2 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0. \quad (l = 0) \quad (11-104)$$

در اینجا مسأله‌ی مهم این واقعیت است که می‌توان سطح مقطع کل را به دامنه‌ی پراکندگی رو به جلوی $f(0)$ مربوط کرد. چون هنگامی که $\theta = 0$ است $P_l(\cos \theta) = P_l(1) = 1$ است و معادله‌ی (۱۱-۹۹) به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$f(0) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (\sin \delta_l \cos \delta_l + i \sin^2 \delta_l) \quad (11-105)$$

که هنگامی که با (۱۱-۱۰۲) ترکیب شود، ارتباط بین $f(0)$ و σ را نتیجه می‌دهد:

$$\frac{4\pi}{k} \text{Im} f(0) = \sigma = \frac{4\pi}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (11-106)$$

که به قضیه‌ی اپتیکی معروف است (این قضیه شبیه به یک قضیه‌ی مشابه در اپتیک است که به پراکندگی نور می‌پردازد). منشاء فیزیکی این قضیه در پایداری ذره‌ها (یا احتمال) است. باریکه‌ی پدید آمده (پس از پراکندگی) در امتداد جهت فرودی ($\theta = 0$) محتوی ذره‌های کمتری نسبت به باریکه‌ی فرودی است زیرا تعدادی از ذره‌ها در جهت‌های مختلفی پراکنده شده‌اند. این کاهش در تعداد ذره‌ها با سطح مقطع کل σ اندازه‌گیری می‌شود یعنی تعداد ذره‌های خارج شده از باریکه‌ی فرودی در امتداد جهت تابش متناسب با σ یا به‌طور معادل متناسب با قسمت موهومی $f(0)$ است. باید یادآوری کنیم که اگرچه (۱۱-۱۰۶) برای پراکندگی کشسان به دست آمد ولی همان‌طور که بعداً نشان داده خواهد شد، قضیه‌ی اپتیکی برای پراکندگی ناکشسان نیز معتبر است.

۱۱-۴-۲ تحلیل پاره موجی برای پراکندگی ناکشسان

می‌توان دامنه‌ی پراکندگی (۱۱-۹۹) را به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l(k) P_l(\cos \theta) \quad (11-107)$$

که در آن

$$f_l(k) = \frac{1}{k} e^{i\delta_l} \sin \delta_l = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_l} - 1) = \frac{1}{2ik} (S_l(k) - 1) \quad (108-11)$$

همراه با

$$S_l(k) = e^{2i\delta_l} \quad (109-11)$$

در حالتی که در آن اتلاف شار وجود ندارد، باید داشته باشیم: $|S_l(k)| = 1$. به هر حال، هرگاه جذب باریکه‌ی فرودی وجود داشته باشد آنگاه در حالت اتلاف شار، $S_l(k)$ به صورت زیر دوباره تعریف می‌شود:

$$S_l(k) = \eta_l(k) e^{2i\delta_l} \quad (110-11)$$

با $0 \leq \eta_l(k) \leq 1$. از این رو (۱۰۸-۱۱) و (۱۰۷-۱۱) به صورت زیر در می‌آیند:

$$f_l(k) = \frac{\eta_l e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} = \frac{1}{2k} [\eta_l \sin 2\delta_l + i(1 - \eta_l \cos 2\delta_l)] \quad (111-11)$$

$$f(\theta) = \frac{1}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [\eta_l \sin 2\delta_l + i(1 - \eta_l \cos 2\delta_l)] P_l(\cos \theta) \quad (112-11)$$

سطح مقطع کل پراکندگی کشسان از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\sigma_{el} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |f_l|^2 = \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) (1 + \eta_l^2 - 2\eta_l \cos 2\delta_l) \quad (113-11)$$

سطح مقطع کل پراکندگی ناکشسان که اتلاف شار را توصیف می‌کند، از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\sigma_{inel} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (1 - \eta_l^2(k)) \quad (114-11)$$

بنابراین اگر $\eta_l(k) = 1$ باشد آنگاه پراکندگی ناکشسان وجود ندارد ولی اگر $\eta_l = 0$ باشد در آن صورت جذب کلی داریم، هرچند که هنوز پراکندگی کشسان در این پاره موج وجود دارد. مجموع (۱۱۳-۱۱) و (۱۱۴-۱۱) سطح مقطع کل را به دست می‌دهد:

$$\sigma_{tot} = \sigma_{el} + \sigma_{inel} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (1 - \eta_l \cos 2\delta_l) \quad (115-11)$$

سپس با استفاده از (۱۰۷-۱۱) و (۱۱۱-۱۱) نتیجه‌ی زیر را می‌گیریم:

$$\text{Im}f(\circ) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \text{Im}f_l = \frac{1}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (1 - \eta_l \cos 2\delta_l) \quad (116-11)$$

مقایسه‌ی (۱۱۵-۱۱) و (۱۱۶-۱۱)، رابطه‌ی قضیه‌ی اپتیکی $\text{Im}f(\circ) = k\sigma_{tot}/4\pi$ را به دست می‌دهد. از این رو قضیه‌ی اپتیکی برای پراکندگی ناکشسان نیز معتبر است.

مثال ۱۱-۳ (پراکندگی پراثری از یک قرص سیاه)

در مورد پراکندگی از یک قرص سیاه در انرژی‌های زیاد بحث کنید.

حل

یک قرص سیاه، جذب‌کننده‌ی کامل است (یعنی $\eta_l(k) = 0$). با فرض آن که مقدارهای l از مقدار بیشینه‌ی l_{\max} فراتر نمی‌روند ($l \leq l_{\max}$) و k بزرگ است (پراکندگی پراثری)، داریم: $l_{\max} = ka$ که در آن a شعاع قرص است. چون $\eta_l = 0$ است، معادله‌های (۱۱-۱۱۳) و (۱۱-۱۱۴) به رابطه‌ی زیر می‌انجامند:

$$\sigma_{inel} = \sigma_{el} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) = \frac{\pi}{k^2} (ka+1)^2 \simeq \pi a^2 \quad (11-117)$$

ازاین‌رو سطح مقطع کل از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\sigma_{tot} = \sigma_{el} + \sigma_{inel} = 2\pi a^2 \quad (11-118)$$

از نظر کلاسیکی، سطح مقطع کل یک قرص برابر با πa^2 است. ضریب ۲ در (۱۱-۱۱۸) ناشی از اثرهای صرفاً کوانتومی است زیرا در حد انرژی زیاد، دو نوع پراکندگی وجود دارد: یکی متناظر با موج‌هایی که به قرص برخورد می‌کنند که در آن سطح مقطع برابر با سطح مقطع کلاسیکی πa^2 است و دیگری موج‌هایی که پراشیده می‌شوند. طبق اصل بابینه^۲، سطح مقطع موج‌های پراشیده شده توسط قرص نیز برابر با πa^2 است.

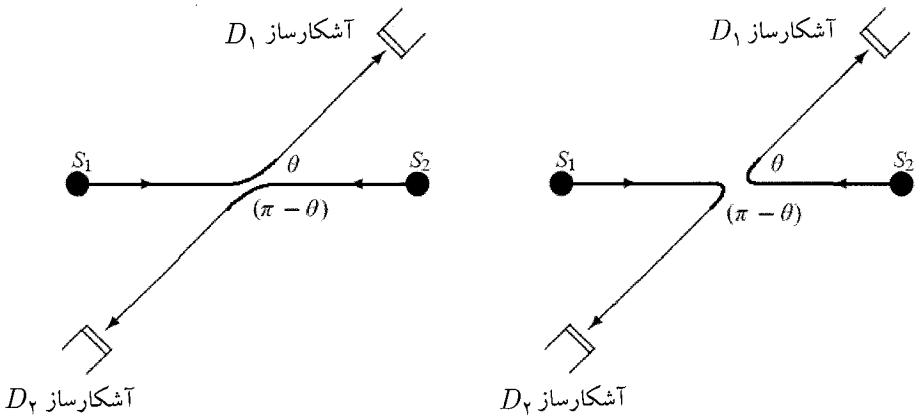
۱۱-۵ پراکندگی ذره‌های یکسان

ابتدا پراکندگی دو بوزون یکسان را در چارچوب مرکز جرم آنها بررسی می‌کنیم (در ادامه، پراکندگی دو فرمیون یکسان را نیز در نظر خواهیم گرفت). از نظر کلاسیکی، سطح مقطع پراکندگی دو ذره‌ی یکسان که پتانسیل برهمکنش آنها مرکزی است، از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\sigma_{cl}(\theta) = \sigma(\theta) + \sigma(\pi - \theta) \quad (11-119)$$

همانطور که در شکل ۱۱-۷ نشان داده شده است، در مکانیک کوانتومی راهی برای تمایز بین ذره‌ای که در زاویه‌ی θ پراکنده می‌شود و ذره‌ی دیگر که در $(\pi - \theta)$ پراکنده می‌شود، وجود ندارد. بنابراین تابع موج پراکنده شده باید متقارن باشد:

$$\psi_{sym}(\mathbf{r}) \rightarrow e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f_{sym}(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (11-120)$$



شکل ۷-۱۱ هنگامی که دو ذره‌ی یکسان در چارچوب مرکز جرم پراکنده می‌شوند، تمایز بین ذره‌ای که تحت زاویه‌ی θ پراکنده می‌شود از ذره‌ی دیگری که تحت زاویه‌ی $(\pi - \theta)$ پراکنده می‌شود، غیرممکن است.

و دامنه‌ی پراکندگی نیز باید متقارن باشد:

$$f_{\text{بوزون}}(\theta) = f(\theta) + f(\pi - \theta) \quad (۱۲۱-۱۱)$$

بنابراین سطح مقطع دیفرانسیلی برابر است با

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega}_{\text{بوزون}} &= |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 + f^*(\theta)f(\pi - \theta) + f(\theta)f^*(\pi - \theta) \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 + 2\text{Re}[f^*(\theta)f(\pi - \theta)] \end{aligned} \quad (۱۲۲-۱۱)$$

به وضوح، معادله‌ی (۱۲۲-۱۱) برخلاف همته‌ی کلاسیکی خود شامل جمله‌ی تداخلی $2\text{Re}[f^*(\theta)f(\pi - \theta)]$ است. توجه کنید هنگامی که $\theta = \pi/2$ است، داریم: $|f(\pi/2)|^2 = 4|f(\pi/2)|^2$ بوزون $(d\sigma/d\Omega)$ که دو بار بزرگ‌تر از عبارت کلاسیکی (که جمله‌ی تداخلی ندارد) است: $(d\sigma/d\Omega)_{cl} = 2|f(\pi/2)|^2$. اگر ذره‌ها تمایز پذیر باشند آنگاه سطح مقطع دیفرانسیلی چهار بار کوچک‌تر خواهد بود: $|f(\pi/2)|^2 = \text{تمایز پذیر } (d\sigma/d\Omega)$.
 حال پراکندگی دو ذره‌ی با اسپین $\frac{1}{2}$ ، به عنوان مثال پراکندگی الکترون-الکترون یا پروتون-پروتون را در نظر بگیرید. می‌دانیم که تابع موج سیستمی از دو ذره با اسپین $\frac{1}{2}$ متقارن یا پادمتقارن است. هنگامی که تابع موج فضایی متقارن است (یعنی دو ذره در حالت اسپینی تک‌تایی‌اند)، سطح مقطع دیفرانسیلی از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\frac{d\sigma_S}{d\Omega} = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 \quad (۱۲۳-۱۱)$$

ولی هنگامی که دو ذره در حالت اسپینی سه تایی قرار دارند، تابع موج فضایی پادمتقارن است و از این رو

$$\frac{d\sigma_A}{d\Omega} = |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 \quad (11-124)$$

اگر ذره های فرودی قطبیده نباشند آنگاه حالت های اسپینی مختلف یک اندازه محتمل خواهند بود. بنابراین حالت سه تایی سه بار محتمل تر از حالت یک تایی خواهد بود:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} \text{ فرمبون} &= \frac{3}{4} \frac{d\sigma_A}{d\Omega} + \frac{1}{4} \frac{d\sigma_S}{d\Omega} = \frac{3}{4} |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 + \frac{1}{4} |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 - \text{Re}[f^*(\theta)f(\pi - \theta)] \end{aligned} \quad (11-125)$$

هنگامی که $\theta = \pi/2$ است، داریم: $|f(\pi/2)|^2 = (d\sigma/d\Omega)_{\text{فرمبون}}$. این سطح مقطع دیفرانسیلی کوانتومی نصف عبارت کلاسیکی $(d\sigma/d\Omega)_{\text{cl}} = 2|f(\pi/2)|^2$ و چهار بار کوچک تر از عبارت متناظر با پراکندگی دو بوزون یکسان $(d\sigma/d\Omega)_{\text{بوزون}} = 4|f(\pi/2)|^2$ است.

باید یادآوری کنیم که در حالت تحلیل پاره موجی برای پراکندگی کشسان، با استفاده از رابطه های $\cos(\pi - \theta) = -\cos \theta$ و $P_l(\cos(\pi - \theta)) = P_l(-\cos \theta) = (-1)^l P_l(\cos \theta)$ و با وارد کردن آنها در (۱۱-۹۹)، می توانیم بنویسیم:

$$\begin{aligned} f(\pi - \theta) &= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos(\pi - \theta)) \\ &= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (-1)^l (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta) \end{aligned} \quad (11-126)$$

و از این رو

$$f(\theta) \pm f(\pi - \theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} [1 \pm (-1)^l] (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta) \quad (11-127)$$

مثال ۱۱-۴

سطح مقطع دیفرانسیلی مربوط به پراکندگی بین دو ذره ی یکسان دارای اسپین ۱ و جرم m که با پتانسیل $V(r) = V_0 e^{-ar}$ برهمکنش دارد را در تقریب نخست بوزن محاسبه کنید.

حل

همانطور که در فصل ۷ دیده شد، حالت های اسپینی دو ذره ی یکسان با اسپین ۱ $s_1 = s_2 = 1$ در مجموع از نه حالت تشکیل شده است: پنج تایی $|2, m\rangle$ (یعنی $|2, \pm 2\rangle$ ، $|2, \pm 1\rangle$ و $|2, 0\rangle$) و تک تایی $|0, 0\rangle$ که متقارن اند و سه تایی $|1, m\rangle$ (یعنی $|1, \pm 1\rangle$ و $|1, 0\rangle$) که تحت جایگشت ذره پادمتقارن اند. یعنی در حالی که شش حالت اسپینی متناظر با $S = 2$ و $S = 0$ متقارن اند، سه حالت $S = 1$ پادمتقارن هستند.

بنابراین اگر ذره‌های پراکنده شده قطبیده نباشند آنگاه سطح مقطع دیفرانسیلی برابر است با

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{5}{9} \frac{d\sigma_S}{d\Omega} + \frac{1}{9} \frac{d\sigma_S}{d\Omega} + \frac{3}{9} \frac{d\sigma_A}{d\Omega} = \frac{2}{3} \frac{d\sigma_S}{d\Omega} + \frac{1}{3} \frac{d\sigma_A}{d\Omega} \quad (۱۲۸-۱۱)$$

که در آن

$$\frac{d\sigma_S}{d\Omega} = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2, \quad \frac{d\sigma_A}{d\Omega} = |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 \quad (۱۲۹-۱۱)$$

در تقریب بورن، دامنه‌ی پراکندگی از (۶۹-۱۱) به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} f(\theta) &= -\frac{2V_0\mu}{\hbar^2 q} \int_0^\infty r e^{-ar} \sin(qr) dr \\ &= -\frac{V_0\mu}{i\hbar^2 q} \int_0^\infty r e^{-(a-iq)r} dr + \frac{V_0\mu}{i\hbar^2 q} \int_0^\infty r e^{-(a+iq)r} dr \\ &= \frac{V_0\mu}{\hbar^2 q} \frac{\partial}{\partial q} \int_0^\infty e^{-(a-iq)r} dr + \frac{V_0\mu}{\hbar^2 q} \frac{\partial}{\partial q} \int_0^\infty e^{-(a+iq)r} dr \\ &= \frac{V_0\mu}{\hbar^2 q} \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{1}{a-iq} \right) + \frac{V_0\mu}{\hbar^2 q} \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{1}{a+iq} \right) = \frac{V_0\mu}{\hbar^2 q} \left[\frac{i}{(a-iq)^2} + \frac{-i}{(a+iq)^2} \right] \\ &= -\frac{2V_0\mu a}{\hbar^2} \frac{1}{(a^2 + q^2)^2} = -\frac{2V_0\mu a}{\hbar^2} \frac{1}{(a^2 + 4k^2 \sin^2(\theta/2))^2} \quad (۱۳۰-۱۱) \end{aligned}$$

که در آن از $q = 2k \sin(\theta/2)$ با $\mu = m/2$ استفاده کرده‌ایم. چون $\sin[(\pi - \theta)/2] = \cos(\theta/2)$ است، داریم:

$$\frac{d\sigma_S}{d\Omega} = \frac{16V_0^2\mu^2 a^2}{\hbar^4} \left[\frac{1}{(a^2 + 4k^2 \sin^2(\theta/2))^2} + \frac{1}{(a^2 + 4k^2 \cos^2(\theta/2))^2} \right]^2 \quad (۱۳۱-۱۱)$$

$$\frac{d\sigma_A}{d\Omega} = \frac{16V_0^2\mu^2 a^2}{\hbar^4} \left[\frac{1}{(a^2 + 4k^2 \sin^2(\theta/2))^2} - \frac{1}{(a^2 + 4k^2 \cos^2(\theta/2))^2} \right]^2 \quad (۱۳۲-۱۱)$$

۶-۱۱ مسأله‌های حل‌شده

مسأله‌ی ۱۱-۱

(الف) سطح مقطع دیفرانسیلی مربوط به پتانسیل $V(r) = V_0 e^{-r/R}/r$ که به‌عنوان پتانسیل یوکاوا شناخته می‌شود را در تقریب نخست بورن محاسبه کنید.

(ب) سطح مقطع کل را محاسبه کنید.

(پ) رابطه‌ی بین R و V_0 را بیابید به طوری که تقریب بورن معتبر باشد.

