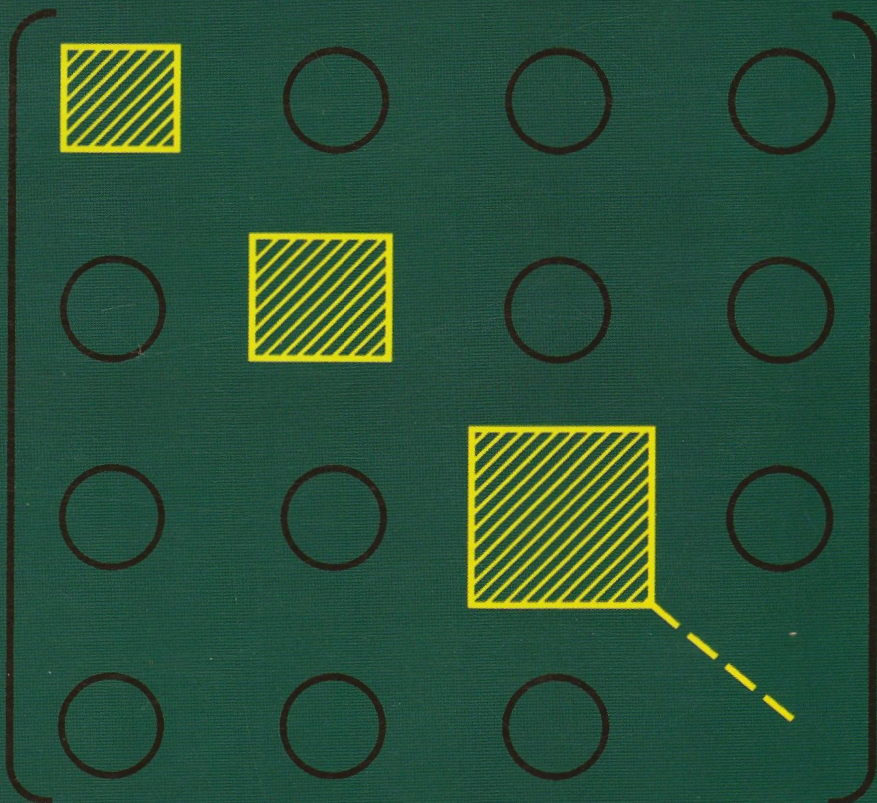


مکانیک کوانتومی مدرن

نویسنده : جون جان . ساکورایی

(ویرایش تجدیدنظر شده)



ترجمه : امیر حسین قادری



مکانیک کوانتومی مدرن

(ویرایش تجدیدنظر شده)

تالیف:

جی. جی. ساکورایی
دانشگاه کالیفرنیا، لوس آنجلس

ویراستار:

سان فو تون
دانشگاه هاوایی، مانوا

مترجم:

امیر حسین قادری

ویراستار:

دکتر محمد علی ملکی

سرشناسه	: ساکورایی، جون جان، ۱۹۳۳-۱۹۸۲ م. Sakurai, Jun John
عنوان و نام پدیدآور	: مکانیک کوانتومی مدرن / مترجم امیرحسین قادری.
مشخصات نشر	: تهران: به‌آوران: کلک زرین، ۱۳۸۹.
مشخصات ظاهری	: ۵۵۲ ص: مصور.
شابک	: ۹۷۸-۶۰۰-۵۵۱۶-۷۷-۷
وضعیت فهرست‌نویسی	: فیبا
یادداشت	: عنوان اصلی: Modern quantum mechanics
یادداشت	: کتابنامه: ص. ۵۵۵-۵۵۶.
موضوع	: کوانتوم
شناسه افزوده	: قادری امیرحسین، مترجم
رده‌بندی کنگره	: ۱۳۸۹ م۲/س/۱۲/۱۷۴/۱۷۴ QC
رده‌بندی دیویی	: ۵۳۰/۱۲
شماره کتابشناسی ملی	: ۲۱۲۶۹۳۹



عنوان کتاب	: مکانیک کوانتومی مدرن
مترجم	: امیرحسین قادری
ویراستار	: دکتر محمدعلی ملکی
ناشر	: انتشارات به‌آوران، انتشارات کلک زرین
ناظر چاپ	: باقر دشتی میاب
نوبت چاپ	: اول - ۱۳۹۰
شمارگان	: ۱۱۰۰ جلد
لیتوگرافی	: نگین - ۶۶۴۹۲۶۴۱
چاپ و صحافی	: به‌آوران - ۶۶۹۷۵۹۳۵
قیمت	: ۹۵۰۰ تومان
شابک	: 978-600-5516-77-7

تهران، میدان انقلاب، خیابان ۱۲ فروردین، کوچه نوروز، پلاک ۱۶.

طبقه دوم، پخش کتاب دشتی

تلفن: ۰۹۱۲۴۳۴۲۷۴۱-۰۹۳۹۷۳۶۷۹۰۱-۶۶۴۰۵۰۷۳-۶۶۴۰۱۸۷۸

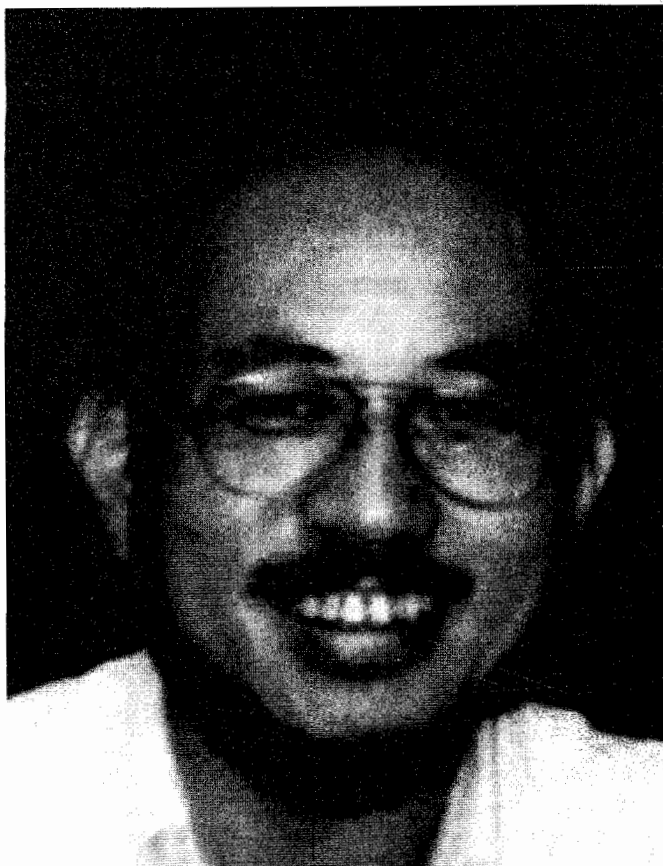
مرکز پخش

یادداشت مترجم:

کتاب مکانیک کوانتومی نوشته‌ی ساکورایی یکی از زیباترین و غنی‌ترین متون در زمینه‌ی مکانیک کوانتومی است. پرداخت بی‌باکانه‌ی ساکورایی نسبت به مسأله‌های ریز و درشت کوانتوم در این کتاب بسیار جالب و مثال‌زدنی است. کمتر مسأله‌ی عمده‌ای در مکانیک کوانتومی وجود دارد که در این کتاب به آن اشاره نشده باشد. مفاهیمی همچون تداخل سنجی نوترون، انتگرال‌های مسیر فاینمن و نامساوی بل در این جا به تفصیل، مورد بحث قرار گرفته است. مکانیک کوانتومی مدرن برای دانشجویان سال اول کارشناسی ارشد نگاشته شده است و برای دانشجویانی که مطالعاتی در حد کارشناسی در کوانتوم داشته‌اند مناسب است.

پیش از هر چیز جا دارد که در این مجال کوتاه مراتب تشکر خود را از تمام اساتید گران‌قدری که همواره وام‌دارشان خواهم بود به‌جا آورم. از جناب آقای دکتر محمدعلی ملکی که ویراستاری کتاب را بر عهده گرفتند به‌طور ویژه تشکر می‌کنم. از جناب آقای دکتر سعید مهدوی‌فر که مکانیک کوانتومی را به من آموخت صمیمانه سپاس گزارم. همچنین از اساتید گران‌قدر گروه فیزیک دانشگاه زنجان، به‌خصوص جناب آقای دکتر امیرحسین درونه و جناب آقای دکتر علی نجفی، نهایت تشکر را دارم. از پدر، مادر و همسر مهربانم که در تمام مراحل کار ترجمه، پشتیبان و حامی من بودند نیز قدردانی می‌کنم.

ترجمه‌ی این کتاب، به پیشنهاد دوست ارجمندم آقای رسول کرمی در سال ۱۳۸۷ آغاز شد و با مساعدت جناب آقای دشتی، مدیر محترم نشر به‌آوران به مرحله‌ی چاپ رسید. امیدوارم که این اثر مورد قبول نظر حق تعالی و نیز اهل علم این سرزمین بیفتد و بتواند گامی هرچند کوچک در راستای پیش‌برد علم در ایران باشد.



جی. جی. ساکورایی ۱۹۸۲-۱۹۳۳

یادبود*

جان جون ساکورایی در سال ۱۹۳۳ در توکیو به دنیا آمد و در سال ۱۹۴۹، زمانی که در مقطع متوسطه درس می‌خواند به آمریکا آمد. وی در دانشگاه کورنل درس خواند و توانست در سال ۱۹۵۸ مدرک دکترای خود را اخذ نماید. سپس به‌عنوان استادیار فیزیک در دانشگاه شیکاگو برگزیده شد و در سال ۱۹۶۴ به‌عنوان پروفیسور معرفی گردید. جان تا زمانی که به دانشگاه کالیفرنیا در لس‌آنجلس برود، در شیکاگو ماند. وی در طول زندگی خود ۱۱۹ مقاله در زمینه‌ی فیزیک نظری و ذرات بنیادی نوشت که هر یک به‌خوبی چندین کتاب و تک‌نگاری در دو زمینه‌ی کوانتوم و ذرات بنیادی بودند.