حل

(الف) با وارد کردن $V(r) = V_0 e^{-r/R}/r$ در (۱۱-۷۰) به دست می‌آوریم:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4\mu^2 V_0^2}{\hbar^4 q^2} \left| \int_0^\infty e^{-r/R} \sin(qr) dr \right|^2 \quad (11-133)$$

که در آن

$$\begin{aligned} \int_0^\infty e^{-r/R} \sin(qr) dr &= \frac{1}{2i} \int_0^\infty e^{-(1/R-iq)r} dr - \frac{1}{2i} \int_0^\infty e^{-(1/R+iq)r} dr \\ &= \frac{1}{2i} \left[\frac{1}{1/R-iq} - \frac{1}{1/R+iq} \right] = \frac{q}{1/R^2 + q^2} \end{aligned} \quad (11-134)$$

ازاین‌رو

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4\mu^2 V_0^2}{\hbar^4} \frac{1}{(1/R^2 + q^2)^2} = \frac{4\mu^2 V_0^2}{\hbar^4} \frac{1}{[1/R^2 + 4k^2 \sin^2(\theta/2)]^2} \quad (11-135)$$

توجه کنید که می‌توان بین این رابطه و سطح مقطع دیفرانسیلی مربوط به پتانسیل کولنی $V(r) = Z_1 Z_2 e^2/r$ در (۱۱-۱۳۵) وارد کنیم و سپس حد آن در $R \rightarrow \infty$ را بگیریم. این کار به (۱۱-۷۷) می‌انجامد:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{رادرفورد}} = \lim_{R \rightarrow \infty} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{یوکاوا}} \quad (11-136)$$

(ب) یک‌بار به از (۱۱-۱۳۵) می‌توان سطح مقطع کل را به دست آورد:

$$\begin{aligned} \sigma &= \int \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin\theta d\theta d\varphi = 2\pi \int_0^\pi \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin\theta d\theta \\ &= 2\pi \frac{4\mu^2 V_0^2 R^2}{\hbar^4} \int_0^\pi \frac{\sin\theta d\theta}{(1 + 4k^2 R^2 \sin^2(\theta/2))^2} \end{aligned} \quad (11-137)$$

تغییر متغیر $\sin\theta d\theta = x dx / (k^2 R^2)$ به $x = 2kR \sin(\theta/2)$ می‌انجامد ازاین‌رو

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{4\pi\mu^2 V_0^2 R^2}{\hbar^4} \frac{1}{k^2 R^2} \int_0^{2kR} \frac{x dx}{(1+x^2)^2} = \frac{16\pi\mu^2 V_0^2 R^2}{\hbar^4} \frac{1}{1+4k^2 R^2} \\ &= \frac{16\pi\mu^2 V_0^2 R^2}{\hbar^4} \frac{1}{1+\lambda\mu ER^2/\hbar^2} \end{aligned} \quad (11-138)$$

که در آن از $k^2 = 2\mu E/\hbar^2$ استفاده کرده‌ایم و E انرژی ذره‌ی پراکنده شده است.

(پ) شرط اعتبار تقریب بورن به صورت زیر است:

$$\frac{\mu V_0}{\hbar^2 k^2} \left| \int_0^\infty \frac{e^{-ar}}{r} (e^{2ikr} - 1) dr \right| \ll 1 \quad (11-139)$$

که در آن $a = 1/R$ است. برای محاسبه‌ی انتگرال

$$I = \int_0^{\infty} \frac{e^{-ar}}{r} (e^{\imath ikr} - 1) dr \quad (140-11)$$

بباید از آن نسبت به پارامتر a مشتق بگیریم:

$$\frac{\partial I}{\partial a} = - \int_0^{\infty} e^{-ar} (e^{\imath ikr} - 1) dr = -\frac{1}{a - \imath ik} + \frac{1}{a} \quad (141-11)$$

حال با انتگرال‌گیری روی پارامتر a به طوری که $I(a = +\infty) = 0$ باشد، به دست می‌آوریم:

$$I = \ln a - \ln(a - \imath ik) = -\ln \left(1 - \imath \frac{k}{a} \right) = -\frac{1}{\imath} \ln \left(1 + \frac{\imath k^2}{a^2} \right) + i \tan^{-1} \left(\frac{\imath k}{a} \right) \quad (142-11)$$

بنابراین شرط اعتبار (۱۳۹-۱۱) به صورت زیر در می‌آید:

$$\frac{\mu V_0}{\hbar^2 k^2} \left[\frac{1}{4} \left[\ln(1 + \imath k^2 R^2) \right]^2 + \left(\tan^{-1}(\imath k R) \right)^2 \right]^{1/2} \ll 1 \quad (143-11)$$

مسأله‌ی ۲-۱۱

سطح مقطع‌های دیفرانسیلی و کل مربوط به پراکندگی ذره‌های آرام (با سرعت کم) از پتانسیل دلتای کروی $V(r) = V_0 \delta(r - a)$ را بیابید (می‌توانید از تحلیل پاره موج استفاده کنید). در مورد این موضوع که اگر پتانسیل پراکندگی وجود نداشته باشد چه اتفاقی می‌افتد، بحث کنید.

حل

در حالتی که در آن ذره‌های فرودی سرعت‌های کمی دارند، تنها موج‌های s ($l = 0$) در پراکندگی سهم دارند. بازای $l = 0$ ، سطح مقطع‌های دیفرانسیلی و کل از (۱۰۴-۱۱) به دست می‌آیند:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_0|^2 = \frac{1}{k^2} \sin^2 \delta_0, \quad \sigma = 4\pi |f_0|^2 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0. \quad (l = 0) \quad (144-11)$$

حال باید جابه‌جایی فاز δ_0 را بیابیم. برای این کار باید معادله‌ی شرودینگر مربوط به تابع شعاعی را در نظر بگیریم:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left[V_0 \delta(r - a) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] u(r) = E u(r) \quad (145-11)$$

که در آن $u(r) = rR(r)$ است. در مورد حالت‌های s و $r \neq a$ ، این معادله نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} = -k^2 u(r) \quad (146-11)$$

که در آن $k^2 = 2mE/\hbar^2$ است. جواب‌های قابل قبول این معادله باید در $r = 0$ صفر شوند و در $r \rightarrow \infty$ متناهی باشند:

$$u(r) = \begin{cases} u_1(r) = A \sin(kr) & 0 < r < a \\ u_2(r) = B \sin(kr + \delta_0) & r > a \end{cases} \quad (147-11)$$

پیوستگی $u(r)$ در $r = a$ ($u_2(a) = u_1(a)$) به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$B \sin(ka + \delta_0) = A \sin(ka) \quad (148-11)$$

از سوی دیگر، با انتگرال‌گیری از (۱۴۵-۱۱) (با $l = 0$) از $r = a - \varepsilon$ تا $r = a + \varepsilon$ به دست می‌آوریم:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} dr + V_0 \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \delta(r-a) u(r) dr = E \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} u(r) dr \quad (149-11)$$

و با گرفتن حد $\varepsilon \rightarrow 0$ به نتیجه‌ی زیر می‌رسیم:

$$\left. \frac{du_2(r)}{dr} \right|_{r=a} - \left. \frac{du_1(r)}{dr} \right|_{r=a} - \frac{2mV_0}{\hbar^2} u_2(a) = 0 \quad (150-11)$$

وارد کردن $u_1(r)$ و $u_2(r)$ از (۱۴۷-۱۱) در (۱۵۰-۱۱) به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$B \left[k \cos(ka + \delta_0) - \frac{2mV_0}{\hbar^2} \sin(ka + \delta_0) \right] = Ak \cos(ka) \quad (151-11)$$

با تقسیم کردن (۱۵۱-۱۱) بر (۱۴۸-۱۱)، به دست می‌آوریم:

$$k \cot(ka + \delta_0) - \frac{2mV_0}{\hbar^2} = k \cot(ka) \implies \tan(ka + \delta_0) = \left[\frac{1}{\tan(ka)} + \frac{2mV_0}{k\hbar^2} \right]^{-1} \quad (152-11)$$

این معادله نشان می‌دهد هنگامی که پتانسیل پراکنندگی وجود ندارد ($V_0 = 0$)، جابه‌جایی فاز صفر است زیرا $\tan(ka + \delta_0) = \tan(ka)$ است. در این حالت، معادله‌های (۱۰۳-۱۱) و (۱۰۴-۱۱) بیان می‌کنند که دامنه‌ی پراکنندگی و سطح مقطع پراکنندگی همگی صفر می‌شوند.

اگر ذره‌های فرودی سرعت‌های اندکی داشته باشند ($ka \ll 1$) آنگاه داریم: $\tan(ka) \simeq ka$ و $\tan(ka + \delta_0) \simeq \tan(\delta_0)$. در این حالت، معادله‌ی (۱۵۲-۱۱) نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\tan \delta_0 \simeq \frac{ka}{1 + 2mV_0 a/\hbar^2} \implies \sin^2 \delta_0 \simeq \frac{k^2 a^2}{k^2 a^2 + (1 + 2mV_0 a/\hbar^2)^2} \quad (153-11)$$

با وارد کردن این رابطه در (۱۴۴-۱۱)، رابطه‌های زیر را به دست می‌آوریم:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \simeq \frac{a^2}{k^2 a^2 + (1 + 2mV_0 a/\hbar^2)^2}, \quad \sigma_0 \simeq \frac{4\pi a^2}{k^2 a^2 + (1 + 2mV_0 a/\hbar^2)^2} \quad (154-11)$$

مسأله‌ی ۳-۱۱

پراکندگی ذره‌ای به جرم m از پتانسیل کروی سخت $V(r) = \infty$ به‌ازای $r < a$ و $V(r) = 0$ به‌ازای $r > a$ را در نظر بگیرید.

(الف) سطح مقطع کل را در حد انرژی پایین محاسبه کنید. در حالت پراکندگی پروتون‌های 5 keV از یک ذره‌ی سخت به شعاع $a = 6 \text{ fm}$ ، تخمینی عددی برای سطح مقطع بیابید.

(ب) سطح مقطع کل در حد انرژی بالا را محاسبه کنید. در حالت پراکندگی پروتون‌های 70 MeV با $a = 6 \text{ fm}$ ، تخمینی عددی برای سطح مقطع بیابید.

حل

(الف) چون در پراکندگی در انرژی‌های پایین، موج‌های s ($l = 0$) غالبند، معادله‌ی شرودینگر شعاعی برابر است با

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} = E u(r) \quad (r > a) \quad (155-11)$$

که در آن $u(r) = rR(r)$ است. جواب‌های این معادله عبارتند از

$$u(r) = \begin{cases} u_1(r) = 0 & r < a \\ u_2(r) = A \sin(kr + \delta_0) & r > a \end{cases} \quad (156-11)$$

که در آن $k^2 = 2mE/\hbar^2$ است. پیوستگی $u(r)$ در $r = a$ به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\sin(ka + \delta_0) = 0 \quad \Rightarrow \quad \tan \delta_0 = -\tan(ka) \quad \Rightarrow \quad \sin^2 \delta_0 = \sin^2(ka) \quad (157-11)$$

زیرا $\sin^2 \alpha = 1/(1 + \cot^2 \alpha)$ ، کمترین مقدار جابه‌جایی فاز برابر است با $\delta_0 = -ka$ و مقدار آن منفی است که برای یک پتانسیل دافعه باید اینگونه باشد. وارد کردن $\sin^2 \delta_0 = \sin^2(ka)$ در (۱۰۴-۱۱) نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2(ka) \quad (158-11)$$

به‌ازای انرژی‌های پایین ($ka \ll 1$)، داریم: $\sin(ka) \simeq ka$ و از این رو $\sigma_0 \simeq 4\pi a^2$ است که چهار برابر مقدار کلاسیکی πa^2 است.

برای به‌دست آوردن تخمینی عددی (۱۵۸-۱۱)، ابتدا باید k^2 را محاسبه کنیم. برای این کار، تنها باید از رابطه‌ی $E = \hbar^2 k^2 / (2m_p) = 5 \text{ keV}$ استفاده کنیم زیرا قبل از پراکندگی، پروتون به‌صورت یک ذره‌ی

آزاد حرکت می‌کند. با استفاده از $m_p c^2 = 938,27 \text{ MeV}$ و $\hbar c = 197,33 \text{ MeV fm}$ داریم:

$$k^2 = \frac{2m_p E}{\hbar^2} = \frac{2(m_p c^2)E}{(\hbar c)^2} = \frac{2(939,57 \text{ MeV})(5 \times 10^{-3} \text{ MeV})}{(197,33 \text{ MeV fm})^2} \\ = 0,24 \times 10^{-2} \text{ fm}^{-2} \quad (11-159)$$

بنابراین $k = 0,155 \text{ fm}^{-1}$ است و جابه‌جایی موج از $5,33^\circ$ به $0,93 \text{ rad}$ بدست می‌آید. با وارد کردن این مقادارها در (11-158)، بدست می‌آوریم:

$$\sigma = \frac{4\pi}{0,24 \times 10^{-2} \text{ fm}^{-2}} \sin^2(5,33) = 449,89 \text{ fm}^2 = 4,5 \text{ barn} \quad (11-160)$$

(ب) در حد انرژی بالا ($ka \gg 1$) تعداد پاره‌موج‌های سهم در پراکندگی بزرگ است. با فرض آن که $l_{\max} \simeq ka$ است، می‌توانیم (11-102) را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_{\max}} (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (11-161)$$

چون مقادیر بسیار زیادی از l در این رابطه سهم دارند، می‌توانیم δ_l \sin^2 را با مقدار میانگین آن ($\frac{1}{2}$) جایگزین کنیم از این رو

$$\sigma \simeq \frac{4\pi}{k^2} \frac{1}{2} \sum_{l=0}^{l_{\max}} (2l+1) = \frac{2\pi}{k^2} (l_{\max} + 1)^2 \quad (11-162)$$

که در آن از $\sum_{l=0}^n (2l+1) = (n+1)^2$ استفاده کرده‌ایم. چون $l_{\max} \gg 1$ است، داریم:

$$\sigma \simeq \frac{2\pi}{k^2} l_{\max}^2 = \frac{2\pi}{k^2} (ka)^2 = 2\pi a^2 \quad (11-163)$$

چون $a = 6 \text{ fm}$ است، داریم: $\sigma \simeq 2\pi(6 \text{ fm})^2 = 226,19 \text{ fm}^2 = 2,26 \text{ barn}$. این رابطه تقریباً نصف مقدار بدست آمده در (11-160) است.

در پایان، در پراکندگی انرژی پایین، سطح مقطع حاصل از پتانسیل کروی سخت: (الف) چهار برابر مقدار کلاسیکی (πa^2) و (ب) در پراکندگی انرژی بالا، دو برابر مقدار کلاسیکی آن است.

مسأله‌ی ۱۱-۴

سطح مقطع مربوط به پراکندگی کم انرژی ذره‌ای به جرم m از چاه پتانسیل جاذبه‌ی مربعی $V(r) = -V_0$ به‌ازای $r < a$ و $V(r) = 0$ به‌ازای $r > a$ با $V_0 > 0$ را محاسبه کنید.

حل

چون در پراکندگی انرژی‌های پایین، پاره‌موج‌های s ($l = 0$) غالبند، معادله‌ی شرودینگر مربوط به تابع شعاعی از معادله‌های زیر به دست می‌آید:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} - V_0 u(r) = E u(r) \quad (r < a) \quad (11-164)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} = E u(r) \quad (r > a) \quad (11-165)$$

که در آن $u(r) = rR(r)$ است. جواب‌های این معادله‌ها برای حالت‌های انرژی مثبت عبارتند از

$$u(r) = \begin{cases} u_1(r) = A \sin(k_1 r) & r < a \\ u_2(r) = B \sin(k_2 r + \delta_0) & r > a \end{cases} \quad (11-166)$$

که در آن $k_1^2 = 2m(E + V_0)/\hbar^2$ و $k_2^2 = 2mE/\hbar^2$ است. پیوستگی $u(r)$ و مشتق نخست آن در $r = a$ نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\left. \frac{u_2(r)}{u_2'(r)} \right|_{r=a} = \left. \frac{u_1(r)}{u_1'(r)} \right|_{r=a} \implies \frac{1}{k_2} \tan(k_2 a + \delta_0) = \frac{1}{k_1} \tan(k_1 a) \quad (11-167)$$

و هم‌چنین

$$\delta_0 = -k_2 a + \tan^{-1} \left[\frac{k_2}{k_1} \tan(k_1 a) \right] \quad (11-168)$$

از طرفی چون

$$\tan(k_2 a + \delta_0) = \frac{\sin(k_2 a) \cos(\delta_0) + \cos(k_2 a) \sin \delta_0}{\cos(k_2 a) \cos \delta_0 - \sin(k_2 a) \sin \delta_0} = \frac{\tan(k_2 a) + \tan \delta_0}{1 - \tan(k_2 a) \tan \delta_0} \quad (11-169)$$

می‌توانیم معادله‌ی (۱۱-۱۶۷) را به رابطه‌ی زیر کاهش دهیم:

$$\tan \delta_0 = \frac{k_2 \tan(k_1 a) - k_1 \tan(k_2 a)}{k_1 + k_2 \tan(k_1 a) \tan(k_2 a)} \quad (11-170)$$

با استفاده از رابطه‌ی $\sin^2 \delta_0 = 1/(1 + 1/\tan^2 \delta_0)$ می‌توانیم بنویسیم:

$$\sin^2 \delta_0 = \left[1 + \left(\frac{k_1 + k_2 \tan(k_1 a) \tan(k_2 a)}{k_2 \tan(k_1 a) - k_1 \tan(k_2 a)} \right)^2 \right]^{-1} \quad (11-171)$$

که هنگامی که در (۱۱-۱۰۴) وارد شود، به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\sigma_0 = \frac{4\pi}{k_1^2} \sin^2 \delta_0 = \frac{4\pi}{k_1^2} \left[1 + \left(\frac{k_1 + k_2 \tan(k_1 a) \tan(k_2 a)}{k_2 \tan(k_1 a) - k_1 \tan(k_2 a)} \right)^2 \right]^{-1} \quad (11-172)$$

اگر $k_2 a \ll 1$ باشد آنگاه (۱۱-۱۷) به صورت $\frac{\tan(k_1 a) - k_1 a}{k_1/k_2 + k_2 a \tan(k_1 a)} \simeq \tan \delta$ در می آید زیرا $\tan(k_2 a) \simeq k_2 a$ است. بنابراین اگر $k_2 a \ll 1$ و E (انرژی پراکندگی) به صورتی باشد که $\tan(k_1 a) \simeq k_1 a$ است آنگاه داریم: $\tan \delta = 0$. از این رو پراکندگی موج s وجود نخواهد داشت و سطح مقطع صفر می شود. توجه کنید که اگر پتانسیل چاه مربعی به پتانسیل کروی سخت گسترش یابد (یعنی $E \rightarrow 0$ و $V_0 \rightarrow \infty$) آنگاه معادله (۱۱-۱۶) جابه جایی فاز پراکندگی از کروی سخت $\delta = -ka$ را نتیجه می دهد زیرا $\tan(k_1 a) \rightarrow 0$ (میل می کند).