* این قسمت توسط ویرانستار نگاشته شده است. همچنین ترجمه‌ی این بخش، توسط خانم مهسا مغزی صورت گرفته است (یادداشت مترجم).

قواعد فیزیک نظری، هدف عمده‌ی خود را در فرمول‌بندی دنیای فیزیکی دنبال می‌کنند که در ابتدا به صورت کوتاه و مختصر و یا جامع هستند. از آن‌جا که طبیعت دقیق و پیچیده است، فعالیت و کشف پدیده‌های جدید در فیزیک نظری نیازمند جسارت و ریسک کردن است. آنچه ساکورایی را از دیگران جدا می‌کرد، بینش فوق‌العاده و حس ششم او بود. بدون اغراق می‌توانم بگویم که بیشترین مطالبی که در فیزیک ذرات درک کرده‌ام از مقالات و راهنمایی‌های او بوده است.

زمانی که ساکورایی فارغ‌التحصیل شده بود، نظریه‌ی $V-A$ که امروزه با نام برهمکنش ضعیف شناخته می‌شود را پیشنهاد کرد و هم‌زمان با او و به‌طور مستقل، ریچارد فاینمن، ماری گل‌من، رابرت مارشاک و جورج سادارشان نیز این نظریه را ارائه دادند. در سال ۱۹۶۰، او در وقایع سالانه‌ی فیزیک، نظریه‌ی خود را که یکی از مهم‌ترین و بی‌نظیرترین وقایع بود، منتشر کرد. این نظریه اولین اقدام جدی برای ایجاد نظریه‌ی جاذبه‌ی قوی بر پایه‌ی آبل‌ی و غیرآبل‌ی ناوردایی پیمانه‌ای بود. این اقدامات تأثیرگذار، نظریه‌پردازان را بر آن داشت تا برای فهم مکانیزم جرم تعمیم‌یافته برای میدان‌های پیمانه‌ای تلاش کنند. این مسأله امروزه به نام مکانیزم Higgs شناخته می‌شود. از جهت بدینده‌شناسی، ساکورایی شدیداً از مدل غالب مزون‌های برداری در دینامیک هاردون دفاع می‌کرد. او اولین کسی بود که درباره‌ی به هم آمیختن ω و ϕ اظهاراتی را بیان نمود. در واقع او سهم به‌سزا و مهمی در شناخت پدیده‌های فیزیک ذرات داشت. همچنان که همیشه علاقه‌ی زیادی به فعالیت‌ها و مشاهدات آزمایشگاهی داشت. من جان جون ساکورایی را بیش از ۲۵ سال می‌شناختم و همواره او را نه تنها به دلیل توانایی وسیعش به عنوان یک فیزیک‌دان نظری، بلکه به خاطر مهربانی و روح بلندش تحسین می‌کردم.

با مرگ جان جون، اندوه فراوانی به جامعه‌ی فیزیک وارد شد. مرگ او برای من بسیار سخت و دشوار بود. به همین جهت من صمیمانه سپاسگزارم به خاطر اینکه موقعیتی پیش آمد تا او بتواند دست‌نوشته‌های خود را در کوانتوم مدرن، جهت چاپ، تصحیح و تکمیل کند. برای من هیچ هدیه‌ای بهتر از این نیست که بتوانم احترام و علاقه‌ی خود را به جان جون بفهمانم.

۱ مفاهیم بنیادی

۱۳ آزمایش اشترن - گرلاخ
۲۲ ۲.۱ کت‌ها، براها و عملگرها
۳۰ ۳.۱ کت‌های پایه و نمایش ماتریسی
۳۷ ۴.۱ اندازه‌گیری‌ها، مشاهده‌پذیرها و روابط عدم قطعیت
۵۲ ۵.۱ تغییر پایه‌ها
۵۷ ۶.۱ مکان، تکانه و انتقال
۶۸ ۷.۱ توابع موج در فضای تکانه و مکان
۷۸ مسائل

۲ دینامیک کوانتومی

۸۷ ۱.۲ تحول زمانی و معادله‌ی شرودینگر
۱۰۱ ۲.۲ تصویر شرودینگر در برابر تصویر هایزنبرگ
۱۱۱ ۳.۲ نوسان گر هماهنگ ساده
۱۲۱ ۴.۲ معادله‌ی موج شرودینگر
۱۳۴ ۵.۲ انتشارگرها و انتگرال مسیر فاینمن
۱۴۹ ۶.۲ پتانسیل‌ها و تبدیلات پیمانه‌ای
۱۷۲ مسائل

۳ نظریه‌ی تکانه‌ای زاویه‌ای

۱۸۳ ۱.۳ چرخش و روابط جابه‌جایی تکانه‌ی زاویه‌ای
۱۹۰ ۲.۳ سیستم اسپین $\frac{1}{2}$ و چرخش‌های محدود
۲۰۲ ۳.۳ $SO(3)$ ، $SU(2)$ و چرخش‌های اویلر
۲۰۹ ۴.۳ عملگرهای چگالی و آنسامبل‌های آمیخته در مقابل آنسامبل‌های خالص
۲۲۴ ۵.۳ ویژه‌مقادیر و ویژه‌حالت‌های تکانه‌ی زاویه‌ای
۲۳۴ ۶.۳ تکانه‌ی زاویه‌ای مداری
۲۴۴ ۷.۳ جمع تکانه‌های زاویه‌ای
۲۶۱ ۸.۳ مدل نوسان گر شوینگر برای تکانه‌ی زاویه‌ای
۲۶۸ ۹.۳ اندازه‌گیری همبستگی اسپین و نامساوی بل
۲۷۸ ۱۰.۳ عملگرهای تانسوری
۲۸۹ مسائل

۴ تقارن در دینامیک کوانتومی

۲۹۷ ۱.۴ تقارن‌ها، قوانین پایستگی و تبهگنی
۳۰۰ ۲.۴ تقارن‌های گسسته، پاریته یا وارونی فضایی
۳۱۲ ۳.۴ انتقال شبکه به‌عنوان یک تقارن گسسته
۳۱۷ ۴.۴ تقارن گسسته‌ی وارونی زمانی
۳۳۶ مسائل

۵ روش‌های تقریبی

۳۳۹ ۱.۵ نظریه‌ی اختلال مستقل از زمان: حالت غیرتبهگن
۳۵۴ ۲.۵ نظریه‌ی اختلال مستقل از زمان: مورد تبهگن
۳۶۱ ۳.۵ اتم‌های هیدروژن‌گونه: ساختار ریز و اثر زیمان
۳۷۲ ۴.۵ روش‌های وروشی
۳۷۶ ۵.۵ پتانسیل‌های وابسته به زمان: تصویر برهم‌کنش
۳۸۶ ۶.۵ نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان
۳۹۸ ۷.۵ کاربردهایی برای برهم‌کنش با میدان تابشی کلاسیکی
۴۰۵ ۸.۵ جابه‌جایی انرژی و عرض واپاشی
۴۱۰ مسائل

۶ ذرات همسان

۴۲۳ ۱.۶ تقارن جایگشتی
۴۲۷ ۲.۶ اصل موضوعه‌ی متقارن‌سازی
۴۲۹ ۳.۶ سیستم دو الکترونی
۴۳۳ ۴.۶ اتم هلیوم
۴۳۸ ۵.۶ تقارن جایگشتی و جدول‌های یانگ
۴۴۶ مسائل

۷ نظریه‌ی پراکندگی

۴۴۹ ۱.۷ معادله‌ی لیپمن - شوینگر
۴۵۶ ۲.۷ تقریب بورن
۴۶۱ ۳.۷ قضیه‌ی اپتیکی
۴۶۳ ۴.۷ تقریب ایکونال
۴۶۶ ۵.۷ حالت‌های ذره‌ی آزاد: موج‌های تخت در مقابل موج‌های کروی
۴۷۲ ۶.۷ روش موج‌های پاره‌ای

فهرست مطالب

۴۸۵	۷.۷ پراکندگی با انرژی پایین و حالت‌های مقید.....
۴۹۴	۸.۷ پراکندگی تشدید.....
۴۹۷	۹.۷ ذرات یکسان و پراکندگی.....
۴۹۸	۱۰.۷ ملاحظات تقارنی در پراکندگی.....
۵۰۱	۱۱.۷ فرمول‌بندی وابسته به زمان پراکندگی.....
۵۰۷	۱۲.۷ پراکندگی غیرکشسان الکترون - اتم.....
۵۱۳	۱۳.۷ پراکندگی کولنی.....
۵۲۱	مسائل.....

پیوست‌ها

۵۲۷	پیوست الف.....
۵۴۰	پیوست ب.....
۵۴۲	پیوست ج.....
۵۴۹	کتابشناسی.....
۵۵۱	پیشنیازهایی برای این کتاب.....

فصل اول

مفاهیم بنیادی

انقلابی که در فهم ما از پدیده‌های میکروسکوپیکی در ۲۷ سال اول قرن بیستم رخ داد، در تاریخ علوم طبیعی بی سابقه است. در این بین نه تنها چند محدودیت بر فیزیک کلاسیک اعمال شد، بلکه تئوری‌های دیگری پیدا شد که جایگزین تئوری‌های فیزیک کلاسیک گردید. این تئوری‌ها هم دامنه‌ی کاربرد وسیع تری داشتند و هم به مراتب دارای قابلیت اجرای بهتری بودند.

روش سنتی برای مطالعه‌ی مکانیک کوانتومی، دنبال کردن دستاوردهای تاریخی (قانون تابش پلانک، تئوری گرمای ویژه‌ی انیشتین - دیبای، اتم بوهر، ماده موج روبروی و غیره) و مطالعه‌ی دقیق برخی از آزمایشات بنیادین نظیر اثر کامپتون، آزمایش فرانک - هرتز و آزمایش دیوسون - گرمر - تامپسون است. با این روش مطالعه می‌توانیم درک کنیم که چطور فیزیکدانان در ربع اول قرن بیستم مجبور شدند، کم کم مفاهیم فیزیک کلاسیک را کنار بگذارند و چطور با وجود شروع‌های غلط و بازگشت‌های اشتباه در پایان، شخصیت‌های بزرگ (هایزنبرگ، شرودینگر و دیگران) موفق به فرمول‌بندی مکانیک کوانتومی به صورتی که امروزه می‌شناسیم شدند.

با این وجود، در این کتاب به دستاوردهای تاریخی نمی‌پردازیم. به جای آن، با مثالی شروع می‌کنیم که شاید بیشتر از هر مثال دیگری روشن‌کننده‌ی نارسایی مفاهیم کلاسیک، به عنوان یک روش بنیادی باشد. امیدواریم خواننده با وجود این شوک ناگهانی که در ابتدا با آن مواجه می‌شود بتواند خود را با روش تفکر کوانتوم مکانیکی وفق دهد.

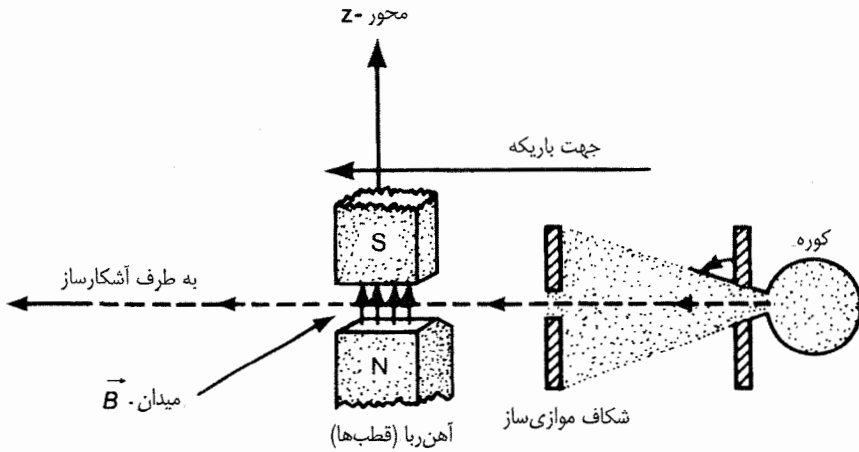
۱.۱ آزمایش اشترن - گرلاخ

آزمایشی که در این بخش به شرح آن می‌پردازیم، آزمایش اشترن گرلاخ است. این آزمایش در سال ۱۹۲۱ توسط ا. اشترن معرفی شد و در سال ۱۹۲۲ توسط او و همکارش دلیو. گرلاخ در فرانکفورت انجام شد. این آزمایش با وضعیتی غم‌انگیز، الزام یک عزیمت انقلابی از مفاهیم مکانیک کلاسیک را محرز می‌کند. در بخش‌های بعدی فرمول‌بندی اساسی مکانیک کوانتومی با چند روش مسلم ارائه می‌شود اما

همیشه آزمایش اشترن گرلاخ به عنوان پس زمینه‌ی ذهن ما باقی می‌ماند. به طور عملی یک سیستم دو حالته از نوع اشترن گرلاخ، کمتر کلاسیکی و بیشتر کوانتومی است. فهم قوی و درست سیستم‌های دو حالته برای هر دانشجوی کنجکاو‌ی که به بررسی مکانیک کوانتومی می‌پردازد بسیار مفید است. به همین دلیل در این کتاب مکرراً به مسائل دو حالته بازمی‌گردیم.

شرح آزمایش اشترن - گرلاخ

اکنون شرح خلاصه‌ای از آزمایش اشترن - گرلاخ را ارائه می‌دهیم، که در بیشتر کتاب‌های فیزیک مدرن به آن اشاره شده است. ابتدا اتم‌های نقره (Ag) در یک کوره حرارت داده می‌شوند. کوره دارای سوراخی است که برخی از اتم‌های نقره می‌توانند از میان آن به بیرون بگریزند. به طوری که در شکل ۱-۱ نشان داده شده است باریکه‌های خروجی از میان یک موازی کننده عبور می‌کنند و سپس وارد یک میدان مغناطیسی غیریکنواخت می‌شوند. این میدان به وسیله‌ی دو قطب که یکی از آن‌ها لبه‌ی بسیار تیزی دارد، تولید می‌شود.



شکل ۱-۱: آزمایش اشترن گرلاخ

در اینجا باید تأثیر میدان مغناطیسی را بر روی اتم‌های نقره بررسی کنیم. برای مقصود ما مدل ساده شده‌ی اتم نقره کفایت می‌کند. اتم نقره از هسته و ۴۷ الکترون ساخته شده است که تعداد ۴۶ الکترون از این ۴۷ تا با تقارن کروی دیده می‌شوند و بنابراین تکانه‌ی زاویه‌ای خالص ندارند. اگر از چرخش هسته که به بحث ما مربوط نمی‌شود صرف نظر کنیم، می‌بینیم که این اتم در مجموع یک تکانه‌ی زاویه‌ای دارد که تنها ناشی از اسپین ذاتی چهل و هفتمین الکترون در لایه‌ی (5s) است. ۴۷ الکترون به هسته‌ای متصل‌اند که 2×10^5 بار سنگین‌تر از الکترون است. در نتیجه می‌توان بیان کرد که کل گشتاور مغناطیسی این اتم

سنگین، برابر با گشتاور مغناطیسی ۴۷ امین الکترون است. به عبارت دیگر، گشتاور مغناطیسی با اسپین الکترون S متناسب است.

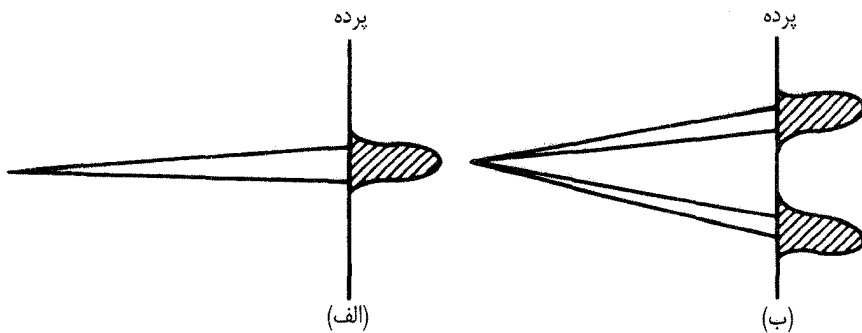
$$\mu \propto S \quad (1-1-1)$$

که ثابت تناسب دقیقاً برابر با $e/m_e c$ است (در این کتاب $e < 0$ است). این دقت تا ۰/۲٪ است.

از آنجا که انرژی برهم کنشی گشتاور مغناطیسی با میدان مغناطیسی برابر با $-\mu \cdot \mathbf{B}$ است، مؤلفه z نیرویی که بر اتم وارد می شود برابر است با:

$$F_z = \frac{\partial}{\partial z} (\mu \cdot \mathbf{B}) \approx \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \quad (2-1-1)$$

که در آن سایر مؤلفه های \mathbf{B} را نادیده می گیریم. از آنجا که این اتم خیلی سنگین است انتظار داریم که مفاهیم کلاسیکی برای مسیر برقرار باشند. این نکته را می توان با استفاده از مفهوم عدم قطعیت هایزنبرگ که در آینده اثبات می شود، توجیه کرد. همانند شکل ۱-۱، وقتی که $(S_z < 0)$ $\mu_z > 0$ است، بر اتم نیروی رو به پایین اعمال می شود و هنگامی که $(S_z > 0)$ $\mu_z < 0$ باشد، این نیرو به سمت بالا برمی گردد. بنابراین انتظار می رود که پرتو بر حسب مقدار μ_z به دو قسمت تقسیم شود. به بیان دیگر دستگاه SG (اشترن-گرلاخ) مؤلفه z ، گشتاور مغناطیسی μ را "می سنجد"، یا به طور معادل، با یک ثابت تناسب، مؤلفه z اسپین S را اندازه گیری می کند.



شکل ۱-۲: پرتوهای خروجی از دستگاه اشترن گرلاخ. (الف) انتظاری که از فیزیک کلاسیکی داریم. (ب) چیزی که در عمل دیده می شود.

اتم ها در کوره جهت تصادفی دارند. هیچ سوی ممتازی برای جهت گیری μ وجود ندارد. اگر الکترون همانند یک شی با اسپین کلاسیکی باشد، انتظار داریم که مقدار μ_z بین مقادیر $|\mu|$ و $-|\mu|$ باشد. بدین ترتیب انتظار می رود که همانند شکل ۱-۲ الف یک مجموعه ی پیوسته از باریکه ها از دستگاه SG خارج شود. اما در عمل به جای این وضعیت، چیزی شبیه به شکل ۱-۲ ب به وجود می آید. به عبارت دیگر، باریکه های نقره ای

که از کوره خارج می‌شود، توسط دستگاه SG به دو قسمت مجزا از هم تقسیم می‌شود. این پدیده در روزهای آغازین مکانیک کوانتومی به "کوانتش فضایی" معروف بود. با استفاده از \hbar می‌توان با یک ثابت تناسب، اسپین الکترون S را به دست آورد. در نتیجه فقط دو مقدار ممکن برای مؤلفه‌ی z ، اسپین S قابل مشاهده است. S_z بالا و S_z پایین که با $+S_z$ و $-S_z$ معرفی می‌شوند. این دو مقدار ممکن S_z مضربی از واحد بنیادین تکانه‌ی زاویه‌ای هستند. به‌طور عددی داریم $\hbar/2$ و $-\hbar/2$ که S_z که

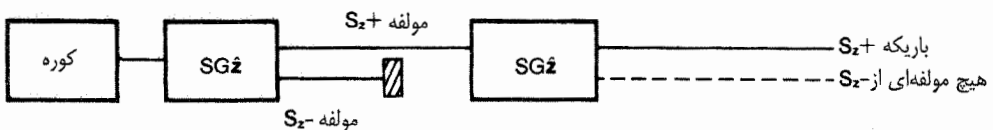
$$\begin{aligned}\hbar &= 1.0546 \times 10^{-27} \text{ erg-s} \\ &= 6.5822 \times 10^{-16} \text{ eV-s}\end{aligned}\quad (۳-۱-۱)$$

این "کوانتش" تکانه‌ی زاویه‌ای اسپین الکترون، نخستین صورت مهمی است که از آزمایش اشترن-گرلاخ درمی‌یابیم.