مسأله ۱۱-۵

سطح مقطع های دیفرانسیلی و کل مربوط به پراکندگی کشسان ذره ای به جرم m که در ابتدا در امتداد محور z حرکت می کند و از پتانسیل غیرکروی با تابع دلتای دوگانه $V(\mathbf{r}) = V_0 \delta(\mathbf{r} - a\mathbf{k}) + V_0 \delta(\mathbf{r} + a\mathbf{k})$ پراکنده می شود و در آن \mathbf{k} بردار یک در امتداد محور z است را در تقریب نخست بزن باید.

حل

چون $V(\mathbf{r})$ متقارن کروی نیست، می توان سطح مقطع دیفرانسیلی را از (۱۱-۶۶) به دست آورد:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^2} \left| \int V_0 [\delta(\mathbf{r} - a\mathbf{k}) + \delta(\mathbf{r} + a\mathbf{k})] e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^3r \right|^2 = \frac{m^2 V_0}{4\pi^2 \hbar^2} |I|^2 \quad (11-173)$$

چون $\delta(\mathbf{r} \pm a\mathbf{k}) = \delta(x)\delta(y)\delta(z \pm a)$ است، می توانیم انتگرال I را به صورت زیر بنویسیم:

$$I = \int \delta(x) e^{ixq_x} dx \int \delta(y) e^{iyq_y} dy \int [\delta(z - a) + \delta(z + a)] e^{izq_z} dz \quad (11-174)$$

$$= e^{iaq_z} + e^{-iaq_z} = 2 \cos(aq_z)$$

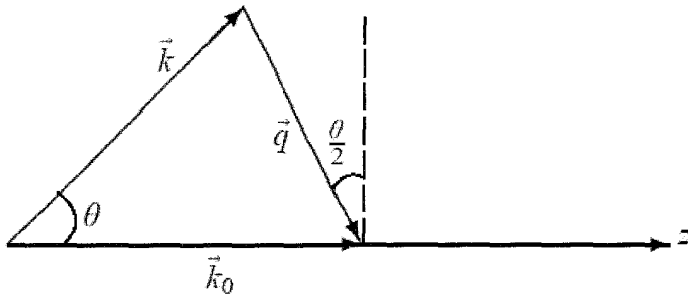
محاسبه q_z تا حدی متفاوت از آنچه که در (۱۱-۶۷) نشان داده شد، است. چون ذره ی فرودی در ابتدا در امتداد محور z است و چون به صورت کشسان از پتانسیل $V(\mathbf{r})$ پراکنده می شود، مقدار تکانه های آن قبل و بعد از برخورد برابرند. بنابراین همانطور که در شکل ۱۱-۸ نشان داده شده است، داریم: $q_z = q \sin(\theta/2) = 2k \sin^2(\theta/2)$ زیرا $q_z = q \sin(\theta/2) = 2k \sin^2(\theta/2)$ است. بنابراین با وارد کردن $I = 2 \cos(aq_z) = 2 \cos[2ak \sin^2(\theta/2)]$ در (۱۱-۱۷۳)، به دست می آوریم:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2 V_0}{\pi^2 \hbar^2} \cos^2 \left(2ak \sin^2 \frac{\theta}{2} \right) \quad (11-175)$$

یک باره می توان سطح مقطع کل را از (۱۱-۱۷۵) به دست آورد:

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin \theta d\theta d\varphi = 2\pi \int_0^\pi \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin \theta d\theta \quad (11-176)$$

$$= 2\pi \frac{m^2 V_0}{\pi^2 \hbar^2} \int_0^\pi \sin \theta \cos^2 \left(2ak \sin^2 \frac{\theta}{2} \right) d\theta$$



شکل ۸-۱۱ ذره‌ای که در ابتدا در امتداد محور z حرکت می‌کند (در اینجا محور افقی)، تحت زاویه‌ی θ با $q_z = q \sin(\theta/2)$ و $k_0 = k$ زیرا $q = |k_0 - k| = 2k \sin(\theta/2)$ پراکنده می‌شود.

که هنگامی که از تغییر متغیر $x = 2ak \sin^2(\theta/2)$ با $dx = 2ak \sin(\theta/2) \cos(\theta/2) d\theta$ استفاده شود، به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{2m^2 V_0}{\pi \hbar^4} \int_0^\pi 2 \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos^2\left(2ak \sin^2\frac{\theta}{2}\right) d\theta \\ &= \frac{2m^2 V_0}{\pi ak \hbar^4} \int_0^1 \cos^2(x) dx \\ &= \frac{m^2 V_0}{\pi ak \hbar^4} \int_0^1 [1 + \cos(2x)] dx \\ &= \frac{m^2 V_0}{\pi ak \hbar^4} \end{aligned} \quad (11-177)$$

مسأله‌ی ۶-۱۱

پراکندگی کشسان نوترون‌های 5 MeV از یک هسته را در نظر بگیرید. جابه‌جایی‌های فاز اندازه‌گیری شده در این آزمایش عبارتند از $95^\circ = \delta_0, 72^\circ = \delta_1, 60^\circ = \delta_2, 35^\circ = \delta_3, 18^\circ = \delta_4, 5^\circ = \delta_5$ و تمام جابه‌جایی‌های دیگر قابل چشم‌پوشی‌اند (یعنی به‌ازای $l \geq 6, \delta_l \approx 0$ است).

(الف) سطح مقطع کل را بیابید.

(ب) شعاع هسته را تخمین بزنید.

حل

(الف) چون به‌ازای $l \geq 6, \delta_l \approx 0$ است، معادله‌ی (۱۱-۲۱) نتیجه‌ی زیر را می‌دهد:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^6 (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{4\pi}{k^2} \left(\sin^2 \delta_0 + 3 \sin^2 \delta_1 + 5 \sin^2 \delta_2 + 7 \sin^2 \delta_3 + 9 \sin^2 \delta_4 + 11 \sin^2 \delta_5 \right) \\
 &= \frac{4\pi}{k^2} \times 10,702 \quad (178-11)
 \end{aligned}$$

برای محاسبه‌ی k^2 تنها باید از رابطه‌ی $E = \hbar^2 k^2 / (2m_n) = 50 \text{ MeV}$ استفاده کنیم زیرا نوترون‌ها قبل از پراکندگی به صورت ذره‌های آزاد حرکت می‌کنند. با استفاده از $m_n c^2 = 939,57 \text{ MeV}$ و $\hbar c = 197,33 \text{ MeV fm}$ داریم:

$$k^2 = \frac{2m_n E}{\hbar^2} = \frac{2(m_n c^2) E}{(\hbar c)^2} = \frac{2(939,57 \text{ MeV})(50 \text{ MeV})}{(197,33 \text{ MeV fm})^2} = 2,41 \text{ fm}^{-2} \quad (179-11)$$

وارد کردن (179-11) در (178-11) به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\sigma = \frac{4\pi}{2,41 \text{ fm}^{-2}} \times 10,702 = 55,78 \text{ fm}^2 = 0,558 \text{ barn} \quad (180-11)$$

(ب) در مقدارهای بزرگ l ، هنگامی که نوترون در نزدیک‌ترین فاصله نسبت به هسته قرار دارد، اساساً اثر پتانسیل گریز از مرکز $l(l+1)\hbar^2 / (2m_n r_c^2)$ را احساس می‌کند و اثر پتانسیل هسته قابل چشم‌پوشی است. بنابراین می‌توانیم از تقریب‌های $E \simeq l(l+1)\hbar^2 / (2m_n r_c^2) \simeq 42\hbar^2 / (2m_n r_c^2)$ استفاده کنیم که در آن $l \simeq 6$ را در نظر گرفته‌ایم زیرا به ازای $l \geq 6$ ، $\delta_l \simeq 0$ است. آنگاه مقدار تقریبی شعاع هسته از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$r_c \simeq \sqrt{\frac{21\hbar^2}{m_n E}} = \sqrt{\frac{21(\hbar c)^2}{(m_n c^2) E}} = \sqrt{\frac{21(197,33 \text{ MeV fm})^2}{(939,57 \text{ MeV})(50 \text{ MeV})}} = 4,17 \text{ fm} \quad (181-11)$$

مسأله‌ی ۷-۱۱

پراکندگی کشسان یک الکترون از اتم هیدروژن که در حالت پایه‌ی خود قرار دارد را در نظر بگیرید. اگر فرض شود که پس از پراکندگی اتم در حالت پایه‌ی خود باقی بماند آنگاه در حالتی که در آن اثرهای حاصل از طبیعت یکسان الکترون‌ها (الف) چشم‌پوشی شود و (ب) به حساب آورده شود آنگاه سطح مقطع دیفرانسیلی را محاسبه کنید (در قسمت (ب)، در مورد سه حالت که در آن الکترون‌ها (۱) در حالت تک‌تایی اسپینی، (۲) در حالت سه‌تایی اسپینی یا (۳) در حالت غیرقطبیده‌اند، بحث کنید).

حل

(الف) در تشابه با (۶۳-۱۱)، می‌توانیم سطح مقطع دیفرانسیلی مربوط به این فرآیند را به صورت زیر بنویسیم:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \left| -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \langle \Psi_f | \hat{V} | \Psi_i \rangle \right|^2 \quad (182-11)$$

که در آن $\mu \simeq m_e/2$ است زیرا می‌توان این مسأله را به صورت پراکندگی ذره‌ای که جرم کاهش یافته‌ی آن نصف جرم الکترون است، در نظر گرفت. با فرض آن که اتم بسیار سنگین است و پس از پراکندگی در حالت پایه‌ی خود باقی می‌ماند، حالت‌های اولیه و نهایی سیستم (الکترون فرودی به اضافه‌ی اتم) از $e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} \psi_0(\mathbf{r}') = e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} \psi_0(\mathbf{r}')$ و $\Psi_f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, \mathbf{r}') = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \psi_0(\mathbf{r}')$ به دست می‌آید که در آنها $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ و $e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}}$ حالت‌های الکترون فرودی قبل و بعد از پراکندگی است و $\psi_0(\mathbf{r}') = (\pi a_0^3)^{-1/2} e^{-r'/a_0}$ تابع موج اتم است. در اینجا فرض کرده‌ایم که هسته در مبداء قرار دارد و بردارهای مکان الکترون فرودی و الکترون اتم به ترتیب از \mathbf{r} و \mathbf{r}' به دست می‌آیند. چون الکترون فرودی برهمکنش جاذبه‌ی کولنی $-e^2/r$ با هسته و برهمکنش دافعه‌ی $e^2/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ با الکترون هیدروژن را تجربه می‌کند، داریم:

$$f(\theta) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3r e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \int d^3r' \psi_0^*(\mathbf{r}') \left[-\frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right] \psi_0(\mathbf{r}') \quad (113-11)$$

با $q = |\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}| = 2k \sin(\theta/2)$ زیرا $k = k_0$ (پراکندگی کشسان) است. با استفاده از $\int_0^\pi e^{iqr \cos \theta} \sin \theta d\theta = 1/q$ (۱۱۱-۷۶) را ببینید) و با توجه به این که داریم؛ $\int_{-\infty}^\infty \sin(qr) dr = 1/q$ $\int_{-\infty}^\infty e^{iqr} dx = (2/q) \sin(qr)$ رابطه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$\int d^3r \frac{e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}}{r} = \int_0^\infty r dr \int_0^\pi e^{iqr \cos \theta} \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = \frac{4\pi}{q} \int_0^\infty dr \sin(qr) = \frac{4\pi}{q^2} \quad (114-11)$$

که هنگامی که در (۱۱۱-۱۱۳) وارد شود و با توجه به این که $\int d^3r' \psi_0^*(\mathbf{r}') \psi_0(\mathbf{r}') = 1$ است، به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$f(\theta) = \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \left[\frac{4\pi e^2}{q^2} - \int d^3r e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \int d^3r' \psi_0^*(\mathbf{r}') \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \psi_0(\mathbf{r}') \right] \quad (115-11)$$

در تشابه با (۱۱۴-۱۱۱)، داریم: $\int d^3r e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = 4\pi/q^2$ از این رو می‌توانیم انتگرال در (۱۱۵-۱۱۱) را به

$$\begin{aligned} \int d^3r e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \int d^3r' \psi_0^*(\mathbf{r}') \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \psi_0(\mathbf{r}') &= e^2 \int d^3r' \psi_0^*(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}'} \psi_0(\mathbf{r}') \int d^3r \frac{e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \\ &= \frac{4\pi e^2}{q^2} \int d^3r' \psi_0^*(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}'} \psi_0(\mathbf{r}') \quad (116-11) \end{aligned}$$

کاهش دهیم. می‌توان انتگرال باقیمانده‌ی (۱۱۶-۱۱۱) را به نوبه‌ی خود به صورت زیر نوشت:

$$\begin{aligned} \int d^3r' \psi_0^*(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}'} \psi_0(\mathbf{r}') &= \frac{1}{\pi a_0^3} \int_0^\infty r'^2 e^{-2r'/a_0} dr' \int_0^\pi e^{iqr' \cos \theta'} \sin \theta' d\theta' \int_0^{2\pi} d\varphi' \\ &= \frac{4}{q a_0^3} \int_0^\infty r' e^{-2r'/a_0} \sin(qr') dr' = \left(1 + \frac{a_0^2 q^2}{4} \right)^{-2} \quad (117-11) \end{aligned}$$

که در آن از عبارت مربوط به $\int_0^\infty r e^{-ar} \sin(qr) dr$ محاسبه شده در (۱۱-۱۳۰) استفاده کرده‌ایم. با وارد کردن (۱۱-۱۸۷) در (۱۱-۱۸۶) و قرار دادن عبارت حاصل در (۱۱-۱۸۵)، رابطه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$f(\theta) = \frac{2\mu e^2}{\hbar^2 q^2} \left[1 - \left(1 + \frac{a_0^2 q^2}{4} \right)^{-2} \right] = \frac{\mu e^2}{2k^2 \hbar^2 \sin^2(\theta/2)} \left[1 - \left(1 + a_0^2 k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \right)^{-2} \right] \quad (11-188)$$

بنابراین می‌توانیم (۱۱-۱۸۲) را به رابطه‌ی زیر کاهش دهیم:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4\mu^2 e^4}{\hbar^4 q^4} \left[1 - \left(1 + \frac{a_0^2 q^2}{4} \right)^{-2} \right]^2 = \frac{\mu^2 e^4}{4k^4 \hbar^4 \sin^4 \frac{\theta}{2}} \left[1 - \left(1 + a_0^2 k^2 \sin^2(\theta/2) \right)^{-2} \right]^2 \quad (11-189)$$

با $q = 2k \sin(\theta/2)$

(ب) (۱) اگر الکترون‌ها در حالت تک‌تابی اسپینی خود باشند (پادمتقارن) آنگاه تابع موج فضایی باید متقارن باشد ازاین‌رو سطح مقطع دیفرانسیلی برابر است با

$$\frac{d\sigma_S}{d\Omega} = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 \quad (11-190)$$

که در آن $f(\theta)$ از (۱۱-۱۸۸) به دست می‌آید و

$$\begin{aligned} f(\pi - \theta) &= \frac{2\mu e^2}{\hbar^2 q^2} \left[1 - \left(1 + \frac{a_0^2 q^2}{4} \right)^{-2} \right] \\ &= \frac{\mu e^2}{2k^2 \hbar^2 \cos^2 \frac{\theta}{2}} \left[1 - \left(1 + a_0^2 k^2 \cos^2(\theta/2) \right)^{-2} \right] \end{aligned} \quad (11-191)$$

زیرا $\sin(\pi - \theta/2) = \cos(\theta/2)$ است.

(۲) اگر الکترون‌ها در حالت سه‌تابی اسپینی خود باشند آنگاه تابع موج فضایی باید پادمتقارن باشد

ازاین‌رو

$$\frac{d\sigma_A}{d\Omega} = |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 \quad (11-192)$$

(۳) سرانجام، اگر الکترون‌ها غیرقطبیده باشند آنگاه سطح مقطع دیفرانسیلی باید آمیزه‌ای از (۱۱-۱۹۱)

و (۱۱-۱۹۲) باشد:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4} \frac{d\sigma_S}{d\Omega} + \frac{3}{4} \frac{d\sigma_A}{d\Omega} = \frac{1}{4} |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 + \frac{3}{4} |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 \quad (11-193)$$

مسأله‌ی ۸-۱۱

در یک آزمایش، پيون‌های π^0 با انرژی 65°MeV از یک هسته‌ی کاملاً جاذب سنگین به شعاع $1,4 \text{ fm}$ پراکنده می‌شوند.

(الف) سطح مقطع‌های کشسان و ناکشسان کل را تخمین بزنید.

(ب) دامنه‌ی پراکندگی را محاسبه کنید و اعتبار قضیه‌ی اپتیکی را بررسی کنید.

(پ) با استفاده از دامنه‌ی پراکندگی به دست آمده در (ب)، سطح مقطع دیفرانسیلی مربوط به پراکندگی کشسان را محاسبه نموده و آن را رسم کنید. سطح مقطع کشسان کل را محاسبه کنید و ثابت کنید که در توافق با عبارت به دست آمده در (الف) است.