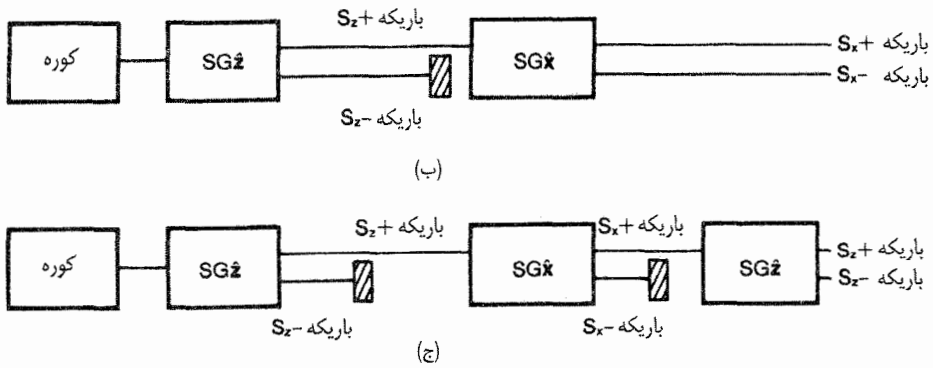
البته، جهت پایین-بالا یا محور z ، موارد برتر و برگزیده‌ای نیستند. ما می‌توانیم میدان غیریکنواخت خود را در جهت افقی اعمال کنیم و آن را محور x بنامیم در حالی که باریکه در جهت محور y حرکت می‌کند. در این مورد باریکه‌ای که از کوره خارج می‌شود به دو قسمت $+S_x$ و $-S_x$ تقسیم می‌شود.

آزمایشات اشترن گرلاخ پی در پی

اجازه دهید تا یک آزمایش اشترن گرلاخ پی‌درپی را فرض کنیم. بدین ترتیب باریکه‌ی اتمی از دو یا چند دستگاه SG عبور می‌کند و تفکیک می‌شود. در نخستین آرایش فرض می‌کنیم که این دستگاه‌ها نسبت به هم هم‌جهت هستند. باریکه‌ای که از کوره خارج می‌شود را در معرض آرایشی که در شکل ۳-۱ الف نشان داده شده است، قرار می‌دهیم که در آن طبق معمول میدان مغناطیسی غیریکنواخت در جهت z قرار دارد و دستگاه SG \hat{z} است. سپس قسمت $-S_z$ را که از دستگاه SG \hat{z} خارج می‌شود سد می‌کنیم و به قسمت $+S_z$ باریکه اجازه‌ی عبور می‌دهیم تا در معرض دیگری قرار بگیرد. این بار فقط یک باریکه از این دستگاه ثانوی خارج می‌شود و آن باریکه همان $+S_z$ است. شاید این قضیه عجیب نباشد. پس از آن که تمام اسپین اتمی به سمت بالا جهت‌گیری کند و هنگامی که هیچ میدان خارجی برای چرخاندن اسپین، بین اولین و دومین دستگاه SG \hat{z} وجود نداشته باشد، انتظار می‌رود که این اسپین، در جهت بالا باقی بماند.



(الف)



شکل ۱-۳. آزمایشات اشترن گرواخ پی در پی

آرایشی که در شکل ۱-۳ ب نشان داده شده است کمی جالب تر است. در این آرایش دستگاه اول همانند قبل است اما دومین دستگاه SG_x است که دارای میدان مغناطیسی غیریکنواخت در راستای x است. وقتی باریکه‌ی S_z^+ وارد دومین دستگاه SG_x می‌گردد، به دو قسمت تقسیم می‌شود. یک مؤلفه‌ی S_x^- و یک مؤلفه‌ی S_x^+ تولید می‌گردد که این دو باریکه شدت‌های مساوی دارند. چطور می‌توان این اتفاق را توضیح داد؟ آیا این بدین معنی است که ۵۰٪ اتم‌ها در باریکه‌ی S_z^+ که از نخستین دستگاه SG_2 بیرون می‌آیند از هر دو دسته اتم‌های S_z^+ و S_x^- ساخته شده‌اند، در حالی که ۵۰٪ باقیمانده شامل S_z^+ و S_x^- هستند! قبول کردن چنین تصویری به مشکلاتی می‌انجامد، که در پایین به این مشکلات اشاره می‌شود.

حال در سومین مرحله به آرایشی که در شکل ۱-۳ ج نشان داده شده می‌پردازیم. این مرحله، ویژگی سیستم‌های مکانیک کوانتومی را روشن می‌کند. این بار دستگاه سوم از نوع SG_2 به آرایش ۱-۳ ب می‌افزاییم. در آزمایش مشاهده می‌شود که به جای یک باریکه، دو باریکه از سومین دستگاه بیرون می‌آید. باریکه‌های ظاهر شده هم شامل مؤلفه‌ی S_z^+ و هم شامل مؤلفه‌ی S_z^- هستند. این کاملاً عجیب است. چون پس از آنکه اتم‌ها از نخستین دستگاه خارج شدند مطمئن شده‌ایم که مؤلفه‌ی S_z^- کاملاً حذف شده است. چطور ممکن است مؤلفه‌ی S_z^- که پیش از این، آن را کاملاً حذف کرده بودیم، دوباره ظاهر شود؟ به‌طور واضح می‌بینیم مدلی که در آن فرض کردیم باریکه‌ی وارد شده به سومین دستگاه تنها شامل S_z^+ و S_x^- است، رضایت‌بخش نیست.

غالباً در مکانیک کوانتومی از این مثال برای آن استفاده می‌کنند که نشان دهند مشخص کردن S_x و S_z با هم ممکن نیست. به عبارت دقیق‌تر می‌توان گفت که انتخاب باریکه‌ی S_z^+ که از دستگاه (SG) دوم خارج می‌شود، به‌طور کامل اطلاعات قبلی ما درباره S_z را از بین می‌برد.

مقیاسه‌ی این وضعیت با چرخنده‌ای در حوزه‌ی مکانیک کلاسیکی که دارای تکانه‌ی زاویه‌ای

$$\mathbf{L} = I\omega$$

$$(۴-۱-۱)$$

است، جالب است. تکانه‌ی زاویه‌ای این چرخنده، با مشخص شدن سرعت زاویه‌ای ω ، به دست می‌آید. با مشاهده‌ی تندی شیء چرخان در راستاهای مختلف، می‌توان به‌طور همزمان ω_x و ω_y و ω_z را محاسبه کرد. اگر چگالی، جرم و شکل هندسی جسم چرخنده مشخص باشد، گشتاور لختی I نیز قابل محاسبه است. بنابراین مشخص کردن L_x و L_z به‌طور هم‌زمان در مکانیک کلاسیک با مشکل مواجه نمی‌شود.

واضح است که ناتوانی ما در مشخص نکردن k_x و k_y به‌طور هم‌زمان ربطی به ناتوانی و اشتباه آزمایش‌گر ندارد. بهبود تکنیک‌های آزمایشگاهی نیز نمی‌تواند باعث شود که مؤلفه‌ی k_x از سومین دستگاه در شکل ۳-۱ ج خارج شود. این نارسایی مکانیک کوانتومی، از خود آزمایش ناشی می‌شود. در واقع این محدودیت، در ذات پدیده‌های میکروسکوپیکی وجود دارد.

مقایسه با نور قطبیده

از آن‌جا که این وضعیت کاملاً جدید به‌نظر می‌رسد، مقایسه‌ی این حالت با یک وضعیت کلاسیکی می‌تواند مفید باشد. در این‌جا بحث خود را به سمت قطبش امواج نوری پیش می‌بریم.

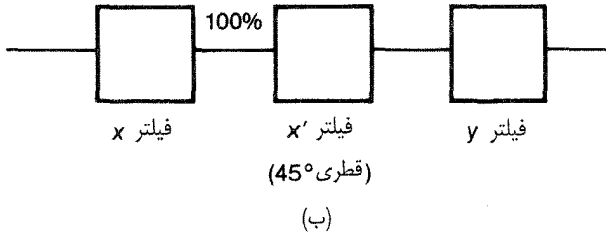
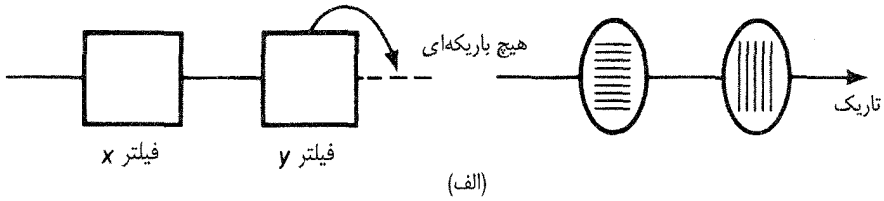
یک موج نوری تک‌فام را در نظر بگیرید که در جهت Z قطبیده شده است. نوری با قطبش خطی (با قطبش صفحه‌ای) که بردار قطبش آن در راستای x است (برای اختصار آن را نور قطبیده‌ی x می‌نامیم) یک میدان الکتریکی نوسانی دارد که وابسته به فضا و زمان است و به‌صورت زیر مشخص می‌شود:

$$\mathbf{E} = E_0 \hat{x} \cos(kz - \omega t) \quad (۵-۱-۱)$$

نور قطبیده‌ی y در راستای Z منتشر می‌شود:

$$\mathbf{E} = E_0 \hat{y} \cos(kz - \omega t) \quad (۶-۱-۱)$$

پرتوهای نور قطبیده به‌شکل (۵-۱-۱) و (۶-۱-۱) را می‌توان با گذر دادن یک نور غیرقطبیده از فیلتر قطبش به‌دست آورد. به فیلتری که تنها پرتوهای قطبیده در راستای x را گزینش می‌کند فیلتر x می‌گوییم. اگر فیلتر x را ۹۰° حول جهت انتشار (Z) بچرخانیم: این فیلتر به فیلتر y تبدیل می‌شود. می‌دانیم، وقتی که یک پرتو نور ابتدا از یک فیلتر x عبور کند و سپس به یک فیلتر y وارد شود، پرتو خروجی نداریم. البته در این‌جا قطبش‌گرهای ما بازده ۱۰۰% دارند، شکل ۴-۱ الف را ببینید.