حل

(الف) در حالت یک هسته‌ی کاملاً جاذب ($\eta_l(k) = 0$)، سطح مقطع‌های کشسان و غیرکشسان کل که از (۱۱۳-۱۱) و (۱۱۴-۱۱) به دست می‌آیند، با هم برابر می‌شوند:

$$\sigma_{el} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_{\max}} (2l+1) = \sigma_{inel} \quad (194-11)$$

می‌توان این آزمایش را به صورت پراکندگی پيون‌های پرانرژی ($E = 65^\circ \text{MeV}$) از یک «قرص» سیاه به شعاع $a = 1,4 \text{ fm}$ در نظر گرفت. بنابراین می‌توان تعداد پاره‌موج‌های شامل در این پراکندگی را از $l_{\max} \simeq ka$ به دست آورد که در آن $k = \sqrt{2m_\pi \cdot E / \hbar^2}$ است. چون انرژی سکون یک پيون π^0 برابر با $m_\pi \cdot c^2 \simeq 135 \text{ MeV}$ است و با توجه به این که $\hbar c = 197,33 \text{ MeV fm}$ است، داریم:

$$k \simeq \sqrt{\frac{2m_\pi \cdot E}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2(m_\pi \cdot c^2)E}{(\hbar c)^2}} = \sqrt{\frac{2(135 \text{ MeV})(65^\circ \text{ MeV})}{(197,33 \text{ MeV fm})^2}} = 2,12 \text{ fm}^{-1} \quad (195-11)$$

از این رو $l_{\max} = ka \simeq (2,12 \text{ fm}^{-1})(1,4 \text{ fm}) = 2,97 \simeq 3$ بنابراین می‌توانیم (۱۱۳-۱۱) را به رابطه‌ی زیر کاهش دهیم:

$$\sigma_{el} = \sigma_{inel} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^3 (2l+1) = \frac{16\pi}{k^2} \simeq \frac{16\pi}{(2,12 \text{ fm}^{-1})^2} = 40,1 \text{ fm}^2 = 0,40 \text{ barn} \quad (196-11)$$

سطح مقطع کل برابر است با

$$\sigma_{tot} = \sigma_{el} + \sigma_{inel} = \frac{32\pi}{k^2} = 0,80 \text{ barn} \quad (197-11)$$

(ب) می‌توان دامنه‌ی پراکندگی را از (۱۱۲-۱۱) با $\eta_l(k) = 0$ به دست آورد:

$$f(\theta) = \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^3 (2l+1) P_l(\cos \theta) \quad (198-11)$$

$$= \frac{i}{2k} \left[1 + 3 \cos \theta + \frac{5}{2} (3 \cos^2 \theta - 1) + \frac{7}{2} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta) \right]$$

که در آن از چند جمله‌ای‌های لژاندر 1 ، $P_1(u) = u$ ، $P_2(u) = \frac{1}{2}(3u^2 - 1)$ و $P_3(u) = \frac{1}{4}(5u^3 - 3u)$ استفاده کرده‌ایم. دامنه‌ی پراکنندگی رو به جلو ($\theta = 0$) برابر است با

$$f(0) = \frac{i}{2k} \left[1 + 3 + \frac{5}{2}(3 - 1) + \frac{7}{2}(5 - 3) \right] = \frac{8i}{k} \quad (199-11)$$

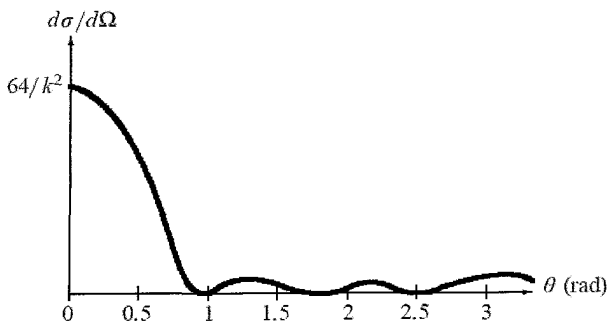
با ترکیب (۱۹۷-۱۱) و (۱۹۹-۱۱)، قضیه‌ی اپتیکی را به دست می‌آوریم: $\text{Im} f(0) = (k/4\pi)\sigma_{tot} = 8/k$ (پ) از (۱۹۸-۱۱)، سطح مقطع دیفرانسیلی کشسان برابر است با

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \frac{1}{4k^2} \left[1 + 3 \cos \theta + \frac{5}{2}(3 \cos^2 \theta - 1) + \frac{7}{2}(5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta) \right]^2 \quad (200-11)$$

شکل ۹-۱۱ سطح مقطع دیفرانسیلی طرح تداخلی ناشی از برهم‌نهی موج‌های ورودی و خروجی را نمایش می‌دهد. سطح مقطع کشسان کل از $\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta$ $\sigma_{el} = \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \sin \theta d\theta$ به دست می‌آید که هنگامی که با (۲۰۰-۱۱) ترکیب شود، به رابطه‌ی زیر می‌انجامد:

$$\sigma_{el} = \frac{2\pi}{4k^2} \int_0^\pi \left[1 + 3 \cos \theta + \frac{5}{2}(3 \cos^2 \theta - 1) + \frac{7}{2}(5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta) \right]^2 \sin \theta d\theta = \frac{16\pi}{k^2} \quad (201-11)$$

که با عبارتی که در (۱۹۶-۱۱) به دست آوردیم، یکسان است. بر خلاف سطح مقطع دیفرانسیلی، سطح مقطع کل هیچ طرح تداخلی را نمایش نمی‌دهد زیرا عبارت نهایی آن به هیچ زاویه‌ای بستگی ندارد زیرا روی زاویه‌ها انتگرال‌گیری شده است.



شکل ۹-۱۱ نمودار $\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4k^2} \left[1 + 3 \cos \theta + \frac{5}{2}(3 \cos^2 \theta - 1) + \frac{7}{2}(5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta) \right]^2$

۷-۱۱ تمرین‌ها

۱. پراکندگی یک ذره ی آلفای 5MeV (یعنی هسته‌ی هلیوم با $Z_1 = 2$ و $A_1 = 4$) از هسته‌ی آلومینیوم ($Z_2 = 13$ و $A_2 = 27$) را در نظر بگیرید. اگر زاویه‌ی پراکندگی ذره‌ی آلفا در چارچوب Lab برابر با $\theta_1 = 30^\circ$ باشد آنگاه:
 - (الف) زاویه‌ی پراکندگی θ ی آن را در چارچوب CM بیابید.
 - (ب) تخمینی عددی از سطح مقطع رادرفورد ارائه کنید.
۲. (الف) سطح مقطع‌های دیفرانسیلی و کل مربوط به برخورد کلاسیکی دو کره‌ی سخت به شعاع‌های r و R که R شعاع کره‌ی بزرگ‌تر است را بیابید. کره‌ی بزرگ‌تر ساکن در نظر گرفته می‌شود.
 - (ب) با استفاده از نتیجه‌های (الف)، سطح مقطع‌های دیفرانسیلی و کل مربوط به پراکندگی ذره‌های نقطه‌ای از یک کره‌ی سخت و ساکن به شعاع R را بیابید. راهنمایی: می‌توانید از رابطه‌ی کلاسیکی $d\sigma/d\Omega = -[b(\theta)/\sin\theta]db/d\theta$ استفاده کنید که در آن پارامتر برخورد است.
۳. پراکندگی از پتانسیل $V(r) = V_0 e^{-r^2/a^2}$ را در نظر بگیرید.
 - (الف) سطح مقطع دیفرانسیلی در تقریب نخست بورن و
 - (ب) سطح مقطع کل را بیابید.
۴. سطح مقطع دیفرانسیلی مربوط به پراکندگی ذره‌ای توسط چاه پتانسیل مربعی جاذبه‌ای $V(r) = -V_0$ به‌ازای $r < a$ و $V(r) = 0$ به‌ازای $r > a$ را در تقریب نخست بورن محاسبه کنید.
۵. پراکندگی کشسان از پتانسیل دلتای $V(r) = V_0 \delta(r - a)$ را در نظر بگیرید.
 - (الف) سطح مقطع دیفرانسیلی را در تقریب نخست بورن محاسبه کنید.
 - (ب) عبارتی بین V_0 ، a ، μ و k بیابید به‌طوری که تقریب بورن معتبر باشد.
۶. پراکندگی کشسان از پتانسیل $V(r) = V_0 e^{-r/a}$ که در آن V_0 و a ثابت‌اند را در نظر بگیرید.
 - (الف) سطح مقطع دیفرانسیلی را در تقریب نخست بورن محاسبه کنید.
 - (ب) عبارتی بین V_0 ، a ، μ و k بیابید به‌طوری که تقریب بورن معتبر باشد.
 - (پ) با استفاده از تقریب بورن، سطح مقطع کل را بیابید.
۷. در تقریب نخست بورن، سطح مقطع دیفرانسیلی مربوط به پراکندگی کشسان ذره‌ای به جرم m که در ابتدا در امتداد محور z حرکت می‌کند را از پتانسیل دلتای دوگانه‌ی غیرکروی زیر بیابید:

$$V(\mathbf{r}) = V_0 \delta(\mathbf{r} - a\mathbf{k}) - V_0 \delta(\mathbf{r} + a\mathbf{k})$$

که در آن \mathbf{k} بردار یکه در امتداد محور z است.

۸. سطح مقطع دیفرانسیلی مربوط به پراکندگی نوترون-نوترون در حالتی که در آن پتانسیل با رابطه‌ی $V(r) = V_0 e^{-r/a}$ تقریب زده می‌شود را در تقریب نخست بزنید.

۹. پراکندگی کشسان ذره‌ای به جرم m و تکانه‌ی اولیه‌ی $\hbar k$ از پتانسیل دلتای $V(\mathbf{r}) = V_0 \delta(x) \delta(y) \delta(z - a)$ را در نظر بگیرید که در آن V_0 مقدار ثابتی است. (الف) ابعاد فیزیکی ثابت V_0 چیست؟

(ب) سطح مقطع‌های دیفرانسیلی را در تقریب نخست بزنید.

(پ) قسمت (ب) را برای حالتی که در آن پتانسیل از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید، تکرار کنید:

$$V(\mathbf{r}) = V_0 \delta(x) [\delta(y - b) \delta(z) + \delta(y) \delta(z - a)]$$

۱۰. پراکندگی موج s ($l = 0$) ذره‌ای به جرم m از پتانسیل دافعه‌ی کروی $V(r) = V_0$ به ازای $r < a$ و $V(r) = 0$ به ازای $r > a$ با $V_0 > 0$ را در نظر بگیرید.

(الف) جابه‌جایی فاز موج s ($l = 0$) و سطح مقطع کل را محاسبه کنید.

(ب) نشان دهید که در حد $V_0 \rightarrow \infty$ ، جابه‌جایی فاز از $-ka$ به دست می‌آید. سطح مقطع کل را بیابید.

۱۱. پراکندگی موج s نوترون-نوترون که در آن پتانسیل برهمکنش توسط $V(r) = V_0 S_1 S_2 e^{-r/a}$ تقریب زده می‌شود و S_1 و S_2 عملگرهای برداری اسپینی دو نوترون هستند و $V_0 > 0$ است را در نظر بگیرید. سطح مقطع دیفرانسیلی را در تقریب نخست بزنید.

۱۲. پراکندگی پاره موج s ($l = 0$) بین دو ذره‌ی یکسان با اسپین $1/2$ را در نظر بگیرید که در آن پتانسیل برهمکنش به صورت تقریبی از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\hat{V}(r) = V_0 S_1 \cdot S_2 \delta(r - a)$$

که در آن S_1 و S_2 عملگرهای برداری اسپینی دو ذره و $V_0 > 0$ است. با فرض آن که ذره‌های فرودی و هدف غیرقطبیده باشند، سطح مقطع‌های دیفرانسیلی و کل را بیابید.

۱۳. پراکندگی کشسان نوترون‌های 170 MeV از هسته‌ای به شعاع $a = 17.5 \text{ fm}$ را در نظر بگیرید. حالتی فرضی را در نظر بگیرید که در آن جابه‌جایی‌های فاز اندازه‌گیری شده در این آزمایش از رابطه‌ی $\delta_l = \frac{180^\circ}{44}$ به دست می‌آیند.

(الف) تکانه‌ی زاویه‌ای بیشینه‌ی l_{\max} را تخمین بزنید.

(ب) سطح مقطع کل را بیابید.

پیوست الف

تابع دلتا

الف-۱ تابع دلتای یک‌بعدی

الف-۱-۱ تعریف‌های گوناگون تابع دلتا

می‌توان تابع دلتا را به صورت حد $\delta^\varepsilon(x)$ هنگامی که $\varepsilon \rightarrow 0$ میل می‌کند، تعریف کرد (شکل الف-۱):

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \delta^\varepsilon(x) \quad (\text{الف-۱})$$

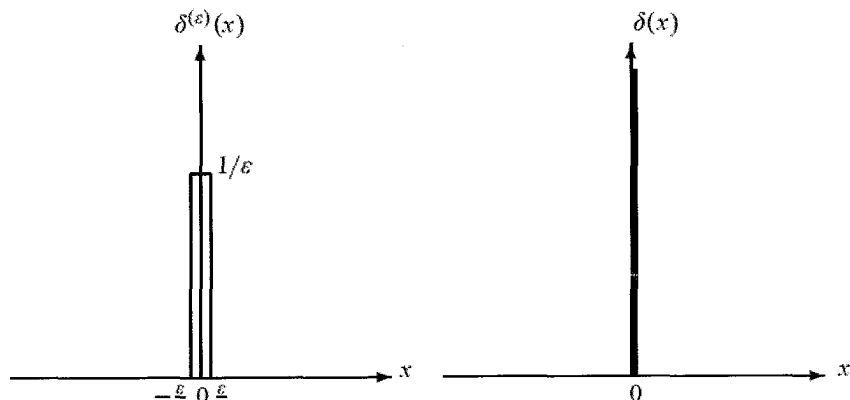
که در آن

$$\delta^\varepsilon(x) = \begin{cases} 1/\varepsilon & -\varepsilon/2 < x < \varepsilon/2 \\ 0 & |x| > \varepsilon/2 \end{cases} \quad (\text{الف-۲})$$

همچنین می‌توان تابع دلتا را با معادله‌های انتگرالی زیر نیز تعریف کرد:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x)dx = f(0) \quad (\text{الف-۳})$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x-a)dx = f(a) \quad (\text{الف-۴})$$



شکل الف-۱: تابع دلتای $\delta(x)$ به صورتی که به وسیله $\delta(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \delta^{(\epsilon)}(x)$ تعریف می‌شود.

باید یادآوری کنیم که تابع δ یک تابع ریاضی معمولی نیست. می‌توان آن را به صورت حد تابع‌های تحلیلی مانند تابع‌های زیر بیان کرد:

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\sin(x/\epsilon)}{\pi x}, \quad \delta(x) = \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{\sin^2(ax)}{\pi a x^2} \quad (\text{الف-۵})$$

یا

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{\epsilon}{x^2 + \epsilon^2} \quad (\text{الف-۶})$$

تبدیل فوریه‌ی $\delta(x)$ که می‌توان آن را از حد $\frac{\sin(x/\epsilon)}{\pi x}$ به‌دست آورد، برابر است با

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk \quad (\text{الف-۷})$$

که به‌نوبه‌ی خود معادل با رابطه‌ی زیر است:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-1/\epsilon}^{+1/\epsilon} e^{ikx} dk = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\sin(x/\epsilon)}{\pi x} = \delta(x) \quad (\text{الف-۸})$$

الف-۱-۲ ویژگی‌های تابع دلتا

تابع دلتا زوج است:

$$\delta(-x) = \delta(x) \quad \text{و} \quad \delta(x-a) = \delta(a-x) \quad (\text{الف-۹})$$

در اینجا برخی از ویژگی‌های مفید تابع دلتا آورده شده است:

$$\int_a^b f(x)\delta(x-x_0)dx = \begin{cases} f(x_0) & \text{اگر } a < x_0 < b \\ 0 & \text{در جاهای دیگر} \end{cases} \quad (\text{الف-۱۰})$$

$$\delta(x) = 0 \quad \text{به‌ازای } x \neq 0 \quad (\text{الف-۱۱})$$

$$x\delta(x) = 0 \quad (\text{الف-۱۲})$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x) \quad (a \neq 0) \quad (\text{الف-۱۳})$$

$$f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a) \quad (\text{الف-۱۴})$$

$$\int_c^d \delta(a-x)\delta(x-b)dx = \delta(a-b) \quad \text{به‌ازای } c \leq a \leq d, \quad c \leq b \leq d \quad (\text{الف-۱۵})$$

$$\int_a^b \delta(x)dx = 1 \quad \text{به‌ازای } a \leq 0 \leq b \quad (\text{الف-۱۶})$$

$$\delta[g(x)] = \sum_i \frac{1}{|g'(x_i)|}\delta(x-x_i) \quad (\text{الف-۱۷})$$

که در آن x_i صفر $g(x)$ و $g'(x_i) \neq 0$ است. با استفاده از (الف-۱۷) می‌توانیم ثابت کنیم که

$$\delta[(x-a)(x-b)] = \frac{1}{|a-b|}[\delta(x-a) + \delta(x-b)] \quad (a \neq b) \quad (\text{الف-۱۸})$$

$$\delta(x^2 - a^2) = \frac{1}{2|a|}[\delta(x-a) + \delta(x+a)] \quad (a \neq 0) \quad (\text{الف-۱۹})$$

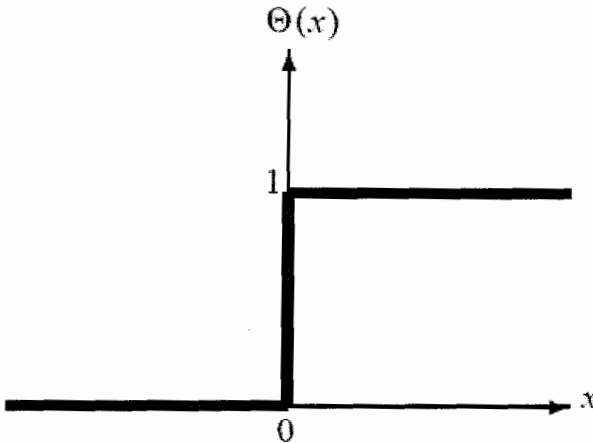
الف-۱-۳ مشتق تابع دلتا

تابع هوی‌ساید یا تابع پله‌ای به‌صورت زیر تعریف می‌شود (شکل الف-۲ را ببینید):

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases} \quad (\text{الف-۲۰})$$

مشتق تابع هوی‌ساید تابع دلتا را نتیجه می‌دهد:

$$\frac{d}{dx}\Theta(x) = \delta(x) \quad (\text{الف-۲۱})$$

شکل ۱ تابع هوی ساید $\Theta(x)$.

با استفاده از تبدیل فوریه‌ی تابع دلتا می‌توانیم بنویسیم:

$$\frac{d\delta(x)}{dx} = \delta'(x) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} k e^{ikx} dk \quad (\text{الف-۲۲})$$

راه دیگر پرداختن به مشتق تابع دلتا انتگرال‌گیری جزء به جزء زیر از $\delta'(x-a)$ است:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta'(x-a) dx = f(x) \delta(x-a) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} f'(x) \delta(x-a) dx = -f'(a) \quad (\text{الف-۲۳})$$

یا

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta'(x-a) dx = -f'(a) \quad (\text{الف-۲۴})$$

که در آن از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که $f(x)\delta(x-a)$ در $\pm\infty$ صفر است. با پیروی از همین روند، می‌توانیم نشان دهیم که

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta''(x-a) dx = (-1)^2 f''(a) = f''(a) \quad (\text{الف-۲۵})$$

تکرار انتگرال‌گیری‌های جزء به جزء مشابه، به رابطه‌ی عمومی زیر می‌انجامد:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta^{(n)}(x-a) dx = (-1)^n f^{(n)}(a) \quad (\text{الف-۲۶})$$

که در آن $\delta^{(n)}(x-a) = d^n[\delta(x-a)]/dx^n$ و $f^{(n)}(a) = d^n f(x)/dx^n|_{x=a}$ است. به خصوص اگر $f(x) = 1$ و $n = 1$ باشد آنگاه داریم:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta'(x-a) dx = 0 \quad (\text{الف-۲۷})$$

در اینجا فهرستی از ویژگی‌های مفید مشتق تابع دلتا آورده شده است:

$$\delta'(x) = -\delta'(-x) \quad (\text{الف-۲۸})$$

$$x\delta'(x) = -\delta(x) \quad (\text{الف-۲۹})$$

$$x^2\delta'(x) = 0 \quad (\text{الف-۳۰})$$

$$x^2\delta''(x) = 2\delta(x) \quad (\text{الف-۳۱})$$

الف-۲ تابع دلتای سه بعدی

شکل سه بعدی تابع دلتا در مختصات دکارتی به صورت زیر است:

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \delta(x - x')\delta(y - y')\delta(z - z') \quad (\text{الف-۳۲})$$

و در مختصات کروی برابر است با

$$\begin{aligned} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= \frac{1}{r^2} \delta(r - r') \delta(\cos \theta - \cos \theta') \delta(\varphi - \varphi') \\ &= \frac{1}{r^2 \sin \theta} \delta(r - r') \delta(\theta - \theta') \delta(\varphi - \varphi') \end{aligned} \quad (\text{الف-۳۳})$$

زیرا مطابق با (الف-۱۷)، داریم: $\delta(\cos \theta - \cos \theta') = \delta(\theta - \theta') / \sin \theta$. تبدیل فوریه‌ی تابع دلتای سه بعدی برابر است با

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k e^{ik \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \quad (\text{الف-۳۴})$$

و

$$\int d^3r f(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r}) = f(\mathbf{0}), \quad \int d^3r f(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = f(\mathbf{r}_0) \quad (\text{الف-۳۵})$$

اغلب با رابطه‌های زیر روبرو می‌شویم:

$$\nabla \left(\frac{\hat{r}}{r^2} \right) = 4\pi \delta(\mathbf{r}), \quad \nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right) = -4\pi \delta(\mathbf{r}) \quad (\text{الف-۳۶})$$

که در آن \hat{r} برداریکه در امتداد \mathbf{r} است.

باید یادآوری کنیم که بعد فیزیکی تابع دلتا یک بر روی ابعاد آرگومان آن است. بنابراین اگر x فاصله باشد آنگاه بعد فیزیکی $\delta(x)$ از $\delta(x) = \delta(x) \int_{-L}^L dx = 1/L$ به دست می‌آید که در آن L طول است. به صورت مشابه، بعد فیزیکی $\delta(\mathbf{r})$ برابر با $1/L^3$ است زیرا

$$[\delta(\mathbf{r})] = [\delta(x)\delta(y)\delta(z)] = \frac{1}{[x]} \frac{1}{[y]} \frac{1}{[z]} = \frac{1}{L^3} \quad (\text{الف-۳۷})$$

پیوست ب

تکانه‌ی زاویه‌ای در مختصات کروی

در این پیوست نشان خواهیم داد که چگونه عبارت‌های مربوط به گرادیان ∇ ، لاپلاسی ∇^2 و مؤلفه‌های تکانه‌ی زاویه‌ای مداری در مختصات کروی را به دست می‌آوریم.

ب-۱ به دست آوردن برخی از رابطه‌های عمومی

مختصات دکارتی (x, y, z) بردار \mathbf{r} از طریق رابطه‌های زیر به مختصات قطبی کروی آن (r, θ, φ) مربوطند:

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta \quad (\text{ب-۱})$$

پایه‌ی دکارتی متعامد بهنجار $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ به وسیله‌ی رابطه‌های زیر به همتهای کروی $(\hat{r}, \hat{\theta}, \hat{\varphi})$ خود مربوط می‌شود:

$$\hat{x} = \hat{r} \sin \theta \cos \varphi + \hat{\theta} \cos \theta \cos \varphi - \hat{\varphi} \sin \varphi \quad (\text{ب-۲})$$

$$\hat{y} = \hat{r} \sin \theta \sin \varphi + \hat{\theta} \cos \theta \sin \varphi + \hat{\varphi} \cos \varphi \quad (\text{ب-۳})$$

$$\hat{z} = \hat{r} \cos \theta - \hat{\theta} \sin \theta \quad (\text{ب-۴})$$

با مشتق گرفتن از (ب-۱) رابطه‌های زیر را به دست می‌آوریم:

$$dx = \sin \theta \cos \varphi dr + r \cos \theta \cos \varphi d\theta - r \sin \theta \sin \varphi d\varphi \quad (\text{ب-۵})$$

$$dy = \sin \theta \sin \varphi dr + r \cos \theta \sin \varphi d\theta + r \sin \theta \cos \varphi d\varphi \quad (\text{ب-۶})$$

$$dz = \cos \theta dr - r \sin \theta d\theta \quad (\text{ب-۷})$$

با حل این معادله‌ها برای dr ، $d\theta$ و $d\varphi$ رابطه‌های زیر را به دست می‌آوریم:

$$dr = \sin \theta \cos \varphi dx + \sin \theta \sin \varphi dy + \cos \theta dz \quad (\text{ب-۸})$$

$$d\theta = \frac{1}{r} \cos \theta \cos \varphi dx + \frac{1}{r} \cos \theta \sin \varphi dy - \frac{1}{r} \sin \theta dz \quad (\text{ب-۹})$$

$$d\varphi = -\frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} dx + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} dy \quad (\text{ب-۱۰})$$

می‌توانیم ثابت کنیم که (ب-۵) تا (ب-۱۰) به رابطه‌های زیر می‌انجامد:

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \sin \theta \cos \varphi, \quad \frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{1}{r} \cos \varphi \cos \theta, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial x} = -\frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \quad (\text{ب-۱۱})$$

$$\frac{\partial r}{\partial y} = \sin \theta \sin \varphi, \quad \frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{1}{r} \sin \varphi \cos \theta, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \quad (\text{ب-۱۲})$$

$$\frac{\partial r}{\partial z} = \cos \theta, \quad \frac{\partial \theta}{\partial z} = -\frac{1}{r} \sin \theta, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial z} = 0 \quad (\text{ب-۱۳})$$

که به نوبه‌ی خود رابطه‌های زیر را نتیجه می‌دهد:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \\ &= \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{aligned} \quad (\text{ب-۱۴})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial y} &= \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial y} \\ &= \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{aligned} \quad (\text{ب-۱۵})$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial z} = \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \quad (\text{ب-۱۶})$$

ب-۲ گرادیان و لاپلاسی در مختصات کروی

می‌توانیم نشان دهیم که ترکیب (ب-۱۴) تا (ب-۱۶) به ما امکان می‌دهد تا عملگر ∇ و همینطور عملگر ∇^2 را در مختصات کروی بیان کنیم:

$$\nabla = \hat{x} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{y} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{z} \frac{\partial}{\partial z} = \hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\varphi} \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (\text{ب-۱۷})$$

$$\nabla^2 = \nabla \cdot \nabla = \left(\hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{\theta}}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\hat{\varphi}}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \cdot \left(\hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{\theta}}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\hat{\varphi}}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (\text{ب-۱۸})$$

حال با استفاده از رابطه‌های

$$\frac{\partial \hat{r}}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial \hat{\varphi}}{\partial r} = 0 \quad (\text{ب-۱۹})$$

$$\frac{\partial \hat{r}}{\partial \theta} = \hat{\theta}, \quad \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial \theta} = -\hat{r}, \quad \frac{\partial \hat{\varphi}}{\partial \theta} = 0 \quad (\text{ب-۲۰})$$

$$\frac{\partial \hat{r}}{\partial \varphi} = \hat{\varphi} \sin \theta, \quad \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial \varphi} = \hat{\varphi} \cos \theta, \quad \frac{\partial \hat{\varphi}}{\partial \varphi} = -\hat{r} \sin \theta - \hat{\theta} \cos \theta \quad (\text{ب-۲۱})$$

می‌توانیم نشان دهیم که عملگر لاپلاسی به رابطه‌ی زیر کاهش می‌یابد:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (\text{ب-۲۲})$$

ب-۳ تکانه‌ی زاویه‌ای در مختصات کروی

می‌توان عملگر تکانه‌ی زاویه‌ای مداری \mathbf{L} را به صورت

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{R}} \times \hat{\mathbf{P}} = (-i\hbar r) \hat{\mathbf{r}} \times \nabla = (-i\hbar r) \hat{\mathbf{r}} \times \left[\hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{\theta}}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\hat{\varphi}}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \quad (\text{ب-۲۳})$$

یا به صورت

$$\hat{\mathbf{L}} = -i\hbar \left(\hat{\varphi} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\hat{\theta}}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (\text{ب-۲۴})$$

در مختصات کروی بیان کرد. با استفاده از (ب-۲۴) همراه با (ب-۲) تا (ب-۴)، مؤلفه‌های $\hat{\mathbf{L}}_x$ ، $\hat{\mathbf{L}}_y$ و $\hat{\mathbf{L}}_z$ را در چارچوب مختصات کروی بیان می‌کنیم. به عنوان مثال، می‌توان عبارت مربوط به $\hat{\mathbf{L}}_x$ را به صورت

زیر نوشت:

$$\begin{aligned}\hat{L}_x &= \hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{L} = -i\hbar \left(\hat{r} \sin \theta \cos \varphi + \hat{\theta} \cos \theta \cos \varphi - \hat{\varphi} \sin \varphi \right) \cdot \left(\hat{\varphi} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\hat{\theta}}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ &= i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)\end{aligned}\quad (۲۵-ب)$$

به صورت مشابه، به آسانی می‌توانیم رابطه‌های زیر را به دست آوریم:

$$\begin{aligned}\hat{L}_y &= i\hbar \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ \hat{L}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}\end{aligned}\quad (۲۶-ب)$$

از عبارت‌های (۲۵-ب) و (۲۶-ب) برای \hat{L}_y و \hat{L}_x نتیجه می‌گیریم که

$$\hat{L}_{\pm} = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y = \pm \hbar e^{\pm i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \pm i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (۲۷-ب)$$

عبارت مربوط به L^2 برابر است با

$$L^2 = -\hbar^2 r^2 (\hat{\mathbf{r}} \times \nabla) \cdot (\hat{\mathbf{r}} \times \nabla) = -\hbar^2 r^2 \left[\nabla^2 - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \right] \quad (۲۸-ب)$$

که به آسانی می‌توان آن را به صورت زیر بر حسب مختصات کروی نوشت:

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (۲۹-ب)$$

این عبارت از جاگذاری (۲۲-ب) در (۲۹-ب) به دست آمد.

توجه کنید که با استفاده از عبارت (۲۹-ب) برای L^2 ، می‌توانیم ∇^2 را به صورت زیر بازنویسی نماییم:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{\hbar^2 r^2} L^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{\hbar^2 r^2} L^2 \quad (۳۰-ب)$$

پیوست ج

کد ++C برای حل معادله‌ی شرودینگر

این کد ++C برای حل معادله‌ی شرودینگر یک‌بعدی برای پتانسیل نوسانگر هماهنگ (HO) و پتانسیل چاه مربعی نامتناهی (ISW) که در فصل ۴ به آن اشاره شد، آمده است. سپاس ویژه‌ی من به دکتر م. بولوت و پروفسور دکتر ه. مولر-کرومبار و دانشجوی دکترایش ک. گوگن برگر که بی‌چشمداشت و با زحمت فراوان کار نوشتن و آزمایش کدهای زیر را به انجام رسانده‌اند. بیشتر دکتر مولوت کدی را برای ISW نوشته بود در حالی که پروفسور مولر-کرومبار و گوگن برگر نه تنها کد جدیدی را برای HO نوشتند (نسخه‌ی زیر را ببینید) بلکه آن را به صورتی طراحی کردند که برای پتانسیل ISW نیز به کار می‌رود (همچنین آنها نوشته‌های آموزشی را نیز به آن اضافه کرده‌اند به طوری که خوانندگان بدون زحمت می‌توانند کد را بفهمند و از آن استفاده کنند). توجه برای جابه‌جایی از کد نوسانگر هماهنگ به کد چاه مربعی نامتناهی تنها کافی است که نشان ممیز دوگانه‌ی نخست (یعنی //) را از خط برنامه‌ی نوسانگر زیر پاک کنید:

```
E_pot[i]=0.5*dist*dist; // E_pot[i]=0, //E_pot=0; Infinite Well!
```

البته باید انرژی و مقدار «xRange» نیز دوباره مقیاس‌بندی شوند تا در توافق با الگوریتم ارائه شده در انتهای فصل ۴ باشد.

The C++ Code: osci.cpp

```

/* osci.cpp: Solution of the one-dimensional Schrodinger equation
for
a particle in a harmonic potential, using the shooting method.
To compile and link with gnu compiler, type: g++ -o osci osci.cpp
To run the current C++ program, simply type: osci
Plot by gnuplot: /GNUPLOT> set terminal windows
/GNUPLOT> plot "psi-osc.dat" with lines */
#include <cstdio>
#include <cstdlib>
#include <cmath>
#define MAX(a, b) (((a) > (b)) ? (a) : (b))
int main (int argc, char*argv[])
{
// Runtime constants
const static double Epsilon = 1e-10; // Defines the precision of
//... energy calculations
const static int N_of_Divisions = 1000;
const static int N_max = 5; //Number of calculated Eigenstates

FILE *Wavefunction_file, *Energy_file, *Potential_file;
Wavefunction_file = fopen("psi-osc.dat","w");
Energy_file = fopen("E_n_Oszillator.dat","w");
Potential_file = fopen("HarmonicPotentialNoDim.dat","w");
if (!(Wavefunction_file && Energy_file && Potential_file))
{ printf("Problems to create files output. \n"); exit(2); }

/* Physical parameters using dimensionless quantities.
ATTENTION: We set initially: hbar = m = omega = a = 1, and
reintroduce physical values at the end. According to Eq. (4.117),
the ground state energy then is E_n = 0.5. Since the wave function
vanishes only at -infinity and +infinity, we have to cut off the
calculation somewhere, as given by 'xRange'. If xRange is chosen
too large, the open (positive) end of the wave function can
diverge numerically in this simple shooting approach. */

```

```

const static double xRange = 12; // xRange=11.834 corresponds to a
//... physical range of -20fm < x < +20fm, see after Eq. (4.199).
const static double h_0 = xRange / N_of_Divisions;
double* E_pot = new double[N_of_Divisions+1];
double dist;

for (int i=0; i<= N_of_Divisions; ++i)
{ // Harmonic potential, as given in Eq. (4.115), but dimensionless
  dist = i*h_0 - 0.5*xRange;
  E_pot[i] = 0.5*dist*dist; // E_pot[i]=0; // E_pot=0: Infinite Well!
  fprintf(Potential_file, "%16.12e \t\t %16.12e\n", dist, E_pot[i]);
}
fclose(Potential_file);

/* Since the Schrodinger equation is linear, the amplitude of the
wavefunction will be fixed by normalization.
At left we set it small but nonzero. */
const static double Psi_left = 1.0e-3, // left boundry condition
const static double Psi_right = 0.0; // right boundry condition

double *Psi, *EigenEnergies; // Arrays to hold the results
Psi = new double[N_of_Divisions+1]; //N_of_Points = N_of_Divisions+1
EigenEnergies = new double[N_max+1];
Psi[0] = Psi_left;
Psi[1] = Psi_left + 1.0e-3; // Add arbitrary small value
int N_quantum; // N_quantum is Energy Quantum Number
int Nodes_plus; // Number of nodes (+1) in wavefunction
double K_square; // Square of wave vector
// Initial Eigen-energy search limits
double E_lowerlimit = 0.0; // Eigen-energy must be positive
double E_upperlimit = 10.0;
int End_sign = -1;

```

```

bool Limits_are_defined = false;
double Normalization_coefficient;
double E_trial;

// MAIN LOOP begins: -----
for (N_quantum=1; N_quantum <= N_max; ++N_quantum)
{
// Find the eigen-values for energy. See theorems (4.1) and (4.2).
Limits_are_defined = false;
while (Limits_are_defined == false)
{ /* First, determine an upper limit for energy, so that the wave-
function Psi[i] has one node more than physically needed. */
Nodes_plus = 0;
E_trial = E_upperlimit;
for (int i=2; i <= N_of_Divisions; ++i)
{ K_square = 2.0*(E_trial - E_pot[i]);
// Now use the NUMEROV-equation (4.197) to calculate wavefunction
Psi[i] = 2.0*Psi[i-1]*(1.0 - (5.0*h_0*h_0*K_square / 12.0))
/ (1.0 + (h_0*h_0*K_square/12.0))-Psi[i-2];
if (Psi[i]*Psi[i-1] <0) ++Nodes_plus;
}
/* If one runs into the following condition, the modification
of the upper limit was too aggressive. */
if (E_upperlimit < E_lowerlimit)
E_upperlimit = MAX(2*E_upperlimit, -2*E_upperlimit);
if (Nodes_plus > N_quantum) E_upperlimit *= 0.7;
else if (Nodes_plus < N_quantum) E_upperlimit *=2.0;
else Limits_are_defined = true; // At least one node should appear.
} // End of the loop: while (Limits_are_defined == false)
// Refine the energy by satisfying the right boundry condition.
End_sign = -End_sign;
while ((E_upperlimit - E_lowerlimit)> Epsilon)
{ E_trial = (E_upperlimit + E_lowerlimit) / 2.0;