شکل ۴-۱: پرتوهای نور که در معرض فیلترهای قطبش‌گر قرار گرفته‌اند.

اگر بین فیلتر x و فیلتر y ، قطبش‌گر دیگری که با محور x در صفحه‌ی xy زاویه‌ی 45° بسازد - به این جهت x' می‌گوییم - وارد کنیم، این مسأله جالب‌تر خواهد شد. شکل ۴-۱ ب را ببینید. این بار با آنکه می‌دانیم پرتویی که از فیلتر x گذشته مؤلفه‌ای از قطبش y ندارد، اما در خروجی فیلتر y پرتو وجود دارد. به عبارت دیگر، وقتی که فیلتر x' وارد عمل می‌شود و پرتوهای قطبش x' را گزینش می‌کند، این که کدام پرتو قبلاً در جهت x قطبیده بود بی‌اهمیت است. انتخاب پرتو با قطبش x' به وسیله‌ی قطبش‌گر همه اطلاعات قبلی ما را درباره‌ی قطبش نور از بین می‌برد. این وضعیت کاملاً شبیه به وضعیتی است که پیش از این در دستگاه SG در شکل ۳-۱ ب با آن مواجه شدیم. این دو مسأله به صورت زیر قیاس می‌شوند:

نور قطبیده y ، x \leftrightarrow اتم‌های $s_z \pm$

نور قطبیده y' ، x' \leftrightarrow اتم‌های $s_x \pm$ (۷-۱-۱)

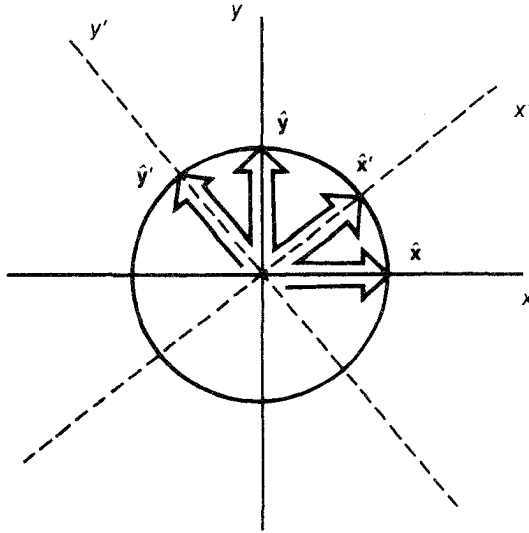
که محورهای x' و y' در شکل ۵-۱ نشان داده شده‌اند.

بگذارید ببینیم چطور می‌توانیم رفتار پرتوهای قطبیده‌ی 45° را (پرتوهای قطبیده‌ی x' و y') در چارچوب الکترو دینامیک کلاسیک مشخص کنیم. با استفاده از شکل ۵-۱ به دست می‌آوریم:

$$E_0 \hat{x}' \cos(kz - \omega t) = E_0 \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \hat{x} \cos(kz - \omega t) + \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{y} \cos(kz - \omega t) \right]$$

$$E_0 \hat{y}' \cos(kz - \omega t) = E_0 \left[-\frac{1}{\sqrt{2}} \hat{x} \cos(kz - \omega t) + \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{y} \cos(kz - \omega t) \right]$$

(۸-۱-۱)

شکل ۱-۵: جهت‌گیری محورهای x' و y'

در آرایش فیلترهای سه‌گانه‌ی شکل ۱-۴-ب پرتوی بیرون آمده از نخستین قطبش‌گر یک پرتو قطبیده در راستای \hat{x}' است که می‌توان آن را به صورت یک ترکیب خطی از پرتویی با قطبش x' و پرتویی با قطبش y' نشان داد. دومین قطبش‌گر پرتوی قطبی در جهت x' را گزینش می‌کند. به همین ترتیب می‌توان این پرتو را نیز به صورت یک ترکیب خطی از پرتویی با قطبش x و پرتویی با قطبش y نشان داد و در نهایت، سومین قطبش‌گر، مختصه‌ی قطبش y را گزینش می‌کند.

با استفاده از قیاس (۱-۱-۷) بین آزمایش‌های اشترن-گرلاخ متوالی در شکل ۱-۳-ج با آزمایش فیلترهای سه‌گانه در شکل ۱-۴-ب، می‌توانیم برای اسپین اتم نقره یک فضای برداری جدید در دو بعد ارائه دهیم. این یک فضای برداری مجرد است که نباید با فضای دو بعدی معمولی (x, y) اشتباه گرفته شود. همان‌طور که در رابطه‌ی ۱-۱-۸ بردارهای پایه‌ی \hat{x} و \hat{y} برای بردار قطبش \hat{x}' در نور قطبیده‌ی \hat{x}' به کار رفت، منطقی است که حالت $S_x +$ را به عنوان برداری که آن را در نمادگذاری دیراک کت می‌نامیم، به کار ببریم. مفهوم کت در بخش بعدی به طور کامل مطرح می‌شود. این بردار را با $|S_x; +\rangle$ مشخص می‌کنیم و آن را به صورت یک ترکیب خطی از $|S_z; +\rangle$ و $|S_z; -\rangle$ می‌نویسیم. این ترکیب می‌تواند صورت‌های مختلفی داشته باشد. می‌توان این ترکیب را به صورت زیر نوشت:

$$|S_x; +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|S_z; +\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|S_z; -\rangle \quad (۱-۱-۹ \text{ الف})$$

$$|S_x; -\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}|S_z; +\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|S_z; -\rangle \quad (۱-۱-۹ \text{ ب})$$

که در توافق با رابطه‌ی (۱-۸) است. بعداً نشان می‌دهیم که این عبارت را چطور از فرمول‌بندی کلی مکانیک کوانتومی به دست می‌آوریم.

بنابراین مؤلفه‌ی حذف نشده خروجی، از دستگاه دوم اشترن گِراخ $SG\hat{x}$ که در شکل ۱-۳-ج نشان داده شد را می‌توان متشکل از ویژه حالت‌های z و $-z$ دانست. این به خاطر آن است که هر دو مؤلفه از دستگاه سوم $SG\hat{z}$ خارج می‌شوند.

سؤال بعدی که فوراً پیش می‌آید این است که چطور می‌توان حالت‌های z و $-z$ را ارائه کرد! تقارن به ما می‌گوید که اگر یک پرتو z در راستای x و یک دستگاه $SG\hat{y}$ داشته باشیم، نتیجه‌ی حاصل بسیار شبیه به موردی است که یک پرتو z در جهت y و یک دستگاه $SG\hat{x}$ داریم. کت‌های z می‌بایست ترکیب خطی‌ای از $\langle z; \pm \rangle$ باشند. اما از رابطه‌ی (۱-۹) مشخص است که احتمالات ممکن را برای نوشتن $\langle z; \pm \rangle$ صرف کرده‌ایم. پس فضای برداری ما چطور می‌تواند بین z و حالت‌های z تمایز بگذارد؟

دوباره مقایسه با نور قطبیده می‌تواند برای ما مفید باشد. این بار فرض می‌کنیم که یک نور با قطبش دایره‌ای داریم که با گذراندن یک نور قطبیده‌ی خطی از یک تیغه ربع موج، ایجاد می‌شود. هنگامی که این موج قطبیده‌ی دایره‌ای از یک فیلتر با قطبش $-x$ یا از یک فیلتر با قطبش y عبور می‌کند، مجدداً پرتویی با قطبش x یا y با شدت یکسان داریم. اما می‌دانیم که نور قطبیده‌ی دایره‌ای کاملاً با نور قطبیده‌ی خطی 45° (قطبش در جهت x' یا y') متفاوت است.

چطور می‌توان به شکل ریاضیاتی، یک نور قطبیده‌ی دایره‌ای را نشان داد؟ یک نور قطبیده‌ی دایره‌ای راستگرد چیزی نیست جز ترکیبی خطی، از دو نور قطبیده در راستای x و راستای y ، که مؤلفه‌ی y نوسان میدان الکتریکی با مؤلفه‌ی x به اندازه‌ی 90° درجه اختلاف فاز دارد:

$$\mathbf{E} = E_0 \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \hat{x} \cos(kz - \omega t) + \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{y} \cos\left(kz - \omega t + \frac{\pi}{2}\right) \right] \quad (10-1-1)$$

با استفاده از نمادگذاری مختلط، شکل این رابطه زیباتر می‌شود:

$$\text{Re}(\boldsymbol{\epsilon}) = \mathbf{E}/E_0 \quad (11-1-1)$$

برای یک نور قطبیده‌ی دایره‌ی راستگرد، می‌توان نوشت:

$$\boldsymbol{\epsilon} = \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \hat{x} e^{i(kz - \omega t)} + \frac{i}{\sqrt{2}} \hat{y} e^{i(kz - \omega t)} \right] \quad (12-1-1)$$

که در آن از رابطه‌ی $i = e^{i\pi/2}$ استفاده کرده‌ایم.