```

```

for (int i=2; i <= N_of_Divisions; ++i)
{ // Again eq.(4.197) of the Numerov-algorithm:
K_square = 2.0*(E_trial - E_pot[i]);
Psi[i] = 2.0*Psi[i-1] * (1.0 - (5.0*h_0*h_0*K_square / 12.0))
/(1.0 + (h_0*h_0*K_square/12.0))-Psi[i-2];
}
if (End_sign*Psi[N_of_Divisions] > Psi_right) E_lowerlimit = E_trial;
else E_upperlimit = E_trial;
} // End of loop: while ((E_upperlimit - E_lowerlimit) > Epsilon)
// Initialization for the next iteration in main loop
E_trial = (E_upperlimit+E_lowerlimit)/2;
EigenEnergies[N_quantum] = E_trial;
E_upperLimit = E_trial;
E_lowerLimit = E_trial;

// Now find the normalization coefficient
double Integral = 0.0;
for (int i=1; i <= N_of_Divisions; ++i)
{ // Simple integration
Integral += 0.5*h_0*(Psi[i-1]*Psi[i-1]+Psi[i]*Psi[i]);
}
Normalization_coefficient = sqrt(1.0/Integral);
// Output of normalized dimensionless wave function
for (int i=0; i<=N_of_Divisions; ++i)
{ fprintf(Wavefunction_file), "%16.12e \t\t %16.12e\n",
i*h_0 - 0.5*xRange, Normalization_coefficient*Psi[i]);
}
fprintf(Wavefunction_file, "\n");
} // End of MAIN LOOP.-----
fclose(Wavefunction_file);

/* Finally convert dimensionless units in real units. Note that
energy does not depend explicitly on the particle's mass anymore:

```

```

hbar = 1.05457e-34; // Planck constant/2pi
omega = 5.34e21; // Frequency in 1/s
MeV = 1.602176487e-13; // in J
The correct normalization would be hbar*omega/MeV = 3.5148461144,
but we use the approximation 3.5 for energy-scale as in chap. 4.9 */
const static double Energyscale = 3.5; // in MeV
// Output with rescaled dimensions; assign Energy_file
printf("Quantum Harmonic Oscillator, program osci.cpp\n");
printf("Energies in MeV:\n");
printf("\n \t\t E_n\n");
for (N_quantum=1; N_quantum <= N_MAX; ++N_quantum)
{ fprintf(Energy_file, "%d \t\t %16.12e\n", N_quantum-1,
Energyscale*EigenEnergies[N_quantum]);
printf("%d \t\t %16.12e\n", N_quantum-1,
Energyscale*EigenEnergies[N_quantum]);
}
fprintf(Energy_file, "\n");
fclose(Energy_file);
printf("Wave-Functions in File: psi_osc.dat \n");
printf("\n");
return 0;
}

```

رابطه‌های ضروری

مدل بوهر:

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e c^2}, \quad r_n = n^2 a_0, \quad v_n = \frac{\alpha}{n} c = \frac{1}{137n} c, \quad E_n = -\frac{e^2}{2a_0 n^2}$$

رابطه‌های عمومی:

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{\hat{A} + \hat{B}} e^{[\hat{A}, \hat{B}]/2}$$

$$e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{1}{3!} [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots$$

اصل عدم قطعیت تعمیم یافته: $\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|$ که در آن $\Delta A = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2}$ است. جابه‌جاگر بندادی: $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$

اصل عدم قطعیت هایزنبرگ: $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$

احتمال اندازه‌گیری: $\hat{A}|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle$, $P_n(a_n) = \frac{|\langle \psi_n | \psi \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle}$

مقدار چشمداشتی: $\langle \hat{A} \rangle = \frac{\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \sum_n a_n P_n(a_n)$

مقدارهای چشمداشتی تحول زمانی: $\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle + \langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \rangle$

جابه‌جاگرها و گروه‌های پواسون: کلاسیکی $\{A, B\}$ $\frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{B}] \rightarrow \{A, B\}$

معادله‌ی شرودینگر وابسته به زمان: $i\hbar \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(t)$

چگالی احتمال: $\rho(\mathbf{r}, t) = \Psi^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t)$

چگالی جریان احتمال: $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi)$

پایستگی احتمال: $\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0$

تکانه‌ی زاویه‌ای

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar \hat{J}_z, \quad [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar \hat{J}_x, \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar \hat{J}_y$$

$$\hat{J}^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle, \quad \hat{J}_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle$$

$$\hat{J}_{\pm} |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle$$

$$\langle j, m | \hat{J}_x^2 |j, m\rangle = \langle j, m | \hat{J}_y^2 |j, m\rangle = \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - m^2]$$

به‌ازای $j = \frac{1}{2}$: $J_k = \frac{\hbar}{2} \sigma_k$ که در آن $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ ماتریس‌های پائولی هستند:

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

به ازای $j = 1$: ماتریس های J_x , J_y و J_z عبارتند از

$$\hat{J}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{J}_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{J}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

پتانسیل های مستقل از زمان: $|\Psi(t)\rangle = |\psi(x)\rangle \exp(-iEt/\hbar)$

معادله ی شرودینگر مستقل از زمان: $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$

چاه مربعی نامتناهی: $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$ ($n = 1, 2, 3, \dots$), $E_n = -\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{X}^2 = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right), \quad E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad \hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$$

$$\langle n|\hat{X}^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1), \quad \langle n|\hat{P}^2|n\rangle = \frac{m\hbar\omega}{2}(2n+1)$$

اتم هیدروژن: معادله ی شعاعی و میانگین ها: $-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 U(r)}{dr^2} + \left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r} \right] U(r) = EU(r)$

$$\langle nl|r|nl\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [3n^2 - l(l+1)] a_0, \quad \langle nl|r^2|nl\rangle = \frac{1}{2} n^2 [\Delta n^2 + 1 - 3l(l+1)] a_0^2$$

$$\langle nl|r^{-1}|nl\rangle = \frac{1}{n^2 a_0}, \quad \langle nl|r^{-2}|nl\rangle = \frac{2}{n^3 (2l+1) a_0^2}$$

نظریه ی اختلال مستقل از زمان:

$$(\hat{H}_0 + \hat{H}_p)|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle, \quad \hat{H}_0|\phi_n\rangle = E_n^{(0)}|\phi_n\rangle \quad (\hat{H}_p \ll \hat{H}_0)$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \langle \phi_n | \hat{H}_p | \phi_n \rangle + \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_m | \hat{H}_p | \phi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \dots$$

$$|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m | \hat{H}_p | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\phi_m\rangle + \dots$$

شرط کوانتس: $\oint p(x, E_n) dx = 2 \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(E_n - V(x))} dx = (n + \frac{1}{2})h$

پتانسیل های وابسته به زمان

تصویرهای هایزنبرگ و برهمکنش:

$$|\psi(t)\rangle_H = e^{it\hat{H}/\hbar} |\psi(t)\rangle, \quad \hat{A}_H(t) = e^{it\hat{H}/\hbar} \hat{A} e^{-it\hat{H}/\hbar}, \quad \frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}_H, \hat{H}]$$

$$|\psi(t)\rangle_I = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle, \quad \hat{V}_I(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{V} e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}, \quad i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle_I}{dt} = \hat{V}_I(t) |\psi(t)\rangle_I$$

نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان: $P_{if}(t) = \left| -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle \psi_f | \hat{V}(t') | \psi_i \rangle e^{i\omega_{fi}t'} dt' \right|^2$
 شدت تابش گسیل شده: $I_{i \rightarrow f} = \hbar \omega_{i \rightarrow f} \overset{\text{گسیل}}{W_{i \rightarrow f}} = \frac{4}{3} \frac{\omega_{fi}^3}{c^3} |\mathbf{d}_{fi}|^2 = \frac{4}{3} \frac{\omega_{fi}^3 e^2}{c^3} |\langle \psi_f | \mathbf{r} | \psi_i \rangle|^2$
 پراکندگی:

سطح مقطع دیفرانسیلی (تقریب بورن): $\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \varphi)|^2 = \frac{\mu^2}{4\pi^2 \hbar^2} \left| \int e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') d^3 r' \right|^2$
 تحلیل پاره موج: $f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} f_l(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta)$

ثابت‌های فیزیکی

مقدار	نماد، معادله	کمیت
$2,9979 \times 10^8 \text{ms}^{-1}$	c	سرعت نور
$1,602 \times 10^{-19} \text{C}$	e	بار الکترون
$6,626 \times 10^{-34} \text{Js}$	h	ثابت پلانک
$1,055 \times 10^{-34} \text{Js}$	$\hbar = h/2\pi$	ثابت پلانک، کاهش یافته
$197,327 \text{MeV fm} = 197,327 \text{eV nm}$	$\hbar c$	ثابت تبدیل
$9,109 \times 10^{-31} \text{kg} = 0,511 \text{MeV}/c^2$	m_e	جرم الکترون
$1,673 \times 10^{-27} \text{kg} = 938,272 \text{MeV}/c^2$	m_p	جرم پروتون
$1,675 \times 10^{-27} \text{kg} = 939,566 \text{MeV}/c^2$	m_n	جرم نوترون
$1/137,036$	$\alpha = e^2/\hbar c$	ثابت ساختار ریز
$2,818 \times 10^{-15} \text{m}$	$r_e = e^2/m_e c^2$	شعاع کلاسیکی الکترون
$2,426 \times 10^{-12} \text{m}$	$\lambda = h/m_e c = r_e/\alpha$	طول موج کامپتون الکترون
$1,321 \times 10^{-15} \text{m}$	$\lambda = h/m_p c$	طول موج کامپتون پروتون
$0,529 \times 10^{-10} \text{m}$	$a_0 = r_e/\alpha^2$	شعاع بوهر
$13,606 \text{eV}$	$R = m_e c^2 \alpha^2/2$	انرژی ریذبرگ
$5,788 \times 10^{-11} \text{MeV T}^{-1}$	$\mu_B = e\hbar/2m_e$	مگنتون بوهر
$3,152 \times 10^{-14} \text{MeV T}^{-1}$	$\mu_N = e\hbar/2m_p$	مگنتون هسته‌ای
$6,022 \times 10^{23} \text{mol}^{-1}$	N_A	عدد آووگادرو
$1,381 \times 10^{-23} \text{JK}^{-1}$ $= 8,617 \times 10^{-5} \text{eVK}^{-1}$	k	ثابت بولتزمن
$8,31 \text{Jmol}^{-1}\text{K}^{-1}$	$R = N_A k$	ثابت گازها
$6,673 \times 10^{-11} \text{m}^3 \text{kg}^{-1} \text{s}^{-2}$	G	ثابت گرانشی
$8,854 \times 10^{-12} \text{Fm}^{-1}$	$\epsilon_0 = 1/\mu_0 c^2$	گذردهی فضای آزاد
$4\pi \times 10^{-7} \text{NA}^{-2}$	μ_0	تراوایی فضای آزاد

تبدیل واحدها

1 atmosphere = 101325 Pa, 1 G = 10^{-4}T , 1 barn = $10^{-28} \text{m}^2 = 10^0 \text{fm}^2$, 1 fm = 10^{-15}m
 $1^\circ \text{C} = 273,15 \text{K}$, $kT = [38,682]^{-1} \text{eV} : T = 300 \text{K}$ در انرژی گرمایی در $10^{13} 25 \text{Pa}$
 $1 \text{eV}/c^2 = 1,783 \times 10^{-36} \text{kg}$, $1 \text{eV} = 1,602 \times 10^{-19} \text{J}$

نمایه

- آزمایش اشترن-گِرخ، ۳۹۷، ۳۹۵
- آزمایش تامسون، ۳۵، ۳۶، ۴۲
- آزمایش دو شکاف، ۴۵
- آزمایش دو شکاف، ۳۷، ۴۳-۳۹، ۴۵، ۸۷، ۸۸، ۱۰۸
- آمار فرمی-دیراک، ۶۵۵، ۶۵۶
- آمار بوز-آینشتین، ۶۵۵، ۶۵۶
- آهنگ گذار، ۸۳۳
- آهنگ گذار، ۷۹۵، ۷۹۷، ۸۱۵-۸۱۳، ۸۲۷، ۸۲۸، ۸۳۰، ۸۳۱، ۸۳۳، ۸۳۵، ۸۳۶، ۸۳۸، ۸۳۹
- اتم هیدروژن، ۱۳
- اتم هیدروژن، ۱۴، ۳۲
- اثر بهنجار زمین، ۴۸۸
- اثر فتوالکتریک، ۴۸
- اثر کامپتون، ۳۳
- اثر استتار، ۶۶۸، ۷۷۴، ۷۷۶
- اثر اشتراک اتم هیدروژن، ۶۹۶
- اثر اشتراک خطی، ۶۹۲
- اثر بهنجار زمین، ۷۰۸
- اثر بهنجار زمین، ۴۸۸-۴۸۶، ۷۰۸
- اثر فتوالکتریک، ۱۲، ۱۵، ۲۵-۲۳، ۳۳، ۴۲، ۵۴، ۵۶، ۱۰۵
- اثر کامپتون، ۱۵، ۲۶، ۲۸، ۲۹، ۴۲، ۵۴، ۱۰۴
- اثر نابهنجار زمین، ۶۹۷، ۷۰۵، ۷۰۸
- اسپین، ۱۲۲، ۲۴۱، ۳۹۶، ۳۹۵، ۴۰۰-۳۹۷، ۴۰۲، ۴۱۶، ۴۲۰-۴۱۸، ۴۳۱، ۴۳۴، ۴۴۰، ۴۴۱، ۴۴۴، ۴۴۷، ۴۵۷، ۴۸۰، ۴۸۱، ۵۷۴-۵۷۲، ۵۹۸، ۶۰۳، ۶۰۷، ۶۱۰، ۶۱۲، ۶۱۹، ۶۲۶، ۶۲۹، ۶۳۰، ۶۴۱، ۶۴۳، ۶۴۵، ۶۴۷، ۶۵۰، ۶۵۶-۶۵۳، ۶۶۰، ۶۶۲، ۶۶۳، ۶۶۷، ۶۶۸، ۶۷۰، ۶۷۱، ۶۷۸-۶۷۳، ۶۸۰، ۶۸۴، ۶۸۲، ۶۹۲، ۶۹۸، ۶۹۹، ۷۰۴، ۷۰۵، ۷۰۷، ۷۰۸، ۷۳۲، ۷۳۷، ۷۶۱، ۷۶۳

اوربیتال، ۳۹۴، ۴۷۹، ۴۸۰، ۶۵۰، ۶۶۲، ۶۶۳،
۶۶۵
ایزواسپین، ۶۱۰-۶۰۷، ۶۳۰
براکت‌های پواسون، ۲۵۴
براکت‌های پواسون، ۲۵۴
بردار موج، ۳۳، ۳۷، ۶۰، ۴۴۶
بردار محوری، ۶۱۱
بردار موج، ۱۵، ۳۳، ۳۵، ۶۰، ۸۰۷، ۸۰۹، ۸۴۸،
۸۵۳، ۸۵۴
بردارهای مستقل خطی، ۱۱۵
بردارهای مستقل خطی، ۱۱۵، ۱۶۳
برهمکنش اسپین-مدار، ۶۹۹، ۷۸۳
برهمکنش اسپین-مدار، ۶۶۹، ۶۷۷، ۶۷۸، ۷۰۰،
۷۰۹، ۷۴۴، ۷۷۲، ۷۷۳، ۷۸۳
برهمکنش چهارقطبی، ۷۵۹، ۷۶۱
برهمکنش دوقطبی-دوقطبی، ۷۶۶، ۷۶۷
بسامد لارمور، ۴۸۷
بسته موج، ۶۱، ۶۵، ۶۸، ۶۹، ۷۴، ۷۶، ۷۷،
۳۷۱
بسته موج گاوسی، ۶۲، ۷۴
بسته موج، ۵۹، ۶۱، ۷۱-۶۳، ۷۳، ۷۴، ۷۸-
۷۶، ۹۲، ۹۴، ۹۵، ۹۷، ۹۹، ۱۰۹،
۲۹۷، ۸۴۷
بسته موج گاوسی، ۶۱، ۶۴، ۷۱، ۷۴
بعد یک فضا، ۱۱۸
بوزون‌ها، ۶۵۴، ۶۵۵، ۶۶۰
بهنجارش هماهنگ‌های کروی، ۴۰۸
پادذره، ۱۴، ۳۲
پایستگی انرژی، ۲۸، ۸۹، ۸۳۲

۷۶۴، ۷۶۶، ۷۷۰، ۷۷۲، ۷۷۷،
۷۷۸، ۷۸۰، ۷۸۳، ۸۰۳، ۸۲۰،
۸۲۱، ۸۳۷، ۸۳۸، ۸۴۷، ۸۶۵،
۸۸۱، ۸۶۶
اسپینور، ۳۹۹، ۴۰۲، ۶۰۲، ۷۶۴
اصل برهنه‌ی، ۴۳، ۴۴، ۹۴، ۲۳۰
اصل طرف پائولی، ۶۶۰، ۶۶۲، ۶۶۳، ۶۶۵
اصل عدم قطعیت هایزنبرگ، ۱۰۸، ۲۹۶
اصل عدم قطعیت هایزنبرگ، ۴۵، ۴۶، ۷۹، ۹۲،
۲۵۹، ۳۳۵، ۳۴۱، ۴۳۹، ۵۶۷، ۸۹۹
اصل مکمل بودن، ۴۲، ۴۳
اصل موضوعی متقارن‌سازی، ۶۵۵
اصل موضوعی پلانک، ۱۹
اصل موضوعی متقارن‌سازی، ۶۵۵
اصل نوردابی، ۲۵۲
اصل همخوانی، ۲۵۸
اصول موضوعی بوهر، ۱۳
اعتبار تقریب بورن، ۸۶۸
اعتبار تقریب نخست بورن، ۸۵۶
الحاقی هرمیتی یک عملگر، ۱۴۹
الحاقی هرمیتی یک عملگر، ۱۲۹
الگوریتم نومروف، ۳۳۵
انتشار بسته‌های موج، ۶۴
اندازه‌گیری، ۲۵، ۳۴، ۴۱، ۴۳، ۴۷-۴۵، ۵۰
انرژی بوهر، ۵۱، ۱۰۱، ۷۰۲
انرژی نقطه‌ی صفر، ۳۲۷، ۳۵۷
انرژی نقطه‌ی صفر، ۳۱۵-۳۱۳، ۳۲۷، ۳۴۲،
۳۴۳، ۴۳۵، ۴۴۸
انیشتین، ۱۲، ۱۳، ۲۱، ۲۴، ۲۵، ۳۲، ۴۹

- پتانسیل کولنی، ۳۷۹، ۴۷۹، ۴۸۳، ۶۵۴، ۶۶۲،
 ۸۳۳
 پانسیلگی احتمال، ۲۴۶، ۲۴۷، ۸۹۹
 پانسیلگی انژی، ۲۸، ۳۰، ۳۱، ۸۴، ۸۷، ۸۹،
 ۸۳۳، ۸۳۲، ۷۹۵، ۲۵۳، ۲۵۲، ۲۴۸
 پانسیلگی تکانه، ۸۵
 پانسیلگی تکانه خطی، ۲۷
 پانسیلگی تکانه‌ی خطی، ۸۳۲، ۲۵۳
 پایه‌ی پیوسته، ۱۶۸
 پایه‌ی کامل، ۲۷۹، ۲۰۶
 پایه‌ی گسسته، ۱۶۷
 پایه‌ی پیوسته، ۱۶۷
 پایه‌ی کامل، ۱۸۲، ۱۸۴، ۲۲۰، ۲۲۶، ۲۲۷،
 ۲۷۷، ۲۸۵، ۳۳۴، ۳۹۹، ۵۸۷-
 ۶۸۸، ۵۸۵
 پایه‌ی گسسته، ۱۲۲، ۱۳۸، ۱۴۵، ۱۶۸، ۳۸۸
 پایه‌ی متعامد بهنجار، ۴۱۰
 پایه‌ی متعامد بهنجار، ۱۳۹، ۱۴۰، ۲۱۵، ۳۸۹،
 ۳۹۸
 پایه‌ی یک فضای برداری، ۱۱۴، ۱۱۵
 پانسیل دلتا، ۳۵۵، ۸۸۱
 پانسیل کولنی، ۲۹۴، ۴۵۶، ۴۶۸، ۶۶۲، ۸۶۲
 پانسیل مرکزی، ۴۸۴، ۴۸۶، ۴۹۶، ۵۱۵، ۸۵۸
 پانسیل چاه مربعی متناهی، ۳۲۱، ۳۲۷
 پانسیل چاه مربعی کروی، ۴۶۰
 پانسیل چاه مربعی متناهی، ۲۹۲،
 ۲۹۴، ۳۱۱، ۳۱۶، ۳۱۷، ۳۲۰
 ۳۳۶، ۳۷۴، ۳۷۶، ۴۶۲، ۸۹۳
 پانسیل دلتا، ۸۸۱
 پانسیل دلتای دوگانه، ۳۴۸، ۳۵۱، ۳۷۶
- پتانسیل گریز از مرکز، ۸۷۶
 پتانسیل مرکزی، ۳۷۹، ۴۵۶-۴۵۳، ۴۶۶، ۴۷۰،
 ۴۸۴، ۵۰۳، ۵۰۶، ۵۷۴، ۶۰۲، ۷۲۸
 پتانسیل مؤثر، ۴۵۶، ۶۶۸
 پتانسیل نوسانگر هماهنگ، ۳۳۹، ۳۷۷، ۴۶۲،
 ۷۸۳، ۸۹۳
 پتانسیل نوسانگر هماهنگ، ۳۳۸، ۴۴۳، ۴۵۰،
 ۴۸۹، ۵۱۲، ۷۸۲
 پتانسیل یوکاوا، ۸۶۷
 پراکنندگی کشسان، ۸۶۶
 پراکنندگی کشسان، ۸۴۳، ۸۴۷، ۸۵۰، ۸۵۶-
 ۸۵۴، ۸۵۸، ۸۶۲، ۸۶۳، ۸۷۷-
 ۸۷۴، ۸۷۹، ۸۸۱
 پله‌ی پتانسیل، ۳۰۱-۲۹۹
 پله‌ی پتانسیل، ۲۹۲، ۲۹۷، ۲۹۸، ۳۰۳، ۳۷۲
 پوزیترون، ۱۴، ۳۲-۳۰، ۵۵، ۶۴۱، ۷۸۳
 پوزیترونیم، ۳۲، ۵۵، ۷۸۳
 پهن‌شدگی بسته موج، ۷۸، ۹۷، ۹۸، ۱۰۰، ۲۸۳
 پیکربندی، ۴۶۶، ۶۵۱، ۶۶۳، ۶۶۴، ۶۷۰-
 ۶۶۷، ۶۷۳، ۶۷۴، ۶۷۷، ۶۸۱، ۶۸۳
 پیکربندی الکترونی، ۶۶۴
 پیکربندی الکترونی، ۶۶۳، ۶۶۹، ۶۸۴
 پیمانه‌ی کولن، ۴۸۵، ۸۰۵
 پیوستگی $\psi(x)$ ، ۲۲۸، ۳۴۷، ۳۵۳، ۳۵۶
 پیون، ۶۰۹، ۶۳۰، ۸۷۹
 تابش جسم سیاه، ۴۲
 تابش جسم سیاه، ۱۲
 تابش جسم سیاه، ۱۲، ۱۷-۱۵، ۴۸، ۵۶

- تصویر شرودینگر، ۷۸۷، ۸۱۹، ۸۳۷
- تصویر هایزنبرگ، ۷۸۶
- تصویر برهمکنش، ۷۸۶، ۷۸۸، ۷۸۹، ۷۹۱
- تصویر دیراک، ۷۸۸
- تصویر شرودینگر، ۳۷۴، ۷۸۶، ۷۸۹، ۸۱۷، ۸۲۱
- تصویر هایزنبرگ، ۷۸۶، ۷۸۷، ۷۸۹، ۸۱۹، ۸۲۱
- ۸۳۷
- تصویرهای مکانیک کوانتومی، ۷۸۵
- تفسیر احتمالاتی، ۱۱۸
- تفسیر احتمالاتی، ۴۵، ۴۷، ۱۲۳، ۴۶۷
- تقارن تعویض، ۶۴۷، ۶۵۴
- تقریب نخست بورن، ۸۶۷، ۸۸۱
- تقریب بی دررو، ۷۹۹، ۸۰۰
- تقریب دوقطبی الکتریکی، ۸۱۱
- تقریب ناگهانی، ۸۰۲-۸۰۰
- تقریب نخست بورن، ۸۵۶، ۸۶۶، ۸۸۱
- تقریب نخست بورن، ۸۵۴، ۸۵۶، ۸۷۴، ۸۸۱
- تقریب نیمه کلاسیکی، ۷۳۲
- تکانه‌ی زاویه‌ای مداری، ۶۴۱، ۶۴۳
- تکانه‌ی زاویه‌ای مداری، ۲۴۱، ۳۸۱، ۳۹۵، ۴۲۶
- ۴۳۵، ۶۶۲، ۶۹۸
- تکانه‌ی زاویه‌ای اسپینی، ۳۹۴، ۵۱۴، ۶۲۰
- تکانه‌ی زاویه‌ای مداری، ۴۹، ۵۶، ۵۷، ۱۰۱
- ۱۰۷، ۱۲۲، ۲۳۳، ۲۴۱، ۲۴۲
- ۲۸۰، ۳۷۹، ۳۸۰، ۳۹۴، ۳۹۵
- ۳۹۷، ۴۰۲، ۴۰۳، ۴۲۹، ۴۳۸
- ۴۵۵-۴۵۳، ۴۸۵، ۴۹۴، ۵۱۳، ۵۷۲
- ۵۷۴، ۶۰۱، ۶۶۳، ۶۶۷، ۷۸۰، ۸۹۱
- توازن تفصیلی، ۷۹۸
- توزیع پلانک، ۲۰
- تابع دلتا، ۷۵۱، ۷۵۲، ۷۹۴، ۸۳۲، ۸۸۸-۸۸۳
- تابع دلتای دیراک، ۱۶۷، ۱۶۸، ۲۰۴
- تابع کار، ۲۴، ۲۶، ۸۲، ۸۳، ۱۰۴، ۱۰۵، ۷۳۶
- تابع گرین، ۸۵۰، ۸۵۲
- تابع موج پادمقارن، ۶۶۰
- تابع موج پادمقارن، ۶۵۷، ۶۵۸
- تابع موج سیستم‌های چندذره‌ای، ۶۵۹
- تابع موج سیستم‌های دودره‌ای، ۶۵۷
- تابع موج سیستم‌های سه‌ذره‌ای، ۶۵۸
- تابع موج مقارن، ۶۵۸، ۶۵۹
- تابع موج نوسانگر هماهنگ، ۳۲۸، ۴۸۹، ۶۸۰
- تابع هوی‌ساید، ۷۵۲، ۸۸۶
- تابع‌های انتگرال‌پذیر مجذوری، ۱۱۸، ۱۶۸، ۴۱۰
- تابع‌های ایری، ۵۰۵، ۷۲۴
- تابع‌های بسط کروی، ۴۶۰-۴۵۸
- تابع‌های عملگرها، ۱۳۵
- تابع‌های لژاندر وابسته، ۴۰۸-۴۰۶
- تابع‌های ویگنر، ۵۷۸
- تابع‌های هنکل کروی، ۴۶۱
- تانسور لوی-چی ویتا، ۴۰۱
- تانسورهای تحویل‌پذیر، ۶۱۴
- تانسورهای تحویل‌ناپذیر، ۶۱۴
- تبدیلات فوریه، ۵۹، ۸۵۱
- تحلیل پاره موج، ۸۶۹، ۹۰۱
- تحول زمانی بسته موج، ۶۸
- ترازهای انرژی اتم هیدروژن، ۷۹
- ترازهای انرژی اتم هیدروژن، ۵۰، ۴۴۳
- ترانهاده‌ی یک ماتریس، ۱۴۹
- تصحیح‌های نسبیته، ۶۶۹
- تصویر برهمکنش، ۷۸۹، ۷۹۱

- توزیع پلانک، ۱۸، ۲۰، ۲۱
- تولید زوج، ۳۳
- تولید زوج، ۳۲-۳۰، ۴۲، ۴۸، ۵۵
- تونل زنی، ۳۰۶، ۳۱۰-۳۰۸، ۷۳۳، ۷۳۶
- ثابت حرکت، ۷۸، ۹۹
- ثابت ریدبرگ، ۵۵، ۴۷۳، ۷۵۹
- ثابت ساختار ریز، ۷۰۱، ۸۵۷
- ثابت استفان-بولتزمن، ۱۷
- ثابت بولتزمن، ۱۹، ۹۰۲
- ثابت پلانک، ۱۲، ۲۵، ۱۰۵، ۱۷۱، ۲۵۸، ۹۰۲
- ثابت حرکت، ۵۸، ۲۴۸، ۲۴۹، ۲۵۵-۲۵۲، ۲۸۳، ۳۴۲، ۵۷۴، ۶۵۵
- ثابت ریدبرگ، ۵۱، ۶۹۶، ۷۴۵، ۸۲۶، ۸۲۸
- ثابت ساختار ریز، ۵۰، ۸۲۸، ۸۳۱، ۹۰۲
- جابه جایی فاز، ۸۷۱
- جابه جایی فاز، ۴۴، ۸۶۰، ۸۶۹، ۸۷۴، ۸۸۱
- جبر جابه جاگر، ۱۳۰، ۱۳۲، ۱۹۴
- جداسازی متغیرها، ۴۴۴، ۴۴۵، ۴۶۹
- جدول تناوبی، ۶۶۳
- جدول تناوبی، ۶۶۰، ۶۶۲، ۶۶۴، ۶۶۹
- جذب یک فوتون، ۷۹۷، ۸۱۰، ۸۱۲
- جریان احتمال، ۲۸۵، ۶۴۶
- جعبه‌ی پتانسیل، ۶۸۳، ۷۷۰، ۷۷۸، ۷۸۲
- جعبه‌ی پتانسیل، ۲۸۳، ۳۴۳، ۳۵۸، ۳۶۵، ۴۴۷
- ۷۷۶، ۷۹۸، ۸۰۳، ۸۳۹
- جفت‌شدگی اسپین-مدار، ۵۸۴، ۶۶۵، ۶۹۷
- ۶۹۸
- جفت‌شدگی اسپین-مدار در هیدروژن، ۶۹۸
- جمع دو تکانه‌ی زاویه‌ای، ۵۸۴
- جمع برداری ایزواسپین‌ها، ۶۰۹
- جمع تکانه‌های زاویه‌ای، ۵۸۳، ۶۰۷
- جمع تکانه‌های زاویه‌ای، ۵۶۹، ۵۹۸، ۵۸۳، ۵۶۹، ۶۰۹
- ۶۳۶، ۶۴۳
- جمع تکانه‌ی‌ها زاویه‌ای، ۵۶۹
- جمع دو تکانه‌ی زاویه‌ای، ۵۸۴، ۵۸۵، ۶۰۲
- ۶۱۰، ۶۲۳
- جمع سه تکانه‌ی زاویه‌ای، ۶۰۲
- چاه پتانسیل، ۳۰۶، ۳۱۵، ۳۷۳، ۷۲۱
- چاه پتانسیل، ۲۶۰، ۲۶۲، ۲۸۴، ۳۰۲، ۳۰۵
- ۳۰۶، ۳۱۱، ۳۱۳، ۳۱۶، ۳۵۵
- ۳۷۱، ۴۸۹، ۵۰۶، ۷۲۱، ۷۲۲
- ۷۲۹، ۷۳۱، ۷۵۵، ۷۶۳، ۸۰۲، ۸۷۲
- چرخش‌ها در مکانیک کوانتومی، ۵۷۱
- چرخش‌های اولبر، ۵۷۶، ۵۷۷
- چرخش‌های بی‌نهایت کوچک، ۵۷۰، ۵۷۲
- چرخش‌های متناهی، ۵۷۱، ۵۷۳، ۶۱۶
- چرخنده‌ی صلب، ۴۱۵، ۴۳۷
- چگالش بوز-انیشتین، ۶۶۰
- چگالش بوزون، ۶۶۰
- چگالی احتمال، ۶۴۶، ۶۵۳، ۸۹۹
- چگالی جریان، ۲۴۷، ۲۶۲، ۲۶۳، ۲۸۵، ۳۷۵
- چگالی جریان احتمال، ۲۴۷، ۸۹۹
- چندجمله‌ای‌های لژاندر، ۴۰۷
- چندجمله‌ای‌های لاگر، ۴۷۵، ۴۷۶، ۴۸۲
- چندجمله‌ای‌های لاگر وابسته، ۴۷۷
- چندجمله‌ای‌های لاگر وابسته، ۴۷۶
- چندجمله‌ای‌های لژاندر، ۴۰۶، ۴۶۰، ۸۸۰
- چندجمله‌ای‌های هرمیت، ۱۴۵، ۳۲۲، ۳۳۲-
- ۳۳۰، ۳۶۱، ۴۸۹

- حالت تک‌تایی، ۶۱۰، ۷۶۱
- حالت سه‌تایی، ۵۹۳
- حالت پادمقارن، ۶۶۰
- حالت تک‌تایی، ۵۹۶، ۶۶۷، ۶۸۴، ۸۷۶
- حالت تک‌تایی اسپینی، ۸۷۸
- حالت سه‌تایی، ۶۶۷، ۷۶۱، ۷۶۲، ۸۶۶
- حالت سه‌تایی اسپینی، ۸۷۸
- حالت مقارن، ۶۵۹، ۶۶۰
- حالت‌های مانا، ۲۴۴
- حالت‌های مقید، ۳۱۹، ۳۵۲، ۳۵۳
- حالت‌های مانا، ۴۹، ۸۰، ۱۸۱، ۲۴۳، ۲۴۴
- حالت‌های عدم قطعیت هایزنبرگ، ۲۸۳، ۳۱۴، ۶۴۶، ۶۸۵، ۶۸۶، ۸۴۷
- حالت‌های متعامد، ۱۲۲
- حالت‌های متعامد بهنجار، ۱۲۲
- حالت‌های مقید، ۵۱، ۲۹۴-۲۹۲، ۳۱۲
- ۳۱۶، ۳۲۱، ۳۲۷، ۳۴۸، ۳۵۵-
- ۳۵۰، ۳۷۴، ۳۷۷، ۴۵۶، ۴۶۱
- ۴۷۹، ۵۰۰، ۵۰۱، ۵۰۸، ۵۱۵
- ۷۲۲، ۷۲۶، ۷۲۷، ۷۲۹، ۷۳۰
- حد کلاسیکی، ۷۸، ۲۸۵، ۳۰۹، ۳۱۲، ۷۲۰
- حرکت تقدیمی توماس، ۶۹۸
- حرکت مرکز جرم، ۴۶۸
- حل عددی معادله‌ی شرودینگر، ۳۳۵، ۳۳۸
- دامنه‌ی پراکندگی، ۸۵۰-۸۴۷، ۸۵۹، ۸۶۲
- ۸۶۵، ۸۶۷، ۸۷۰، ۸۷۹
- دامنه‌ی پراکندگی رو به جلو، ۸۶۲، ۸۸۰
- دترمینان اسلیتر، ۶۵۹
- دلتای کروونکر، ۱۴۵، ۱۶۷
- دوگانگی موج-ذره، ۳۳، ۴۲، ۴۸
- ذره‌های یکسان، ۶۵۷
- ذره‌های مرکب، ۶۵۵، ۶۵۶
- ذره‌های یکسان، ۶۴۵، ۶۵۲، ۶۵۶، ۶۷۱، ۶۸۰
- ۸۶۴
- رابطه‌های جابه‌جایی، ۵۸۴، ۶۰۷، ۶۱۲، ۸۱۸
- رابطه‌های جابه‌جایی، ۱۷۴، ۳۲۵، ۳۸۳-۳۸۰
- ۳۹۷، ۴۰۱، ۴۲۷، ۴۲۹، ۴۳۳
- ۴۳۴، ۴۳۶، ۴۴۱، ۴۷۱، ۵۷۲
- ۵۸۶، ۶۰۷، ۶۱۵، ۶۱۶، ۶۲۱
- ۶۴۲، ۶۴۳، ۶۴۶، ۸۰۸، ۸۱۷
- رابطه‌های جابه‌جایی بن‌دادی، ۱۷۴، ۸۰۸
- رابطه‌های عدم قطعیت هایزنبرگ، ۱۳۴
- رابطه‌های عدم قطعیت هایزنبرگ، ۶۴، ۱۳۲
- ۱۳۴
- رابطه‌ی دوبروی، ۱۸۰
- رابطه‌ی بستاری، ۱۴۵
- رابطه‌ی دوبروی، ۳۳، ۳۴، ۴۶، ۵۳
- رابطه‌ی متعامد بهنجار بودن ضریب‌های
- کلیش-گوردن، ۵۸۸
- رد یک عملگر، ۱۵۲، ۱۶۱
- روش WKB، ۶۸۵، ۶۸۶، ۷۲۲-۷۱۸، ۷۲۸
- ۷۵۷، ۷۵۸، ۷۶۵، ۷۷۷، ۷۷۹
- روش WKB، ۷۲۱
- روش WKB برای پتانسیل کولنی، ۷۳۳
- روش WKB، ۷۳۷
- روش وردشی، ۷۰۹، ۷۱۱، ۷۱۷، ۷۶۵، ۷۷۶
- ۷۸۱
- روش وردشی، ۶۷۹، ۶۸۵، ۶۸۶، ۷۰۸، ۷۰۹
- ۷۱۳، ۷۱۴، ۷۱۷، ۷۳۷، ۷۵۰
- ۷۵۳، ۷۵۷، ۷۷۲، ۷۸۳-۷۷۶