می توان با مقایسه ی این حالت با حالت های اسپینی اتم های نقره نوشت:

$$s_{y_1} + \text{اتم} \leftrightarrow \text{اتم} \quad (1-1-13)$$

$$s_{y_1} - \text{اتم} \leftrightarrow \text{اتم} \quad \text{چپگرد.}$$

با به کار بستن این قیاس در (1-1-12)، می بینیم که اگر مجاز به ساختن کت های مختلط باشیم، مشکلی برای توصیف $s_{y_1} \pm$ در فضای برداری ما به وجود نخواهد آمد.

$$|s_{y_1}; \pm\rangle \stackrel{?}{=} \frac{1}{\sqrt{2}}|s_{z_1}; +\rangle \pm \frac{i}{\sqrt{2}}|s_{z_1}; -\rangle \quad (1-1-14)$$

که کاملاً با (1-1-9) متفاوت است. بنابراین مشاهده می کنیم که فضای برداری دوبعدی مورد نیاز برای توصیف حالت های اسپین اتم های نقره باید یک فضای برداری مختلط باشد. یک بردار دلخواه در فضای برداری به شکل یک ترکیب خطی از بردارهای $|s_{z_1}; \pm\rangle$ نوشته می شود که در حالت های کلی این بردارها می توانند دارای ضرایب مختلط باشند. نیاز به اعداد مختلط، پیش تر و در مثال های ابتدایی تر قابل تشخیص بود.

خواننده باید به این مساله توجه کند که ما عمداً از صحبت راجع به فوتون ها اجتناب کردیم. به عبارت دیگر، ما کاملاً از خاصیت کوانتومی نور نا آگاهیم و هیچ کجا قطبش حالت های فوتون های منفرد را در نظر نمی گیریم. مقایسه ی ما، در یک فضای برداری مطلق، تنها بین کت هایی که حالت های اسپین اتم های منفرد را توصیف می کنند، و بردارهای قطبش یک میدان الکتریکی کلاسیک انجام شد. در واقع می توانستیم مقایسه ی بهتری را با ارائه ی مفهوم فوتون و صحبت درباره ی احتمال یافتن یک فوتون قطبیده ی دایره ای در یک حالت قطبیده ی خطی ایراد کنیم، اما نیازی به انجام این کار نداشتیم. در حقیقت به هدف اصلی خود در این بخش رسیدیم: معرفی حالت های مکانیک کوانتومی به طوری که با یک سری بردار، در یک فضای برداری مختلط مجرد قابل بیان باشند.

۲.۱ کت ها، براها و عملگرها

در بخش قبل نشان دادیم که چطور با آنالیز آزمایش اشترن-گراخ می توانیم یک فضای برداری مختلط را فرض کنیم. در این بخش و بخش آتی، بنیان ریاضی فضاهای برداری مورد استفاده در مکانیک کوانتومی را فرمول بندی می کنیم. نمادگذاری ما در این کتاب، نمادگذاری براوکت است که توسط بی.آ.ام دیراک گسترش یافت. البته نظریه ی فضاهای برداری خطی برای ریاضی دانان پیش از تولد مکانیک کوانتومی شناخته شده بود، اما روش دیراک فضای برداری ای را معرفی می کرد که حائز امتیازات زیادی به خصوص از نقطه نظر فیزیکدانان بود.

فضای کت

فضای برداری مختلطی را در نظر می‌گیریم، که بعد آن طبق طبیعت سیستم فیزیکی مورد بررسی مشخص می‌شود. در آزمایش اشترن-گرلاخ که تنها درجه‌ی آزادی کوانتومی، اسپین اتم است بعد با تعداد مسیرهای مختلفی که اتم‌ها پس از مواجهه شدن با دستگاه SG می‌توانند دنبال کنند برابر است. در مورد اتم‌های نقره در بخش گذشته، بعد برابر با دو است. یعنی تنها دو مقدار برای z ممکن است. بعدها، در بخش ۶-۱، حالت طیف پیوسته (برای مثال، موقعیت یا تکانه‌ی یک ذره) که تعداد درجات آزادی آن بی‌نهایت است را مورد بررسی قرار می‌دهیم. در چنین حالتی پس از آنکه دی. هیلبرت، فضای برداری را در بعد بینهایت مورد بررسی قرار دارد، فضای برداری مسأله به‌شکل فضای برداری هیلبرت شناخته می‌شود.

در مکانیک کوانتومی یک حالت فیزیکی، (برای مثال، یک اتم نقره با جهت اسپین معین) بوسیله‌ی یک بردار حالت در فضای برداری مختلط شناخته می‌شود. به تقلید از دیراک، چنین برداری را یک کت می‌نامیم و آن را با $|\alpha\rangle$ نمایش می‌دهیم. به‌عنوان اصل موضوع، این کت حاوی تمام اطلاعات درباره‌ی یک حالت فیزیکی است. هر چیزی را که ما مجاز به پرسیدن آن درباره‌ی این حالت باشیم در این کت قرار دارد. دو کت می‌توانند با هم جمع شوند:

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle \quad (1-2-1)$$

حاصل جمع $|\gamma\rangle$ خود کت دیگری است. اگر $|\alpha\rangle$ را در یک عدد مختلط c ضرب کنیم، حاصل ضرب $c|\alpha\rangle$ یک کت دیگر است. عدد c می‌تواند در سمت چپ یا سمت راست کت قرار گیرد. این دو با هم تفاوتی ندارند:

$$c|\alpha\rangle = |\alpha\rangle c \quad (2-2-1)$$

در حالت خاص وقتی c برابر با صفر است به کت حاصل، کت تهی می‌گوییم.

یک اصل موضوعه‌ی فیزیکی این است که $|\alpha\rangle$ و $c|\alpha\rangle$ با $c \neq 0$ حالت فیزیکی یکسانی را عرضه می‌کنند. به عبارت دیگر، تنها "جهت" در فضای برداری حائز اهمیت است. ریاضی‌دانان ترجیح می‌دهند که بگویند در اینجا به جای بردارها تنها با راستاها سروکار داریم.

یک مشاهده‌پذیر، همانند مؤلفه‌های اسپین و تکانه، را می‌توان با یک عملگر نظیر A معرفی کرد. در حالت کلی، یک عملگر بر روی یک کت از سمت چپ عمل می‌کند.

$$A \cdot (|\alpha\rangle) = A|\alpha\rangle \quad (3-2-1)$$

که حاصل کت دیگری است. در آینده عملگرهای ضربی بیشتری را بررسی می‌کنیم.

در حالت کلی، $A|\alpha\rangle$ برابر با چند برابر $|\alpha\rangle$ نیست. اگرچه کت‌های ویژه و مهمی وجود دارند که به عنوان ویژه کت عملگر A شناخته می‌شوند و با

$$|a'\rangle, |a''\rangle, |a'''\rangle, \dots \quad (۴-۲-۱)$$

نمایش داده می‌شوند، که دارای خاصیت

$$A|a'\rangle = a'|a'\rangle, A|a''\rangle = a''|a''\rangle, \dots \quad (۵-۲-۱)$$

هستند. که در آن‌ها a' ، a'' و ... فقط عدد هستند. توجه کنید که با اعمال A بر یک ویژه کت تنها همان کت ضربدر یک عدد ظاهر می‌شود. مجموعه اعداد $\{a', a'', a''', \dots\}$ یا به طور فشرده‌تر $\{a'\}$ ، مجموعه ویژه مقادیر عملگر A نامیده می‌شوند. هنگامی که مرتب کردن ویژه مقادیر به شکل خاصی ضروری باشد، به جای $\{a', a'', a''', \dots\}$ از $\{a^{(1)}, a^{(2)}, a^{(3)}, \dots\}$ استفاده می‌کنیم.

حالت فیزیکی وابسته به یک ویژه کت، ویژه حالت نام دارد. در ساده‌ترین مورد برای سیستمی با اسپین $\frac{1}{2}$ ، رابطه‌ی ویژه مقدار- ویژه کت (۵-۲-۱) به صورت زیر بیان می‌شود:

$$S_z|S_z; +\rangle = \frac{\hbar}{2}|S_z; +\rangle, \quad S_z|S_z; -\rangle = -\frac{\hbar}{2}|S_z; -\rangle \quad (۶-۲-۱)$$

که $|S_z; \pm\rangle$ ویژه کت‌های عملگر S_z با ویژه مقادیر $\pm\hbar/2$ هستند. در توافق با نماد گذاری $|a'\rangle$ که یک ویژه کت با ویژه مقدارش مشخص می‌شود. می‌توان از $|\hbar/2\rangle$ به جای $|S_z; \pm\rangle$ استفاده کرد. اما استفاده از نماد گذاری $|S_z; \pm\rangle$ که در بخش پیش استفاده شد در اینجا بسیار مناسب‌تر است، زیرا می‌توان برای ویژه کت‌های S_x نوشت:

$$S_x|S_x; \pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|S_x; \pm\rangle \quad (۷-۲-۱)$$

پیش‌تر عنوان کردیم که بعد فضای برداری، با تعداد امکانات وقوع در آزمایش اشترن- گرواخ مشخص می‌شود. به‌طور دقیق‌تر، ما با یک فضای برداری N بُعدی، متشکل از N ویژه کت برای مشاهده‌پذیر A سروکار داریم. هر کت دلخواه $|\alpha\rangle$ را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'}|a'\rangle \quad (۸-۲-۱)$$

با a' و $a'' \dots a^{(N)}$ که $c_{a'}$ یک ضریب مختلط است. پرسش در مورد یکتایی این چنین بسطی را تا اثبات تعامد ویژه کت‌ها به تأخیر می‌اندازیم.