سطح مقطع کولنی، ۸۵۷
شار، ۲۴۷، ۲۹۶، ۲۹۸، ۲۹۹، ۸۴۲، ۸۶۳
شبه بردار، ۶۱۱
شبه نرده‌ای، ۶۱۱
شرایط مرزی، ۳۴۹
شرایط مرزی، ۲۱۰، ۲۹۱، ۲۹۴، ۲۹۶، ۳۰۰
۳۰۳، ۳۰۳، ۳۳۸-۳۳۶، ۳۵۳، ۳۶۳
۳۶۹، ۳۷۱، ۵۰۱، ۵۰۵، ۵۰۷، ۷۳۱
شرط متعامد بهنجار بودن، ۱۴۵، ۱۶۷، ۲۳۱
۳۸۶، ۴۰۷، ۴۴۶، ۵۹۵
شعاع بوهر، ۵۰، ۵۵، ۱۰۱، ۴۷۳، ۴۷۶، ۴۷۸
۴۸۲، ۴۹۷، ۴۹۸، ۵۱۳، ۵۱۵
۶۷۸، ۶۹۷، ۷۱۷، ۷۳۳، ۷۴۶
۷۶۷، ۷۸۰، ۷۸۱، ۸۲۸، ۹۰۲
صورت‌بندی عمومی، ۱۲۰، ۳۷۹، ۳۸۱، ۳۸۲
۴۵۷، ۵۸۴، ۵۹۳، ۷۱۸
ضرب نرده‌ای، ۱۱۴، ۱۱۵، ۱۴۸
ضرب عملگرها، ۱۲۶، ۱۳۰، ۱۵۳
ضرب نرده‌ای، ۱۱۳، ۱۱۴، ۱۱۶، ۱۲۳-۱۱۸
۱۲۵، ۱۷۰، ۱۸۴، ۵۷۶، ۶۱۹، ۶۴۰
ضریب عبور، ۳۰۵
ضریب بازتاب، ۳۰۰، ۳۰۲، ۳۱۷
ضریب عبور، ۳۰۰، ۳۰۶-۳۰۴، ۳۰۹، ۳۱۰
۳۷۶، ۳۷۷، ۷۳۵، ۷۳۶، ۷۶۹
۷۷۰، ۷۸۱
ضریب کلبش-گوردن، ۶۴۳
طول موج دوبروی، ۷۱۸، ۷۲۱
طول موج دوبروی، ۳۴، ۳۶، ۳۷، ۴۷، ۵۸، ۱۰۷
۲۵۸، ۷۱۸، ۷۲۱

زاویه‌های اولیه، ۵۸۲
ساختار ریزاتم هیدروژن، ۷۰۲
ساختار فوق‌ریز، ۷۰۴
سد پتانسیل، ۳۰۲
سد پتانسیل، ۳۰۱، ۳۰۳-۳۰۶، ۳۱۰، ۷۳۳
۷۳۵، ۷۳۶، ۷۸۱
سرعت فاز، ۶۹
سرعت گروه، ۶۶، ۷۱
سرعت فاز، ۶۸-۶۶، ۷۴، ۹۳، ۹۴
سرعت گروه، ۶۶، ۶۷، ۶۹، ۷۴، ۹۳، ۹۴
سرعت گروه بسته‌ی موج، ۶۸
سری بالمر، ۵۴، ۱۰۷
سری بورن، ۸۵۲
سری دایسون، ۷۹۲
سری کلبش-گوردن، ۶۰۶
سری لیمان، ۵۴
سطح مقطع دیفرانسیلی، ۸۷۴
سطح مقطع پراکندگی، ۸۷۰
سطح مقطع دیفرانسیلی، ۸۵۰، ۸۵۴، ۸۵۸
۸۵۹، ۸۶۷، ۸۶۸، ۸۷۶، ۸۷۸
سطح مقطع کشسان کل، ۸۶۳
سطح مقطع کل، ۸۶۲، ۸۸۰، ۸۸۱
سطح مقطع پراکندگی، ۸۵۴، ۸۶۴
سطح مقطع دیفرانسیلی، ۸۴۱، ۸۴۲، ۸۴۵
۸۵۰-۸۴۷، ۸۵۵، ۸۵۶، ۸۶۱، ۸۶۷-۸۶۷
۸۶۵، ۸۷۵، ۸۷۶، ۸۸۱-۸۷۸، ۹۰۱
سطح مقطع غیرکشسان کل، ۸۶۳
سطح مقطع کشسان کل، ۸۷۹، ۸۸۰
سطح مقطع کل، ۸۴۲-۸۶۲، ۸۶۷، ۸۶۸
۸۷۱، ۸۷۴، ۸۷۹، ۸۸۱

عملگر پایین برنده، ۸۰۸
عملگر تانسوری، ۶۱۴، ۶۱۵
عملگر تحول زمانی، ۲۴۲، ۲۵۱، ۷۸۶، ۷۹۱
عملگر تصویر، ۱۲۹، ۱۳۰، ۱۸۲، ۱۸۳، ۱۸۵
۲۲۰، ۲۱۵، ۲۱۲، ۲۰۶، ۱۹۶، ۱۹۴
عملگر جایگشت، ۲۲۳، ۶۴۸، ۶۵۸
عملگر چرخش بی نهایت کوچک، ۵۷۳
عملگر چگالی، ۲۴۷، ۲۴۸
عملگر خطی، ۱۲۷، ۱۳۶، ۱۴۸، ۲۴۷
عملگر لاپلاسی، ۱۲۶، ۱۷۳، ۲۳۲، ۸۹۱
عملگر نابودی، ۸۱۰
عملگر زنده‌ای، ۳۸۲، ۶۱۸، ۶۱۹
عملگر هرمیتی، ۱۲۹، ۱۳۴-۱۳۱، ۱۳۹، ۲۱۳
۲۲۱، ۲۲۶، ۲۳۲، ۳۲۳
عملگر یکانی، ۱۲۶، ۱۳۷، ۱۴۰، ۱۷۶، ۲۲۳
۲۴۳
عملگرهای تانسوری، ۶۱۵، ۶۱۶
عملگرهای نردبانی، ۴۳۷
عملگرهای تانسوری، ۵۶۹، ۶۱۷-۶۱۴
عملگرهای تکانه‌ی زاویه‌ای، ۶۰۷
عملگرهای تکانه‌ی زاویه‌ای، ۳۸۶
عملگرهای خطی، ۱۱۱، ۱۲۷
عملگرهای زوج و فرد، ۱۷۷
عملگرهای نردبانی، ۴۱۲
عنصر ماتریسی کاهش یافته، ۶۴۳، ۷۵۹
فرمول ریلی-جینز، ۱۹
فرمول وین، ۱۷
فرمیون‌ها، ۶۵۴، ۶۵۵
فضای هیلبرت، ۱۱۴، ۱۶۸

طول موج کامپتون، ۲۸، ۸۶، ۱۰۵، ۱۰۶، ۹۰۲
طیف آمیخته، ۲۹۴
طیف پیوسته، ۲۹۳، ۴۶۲
طیف گسسته، ۲۹۲
عامل لانده، ۳۹۶، ۷۰۷، ۷۰۸
عدد کوانتومی، ۴۵۵، ۵۱۱، ۶۵۰
عدد اشغال، ۳۲۴، ۶۵۰، ۸۰۹
عدد کوانتومی، ۵۱، ۵۶، ۳۱۳، ۳۸۴
۳۹۳، ۳۹۷، ۳۹۸، ۴۰۲، ۴۰۵
۴۱۵، ۴۳۷، ۴۴۹، ۴۵۳، ۴۵۴
۴۵۷، ۴۶۴، ۴۷۳، ۴۷۹، ۴۸۴-
۴۸۲، ۴۹۱، ۶۰۷، ۶۶۲، ۶۹۴
۷۳۲، ۷۳۸
عمر میانگین، ۸۳۹
عمر میانگین، ۳۲، ۴۶، ۱۰۹، ۱۱۵، ۸۱۶، ۸۲۷
۸۲۸، ۸۳۰، ۸۳۱، ۸۳۹
عملگر آفرینش، ۸۱۰
عملگر بالابرنده، ۸۰۸
عملگر برداری، ۶۲۰
عملگر پارینه، ۴۱۰
عملگر تصویر، ۲۰۶، ۲۱۲
عملگر چرخش، ۵۷۱
عملگر هرمیتی، ۱۷۶، ۲۰۵
عملگر یکانی، ۱۴۰، ۱۴۱
عملگر آفرینش، ۸۰۷، ۸۱۰
عملگر برداری، ۳۹۷، ۶۰۷، ۶۱۰، ۶۱۱، ۶۱۳
۶۱۵، ۶۲۰-۶۱۸، ۶۲۲، ۶۴۲
عملگر پادهرمیتی، ۱۲۹، ۱۳۴، ۱۴۰
عملگر پارینه، ۱۲۶، ۱۷۷-۱۷۵، ۲۲۰، ۲۵۳
۲۵۴، ۲۹۴، ۲۹۵

مقدار چشمداشتی، ۱۲۹، ۱۳۴، ۱۸۵،
۱۸۶، ۲۱۲، ۲۳۶، ۲۴۷، ۲۴۸،
۲۶۱، ۲۶۸، ۲۸۷، ۴۰۵، ۴۳۴،
۴۹۸، ۴۹۹، ۵۱۱، ۶۱۱، ۶۴۱،
۷۰۹، ۷۸۷، ۸۳۷، ۸۹۹

مکانیک ماتریسی، ۱۸۱

مکانیک موجی، ۱۴

مکانیک ماتریسی، ۱۴، ۱۱۱، ۱۷۸، ۱۸۱

مکانیک موجی، ۱۴، ۳۵، ۱۱۱، ۱۱۸، ۱۲۰،

۱۷۸، ۱۸۰، ۱۸۱، ۲۵۷

مگنتون بوهر، ۴۸۵، ۴۸۷، ۷۰۵، ۷۰۷، ۹۰۲

موج تخت وایچیده، ۸۶۰

موج‌های مادی، ۳۳، ۳۵، ۳۶، ۷۹

مولد چرخش‌های فضایی بی‌نهایت کوچک، ۵۷۲

ناحیه‌ی مجاز کلاسیکی، ۳۴۰، ۷۲۲، ۷۲۹، ۷۳۴

ناحیه‌ی ممنوع کلاسیکی، ۳۰۲، ۳۶۱، ۳۶۲

۷۳۴

نامساوی شوارتز، ۱۲۴

نامساوی مثلثی، ۱۲۴

نامساوی شوارتز، ۱۲۱، ۱۲۴، ۱۳۳، ۲۱۱

نامساوی مثلثی، ۱۲۲، ۱۲۵، ۲۱۱

نسبت ژیرومغناطیسی، ۳۹۶، ۷۰۷

نظریه‌ی اختلال غیرواگن، ۶۸۷، ۶۹۲، ۷۳۹

۷۴۰، ۷۸۰

نظریه‌ی اختلال مستقل از زمان، ۶۸۶، ۶۹۰

۹۰۰

نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان، ۷۹۰

نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان، ۷۸۵، ۷۸۹

۷۹۱

ماتریس‌های پاتولی، ۳۹۸، ۴۰۰، ۴۰۱، ۴۲۰

۴۳۹، ۶۲۲، ۸۹۹

مدل بوهر برای اتم هیدروژن، ۳۷۹

مدل رادرفورد، ۴۸

مسأله‌ی ویژه‌مقدار، ۱۳۸، ۱۶۲، ۱۷۸، ۴۵۶

۷۹۲

مسأله‌ی ویژه‌مقدار، ۱۳۸، ۱۶۲، ۱۶۴، ۲۱۰

۳۲۳، ۶۸۶، ۸۴۷، ۸۴۸

مشاهده‌پذیرها، ۲۲۶، ۲۳۲، ۲۳۳، ۲۴۱، ۲۵۴

۲۷۶، ۲۸۸

مشاهده‌پذیرهای سازگار، ۲۳۹، ۲۴۰، ۲۸۸

معادله‌ی مشخصه، ۷۴۸

معادله‌ی بسل کروی، ۴۵۸

معادله‌ی حرکت عملگرها، ۷۸۹

معادله‌ی حرکت هایزنبرگ، ۷۸۹-۷۸۷، ۸۱۷

معادله‌ی دیفرانسیل لژاندر، ۴۰۶

معادله‌ی شرودینگر مستقل از زمان، ۴۶۹، ۶۴۶

معادله‌ی شرودینگر مستقل از زمان، ۲۴۴، ۳۱۳

۳۷۱، ۳۷۲، ۴۳۵، ۴۴۴، ۴۵۳

۴۶۰، ۴۶۷، ۵۱۲، ۵۱۱، ۶۴۸، ۹۰۰

معادله‌ی شرودینگر وابسته به زمان، ۲۴۳

معادله‌ی شرودینگر وابسته به زمان، ۲۴۲، ۲۴۴

۲۴۶، ۴۴۴، ۴۴۶، ۴۶۷، ۶۴۶، ۸۹۹

معادله‌ی شعاعی اتم هیدروژن، ۴۷۰، ۴۷۶

معادله‌ی شعاعی یک ذره‌ی آزاد، ۴۵۷

معادله‌ی کلاین-گوردون، ۳۷۵

معادله‌ی مشخصه، ۱۶۳، ۱۶۵، ۱۹۵، ۴۱۷

۴۱۹، ۴۲۱، ۷۳۹

مقدار چشمداشتی، ۱۳۴، ۲۴۸، ۷۰۰

ویژه‌حالت، ۱۳۷، ۱۷۶، ۱۹۴، ۲۲۷، ۲۳۵

۲۴۱-۲۳۸، ۲۶۱، ۲۷۴، ۲۸۴، ۳۲۸

۳۳۰، ۳۸۴، ۳۸۶، ۴۱۰، ۴۱۴

۴۲۶، ۴۳۰، ۴۳۱، ۴۳۵، ۴۳۶

۴۳۸، ۴۶۰، ۵۱۰، ۵۱۳، ۵۱۴

۵۷۸، ۵۸۸، ۶۳۰، ۶۵۴، ۶۸۷

۶۹۱، ۶۹۴، ۷۰۹، ۷۱۱، ۷۹۰

۷۹۹، ۸۰۱، ۸۰۷

ویژه‌مقدار، ۱۳۸، ۱۳۹، ۱۶۳، ۱۶۵، ۱۶۶، ۱۶۹

۱۷۹-۱۹۷، ۱۹۵، ۲۰۹، ۲۱۰، ۲۲۱

۲۲۷، ۲۳۳، ۲۳۵، ۲۶۷، ۲۶۸

۲۸۴، ۳۲۷، ۳۴۸، ۳۸۶، ۳۸۷

۴۰۰، ۴۰۴، ۴۱۰، ۴۱۶، ۴۳۰

۴۳۶، ۴۳۸، ۴۴۱، ۴۵۴، ۴۵۵

۵۱۴، ۶۴۸، ۶۸۹، ۶۹۴، ۶۹۵

۷۳۹، ۷۴۴، ۷۴۸، ۷۴۹، ۷۸۰

ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای یک عملگر، ۱۳۷

هماهنگ‌های کروی، ۵۸۰، ۵۸۱

هماهنگ‌های کروی، ۴۰۵، ۵۸۰، ۷۵۹

نظریه‌ی اختلال واگن، ۶۹۴، ۷۴۲، ۷۴۵، ۷۵۹

۷۶۴

نقطه‌های بازگشت کلاسیکی، ۳۷۲

نقطه‌های بازگشت کلاسیکی، ۲۹۲، ۳۱۰، ۳۶۱

۷۲۲، ۷۲۱

نمادگذاری طیفی، ۶۷۰

نمادگذاری براکت، ۲۷۹

نمادگذاری طیفی، ۶۶۵، ۶۷۰، ۶۸۳، ۷۰۷

نمایش ماتریسی، ۱۵۵

نمایش مکان، ۱۷۱، ۱۷۳، ۲۳۲، ۳۲۸

نمایش تکانه، ۱۷۰، ۱۷۱، ۱۷۳، ۱۷۵

نمایش ماتریسی، ۱۴۵، ۱۴۶، ۱۴۹، ۱۵۲

۱۵۴، ۱۵۵، ۱۶۲، ۳۸۸، ۳۹۰

۳۹۹، ۵۷۸، ۶۳۴

نمایش ماتریسی عملگرها، ۱۴۸، ۳۳۲

نمایش مکان، ۱۶۹، ۱۷۰، ۱۷۵-۱۷۲

۱۸۰، ۲۳۲، ۲۴۳، ۲۴۶، ۳۲۸

۳۸۰، ۳۸۸، ۶۴۷

نمایش هندسی، ۳۹۵-۳۹۲

نوسانگر هماهنگ همسانگرد، ۴۶۵

نوسانگر هماهنگ همسانگرد، ۸۳۰

نوسانگر هماهنگ همسانگرد، ۴۵۰، ۴۵۱، ۴۶۲

۴۶۵، ۴۶۶، ۷۷۷، ۷۷۸، ۸۳۹

وارون یک عملگر، ۱۳۶، ۱۳۸

وارون یک ماتریس، ۱۵۰، ۱۵۱

واگنی تبدیلی، ۶۵۴

ویژه‌بردارها، ۱۶۴، ۱۶۵، ۲۱۴، ۲۱۷، ۲۶۸

۴۱۸، ۴۴۰، ۶۸۷

ویژه‌تابع‌ها، ۱۷۶، ۲۱۰، ۲۳۳، ۴۰۴، ۶۹۲