فضای برا و ضرب داخلی

فضای برداری که با آن سروکار داریم یک فضای کت است. می‌توانیم نمادگذاری فضای برا را به صورت فضای برداری "دوگان" فضای کت معرفی کنیم. به عنوان اصل موضوع می‌پذیریم که وابسته به هر کت $|\alpha\rangle$ یک برا که با $\langle\alpha|$ نمایش داده می‌شود در فضای دوگان، یا فضای برا، وجود دارد. فضای برا از ویژه براهایی $\{\langle\alpha|\}$ که وابسته به ویژه کت‌های $\{|\alpha\rangle\}$ هستند، تشکیل می‌شود. یک تناظر یک به یک بین فضای کت و فضای برا وجود دارد:

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &\stackrel{\text{DC}}{\leftrightarrow} \langle\alpha| \\ |a'\rangle, |a''\rangle, \dots &\stackrel{\text{DC}}{\leftrightarrow} \langle a'|, \langle a''|, \dots \\ |\alpha\rangle + |\beta\rangle &\stackrel{\text{DC}}{\leftrightarrow} \langle\alpha| + \langle\beta| \end{aligned} \quad (9-2-1)$$

که DC، تناظر دوگان را نشان می‌دهد. به طور غیر دقیق می‌توان به فضای برا به عنوان نوعی تصویر آینه‌ای از فضای کت نگریست.

به عنوان اصل موضوع دوگان $c|\alpha\rangle$ برابر با $c^*|\alpha\rangle$ است نه $c|\alpha\rangle$. این بسیار مهم است. به طور کلی تر داریم:

$$c_a|\alpha\rangle + c_b|\beta\rangle \stackrel{\text{DC}}{\leftrightarrow} c_a^*|\alpha\rangle + c_b^*|\beta\rangle \quad (10-2-1)$$

اکنون می‌توانیم ضرب داخلی یک برا و یک کت را تعریف کنیم*. ضرب، با قرار دادن برا در سمت چپ و کت در سمت راست نوشته می‌شود. برای مثال:

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \underset{\text{bra } (c)}{\langle\beta|} \cdot \underset{\text{ket}}{(|\alpha\rangle)} \quad (11-2-1)$$

در حالت کلی، این ضرب، یک عدد مختلط است. توجه کنید که در تشکیل یک ضرب داخلی همیشه یک بردار از فضای برا و یک بردار از فضای کت گرفته می‌شود.

دو خاصیت بنیادین ضرب داخلی را اصل موضوع قرار می‌دهیم. نخست:

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^* \quad (12-2-1)$$

به عبارت دیگر $\langle\beta|\alpha\rangle$ و $\langle\alpha|\beta\rangle$ همیوغ مختلط یکدیگرند. توجه کنید که هر چند ضرب داخلی از جهاتی قابل مقایسه با ضرب اسکالر **a.b** است و اما $\langle\beta|\alpha\rangle$ کاملاً باید از $\langle\alpha|\beta\rangle$ متمایز باشد. در فضای برداری

* در مقالات، اغلب ضرب داخلی را به صورت ضرب اسکالر عنوان می‌کنند. زیرا این ضرب با **a.b** در فضای اقلیدسی مقایسه می‌شود. در این کتاب، ما عبارت اسکالر را برای کمیته به کار می‌بریم که تحت دوران در فضای سه بعدی معمولی، ناوردا باقی می‌ماند.

واقعی این تمایز لازم نیست زیرا $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$ معادل با $\mathbf{b} \cdot \mathbf{a}$ است. با استفاده از (۱-۲-۱۲) سریعاً نتیجه می‌شود که $\langle \alpha | \alpha \rangle$ باید یک عدد حقیقی باشد. برای اثبات این مطلب قرار می‌دهیم $\langle \alpha | \beta \rangle$

اصل موضوع دوم در ضرب داخلی این است که:

$$\langle \alpha | \alpha \rangle \geq 0 \quad (1-2-13)$$

که در آن علامت تساوی فقط برای وقتی است که $|\alpha\rangle$ یک کت تهی باشد. این مسأله گاهی به‌عنوان اصل موضوع **سنجشی معین مثبت** شناخته می‌شود. به‌طوری که در آینده نشان خواهیم داد از نظر فیزیکی این اصل موضوع بیان‌کننده‌ی تعبیر احتمالاتی مکانیک کوانتومی است.

دو کت $|\alpha\rangle$ و $|\beta\rangle$ عمود بر هم هستند، اگر

$$\langle \alpha | \beta \rangle = 0 \quad (1-2-14)$$

اگرچه در تعریف ضرب داخلی $|\alpha\rangle$ ظاهر شده است، اما رابطه‌ی (۱-۲-۱۴) براساس (۱-۲-۱۲) نتیجه می‌دهد که:

$$\langle \beta | \alpha \rangle = 0 \quad (1-2-15)$$

با اتخاذ کتی غیر تهی، می‌توانیم کت **بهنجار** $|\bar{\alpha}\rangle$ را تشکیل دهیم، داریم:

$$|\bar{\alpha}\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle}} \right) |\alpha\rangle \quad (1-2-16)$$

با خاصیت

$$\langle \bar{\alpha} | \bar{\alpha} \rangle = 1 \quad (1-2-17)$$

به‌طور کلی، $\sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle}$ را به‌عنوان **نرم** $|\alpha\rangle$ می‌شناسیم که قابل مقایسه با اندازه‌ی بردار $\sqrt{a \times a} = |a|$ در فضای برداری اقلیدسی است. از آن‌جایی که $|\alpha\rangle$ و $c|\alpha\rangle$ حالت فیزیکی یکسانی را ارائه می‌کنند. می‌توان طبق رابطه‌ی (۱-۲-۱۷)، کت‌هایی را که برای حالت‌های فیزیکی استفاده می‌شوند، **بهنجار** کرد.*

عملگرها

همان‌طور که قبلاً اشاره کردیم، مشاهده‌پذیرهایی شبیه به تکانه و اسپین با عملگرهایی معرفی می‌شوند که می‌توانند روی کت‌ها اثر کنند. در حالت کلی می‌توان عملگرهایی را که روی کت‌ها اثر می‌کنند با X و Y مشخص کرد و گروه محدودی از عملگرها را متناظر با مشاهده‌پذیرها در نظر گرفت.

* برای ویژه‌کت‌های مشاهده‌پذیرهایی که طیف پیوسته دارند، بهنجارش واقعی را استفاده می‌کنیم، بخش ۱-۶ را ببینید.

یک عملگر از سمت چپ روی یک کت عمل می کند.

$$X \cdot (|\alpha\rangle) = X|\alpha\rangle \quad (18-2-1)$$

و نتیجه‌ی ضرب یک کت دیگر است. عملگرهای X و Y مساوی گفته می شوند

$$X = Y \quad (19-2-1)$$

اگر

$$X|\alpha\rangle = Y|\alpha\rangle \quad (20-2-1)$$

این رابطه باید برای هر کت دلخواه در فضای کت برقرار باشد، عملگر X را عملگر تهی می گوئیم، اگر برای هر کت دلخواه $|\alpha\rangle$ داشته باشیم:

$$X|\alpha\rangle = 0 \quad (21-2-1)$$

عملگرها می توانند با یکدیگر جمع شوند. جمع عملگرها خاصیت جابجایی و شرکت پذیری دارد:

$$X + Y = Y + X \quad (\text{الف } 21-2-1)$$

$$X + (Y + Z) = (X + Y) + Z \quad (\text{ب } 21-2-1)$$

خواهید دید که تمامی عملگرهایی که در این کتاب مورد بررسی قرار می گیرد، خطی هستند. البته به غیر از عملگر برگشت زمان که در فصل ۴ آن را خواهید دید. یعنی:

$$X(c_\alpha|\alpha\rangle + c_\beta|\beta\rangle) = c_\alpha X|\alpha\rangle + c_\beta X|\beta\rangle \quad (22-2-1)$$

عملگر X بر روی یک کت از سمت راست اثر می کند.

$$(|\alpha\rangle) \cdot X = \langle\alpha|X \quad (23-2-1)$$

و حاصلضرب یک برای دیگر است. کت $\langle\alpha|X$ و برای $\langle\alpha|X$ ، در حالت کلی دوگان یکدیگر نیستند. علامت X^\dagger را طوری تعریف می کنیم که:

$$X|\alpha\rangle \stackrel{\text{DC}}{\leftrightarrow} \langle\alpha|X^\dagger \quad (24-2-1)$$

عملگر X^\dagger را الحاقی هرمیتی یا ساده تر، الحاقی X می نامیم. عملگر X هرمیتی است اگر:

$$X = X^\dagger$$

ضرب

عملگرهای X و Y می‌توانند در هم ضرب شوند. ضرب عملگرها در حالت کلی جابجا نشدنی است؛

یعنی:

$$XY \neq YX \quad (۲۶-۲-۱)$$

در هر حال ضرب عملگرها خاصیت شرکت‌پذیری دارد:

$$X(YZ) = (XY)Z = XYZ \quad (۲۷-۲-۱)$$

همچنین داریم:

$$X(Y|\alpha\rangle) = (XY)|\alpha\rangle = XY|\alpha\rangle, \quad (\langle\beta|X)Y = \langle\beta|(XY) = \langle\beta|XY \quad (۲۸-۲-۱)$$

توجه کنید که:

$$(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger \quad (۲۹-۲-۱)$$

چون:

$$XY|\alpha\rangle = X(Y|\alpha\rangle) \stackrel{DC}{\leftrightarrow} (\langle\alpha|Y^\dagger)X^\dagger = \langle\alpha|Y^\dagger X^\dagger \quad (۳۰-۲-۱)$$

تا اینجا ضرب‌های $\langle\beta|\alpha\rangle$ و $X|\alpha\rangle$ و $\langle\alpha|X$ و XY را بررسی کردیم. آیا مجاز به تشکیل دادن ضرب‌های دیگری نیز هستیم؟ بگذارید تا $|\alpha\rangle$ و $\langle\beta|$ را به ترتیب در هم ضرب کنیم. حاصل به صورت زیر است:

$$(|\beta\rangle) \cdot (\langle\alpha|) = |\beta\rangle\langle\alpha| \quad (۳۱-۲-۱)$$

که به عنوان **ضرب خارجی** $|\alpha\rangle$ و $|\beta\rangle$ شناخته می‌شود. در این جا تأکید می‌کنیم که $|\beta\rangle\langle\alpha|$ به عنوان یک عملگر شناخته می‌شود و بنابراین به طور اساسی با ضرب داخلی $\langle\beta|\alpha\rangle$ که یک عدد است، تفاوت دارد.

همچنین "ضرب‌های غیرمجاز" نیز وجود دارند. پیش‌تر خاطر نشان کردیم که یک عملگر می‌بایست در سمت چپ یک کت یا در سمت راست یک برا قرار بگیرد. به عبارت دیگر، $X|\alpha\rangle$ و $\langle\alpha|X$ ، مثال‌هایی از ضرب‌هایی غیرمجازند. این‌ها نه کت هستند، نه برا و نه عملگر، این‌ها بی‌معنی هستند. ضرب‌هایی شبیه به $|\beta\rangle\langle\alpha|$ و $|\alpha\rangle\langle\beta|$ نیز، تا زمانی که $|\beta\rangle$ و $|\alpha\rangle$ بردارهای کت (یا برا) متعلق به فضای کت (یا برا) مشابهی هستند، بی‌معنی هستند.*

* بعداً در این کتاب‌ها با ضرب‌هایی مثل $|\alpha\rangle\langle\beta|$ مواجه می‌شویم که به شکل بهتر $|\alpha\rangle\langle\beta|$ نوشته می‌شوند. اما همیشه در چنین مواردی $|\alpha\rangle$ و $|\beta\rangle$ متعلق به فضاهای برداری متفاوتی هستند. برای مثال، کت اول متعلق به معنای برداری اسپین الکترون و کت دوم مربوط به تکانه‌ی زاویه‌ای مدارای الکترون است، یا کت اول مربوط به فضای برداری ذره‌ی ۱ و کت دوم در فضای برداری ذره‌ی ۲ است و غیره.

اصل شرکت پذیری

همان طور که از (۲۷-۲-۱) معلوم است، در میان عملگرها، عملگرهای ضرب شرکت پذیرند. در واقع این خاصیت مشترک اصل موضوعه‌ای است که تا وقتی با ضرب‌های "مجاز" بین کت‌ها، براها و عملگرها سروکار داریم برقرار است. دیراک این اصل موضوع مهم را، اصل شرکت پذیری ضرب نامگذاری کرد. برای روشن شدن اهمیت این اصل بگذارید تا نخست یک ضرب خارجی را بر روی یک کت در نظر بگیریم:

$$(|\beta\rangle\langle\alpha|) \cdot |\gamma\rangle \quad (32-2-1)$$

با توجه به اصل شرکت پذیری، می‌توان این معادله را به صورت زیر نوشت:

$$|\beta\rangle \cdot \langle\alpha|\gamma\rangle \quad (33-2-1)$$

که $\langle\alpha|\gamma\rangle$ تنها یک عدد است. در نتیجه عمل ضرب خارجی روی یک کت، کت دیگری است. به عبارت دیگر $\langle\alpha|\beta\rangle$ را می‌توان یک عملگر در نظر گرفت. با توجه به اینکه (۳۲-۲-۱) و (۳۳-۲-۱) برابر هستند می‌توان نقطه را حذف کرد و $\langle\alpha|\beta\rangle$ را به صورت تأثیر $\langle\alpha|\beta\rangle$ بر $|\gamma\rangle$ در نظر گرفت و یا به صورت معادل، این عبارت را برابر با حاصل ضرب عدد $\langle\alpha|\beta\rangle$ در $|\beta\rangle$ انگاشت (از طرف دیگر اگر (۳۳-۲-۱) به شکل $|\beta\rangle \cdot \langle\alpha|\gamma\rangle$ نوشته شود، نمی‌توانیم نقطه و پرانتز را حذف کنیم چون در آن صورت عبارت حاصل غیرمجاز به نظر می‌رسد). توجه کنید که عملگر $\langle\alpha|\beta\rangle$ کت $|\gamma\rangle$ را در جهت $|\beta\rangle$ می‌چرخاند. به راحتی دیده می‌شود که اگر

$$X = |\beta\rangle\langle\alpha| \quad (34-2-1)$$

آنگاه:

$$X^\dagger = |\alpha\rangle\langle\beta| \quad (35-2-1)$$

است، که به عنوان یک تمرین، رها شده است.

برای نشان دادن دومین کاربرد مهم اصل شرکت پذیری، عبارت زیر را در نظر می‌گیریم.

$$\underbrace{\langle\beta|}_{\text{bra}} \cdot \underbrace{(X|\alpha\rangle)}_{\text{ket}} = \underbrace{\langle\beta|X}_{\text{bra}} \cdot \underbrace{(|\alpha\rangle)}_{\text{ket}} \quad (36-2-1)$$

از آن جایی که دو طرف با هم مساوی هستند می‌توانیم از نماد فشرده‌ی زیر استفاده کنیم.

$$\langle\beta|X|\alpha\rangle \quad (37-2-1)$$

که می توان در هر دو سمت (۱-۲-۳۶) آن را جایگزین کرد. یادآوری می کنیم که $\langle \alpha | X^\dagger$ برای دوگان $\langle X | \alpha \rangle$ است. بنابراین:

$$\begin{aligned} \langle \beta | X | \alpha \rangle &= \langle \beta | \cdot (X | \alpha \rangle) \\ &= \{ \langle \alpha | X^\dagger \cdot | \beta \rangle \}^* \\ &= \langle \alpha | X^\dagger | \beta \rangle^*, \end{aligned} \quad (۱-۲-۳۸)$$

که در آن علاوه بر اصل شرکت پذیری، از خاصیت بنیادین ضرب داخلی (۱-۲-۱۲) نیز استفاده کردیم. برای عملگر هرمیتی X داریم:

$$\langle \beta | X | \alpha \rangle = \langle \alpha | X | \beta \rangle^* \quad (۱-۲-۳۹)$$

۳.۱ کت های پایه و نمایش ماتریسی

ویژه کت های یک مشاهده پذیر

بگذارید تا ویژه کت ها و ویژه مقادیر عملگر هرمیتی A را در نظر بگیریم. پیش از این، از علامت A برای نشان دادن یک مشاهده پذیر استفاده کرده ایم. چون عملگرهای هرمیتی در مکانیک کوانتومی به این خاطر مدنظر قرار می گیرند که مشاهده پذیرهای فیزیکی را نشان می دهند.

با شرح یک قضیه مهم شروع می کنیم:

قضیه: ویژه مقادیر یک عملگر هرمیتی حقیقی هستند؛ ویژه کت های متناظر با ویژه مقادیر مختلف بر هم عمودند.

اثبات: نخست یادآوری می کنیم که:

$$A | a' \rangle = a' | a' \rangle \quad (۱-۳-۱)$$

چون A هرمیتی است، همچنین داریم:

$$\langle a'' | A = a''^* \langle a'' | \quad (۱-۳-۲)$$

که a' و a'' ویژه مقادیر A هستند. اگر $\langle a'' |$ را از سمت چپ در دو طرف (۱-۳-۱) و همچنین $\langle a' |$ را از سمت راست در دو طرف (۱-۳-۲) ضرب و از هم کم کنیم، خواهیم داشت:

$$(a' - a''^*) \langle a'' | a' \rangle = 0 \quad (۱-۳-۳)$$

اکنون a' و a'' می‌توانند یکسان یا متفاوت اتخاذ شوند. بگذارید برای بار اول آن‌ها را یکسان بگیریم؛ آنگاه شرط حقیقی بودن را نتیجه می‌گیریم (نیمه‌ی اول قضیه)

$$a' = a''^* \quad (۴-۳-۱)$$

از این واقعیت که $|a'\rangle$ یک کت تهی نیست استفاده کرده‌ایم. حال اجازه دهید که a' و a'' را متفاوت در نظر بگیریم. چون شرط حقیقی بودن اثبات شد، تفاضل $a'-a''^*$ در $(۱-۳-۳)$ برابر با $a'-a''$ است. که طبق فرض مخالف صفر است. پس ضرب داخلی باید صفر شود:

$$\langle a'' | a' \rangle = 0, \quad (a' \neq a'') \quad (۵-۳-۱)$$

که این اثبات خاصیت تعامد است (نیمه‌ی دوم قضیه). □

از دانسته‌های فیزیکی برمی‌آید که یک مشاهده‌پذیر ویژه مقادیر حقیقی داشته باشد. این گفته در بخش بعد، جایی که در مورد اندازه‌گیری در مکانیک کوانتومی بحث می‌کنیم، روشن خواهد شد. قضیه‌ای که اثبات شد حقیقی بودن ویژه مقادیر عملگرهای هرمیتی را تضمین می‌کند. بدین خاطر است که در مکانیک کوانتومی حرف از مشاهده‌پذیرهای هرمیتی می‌زنیم.

بهرتر است که $|a'\rangle$ را بهنجار کنیم. $\{|a'\rangle\}$ یک مجموعه‌ی متعامد را می‌سازد:

$$\langle a'' | a' \rangle = \delta_{a''a'} \quad (۶-۳-۱)$$

منطقی است که بپرسیم، این مجموعه‌ی ویژه کت کامل است؟ چون ما بحث خود را با این ادعا شروع کردیم که کل فضای کت بوسیله‌ی ویژه کت‌های A ساخته می‌شود. بنابراین می‌بایست ویژه کت‌های A تشکیل فضای کت ما، یک مجموعه‌ی کامل را تشکیل دهند.*

ویژه کت‌ها؛ کت‌های پایه

ملاحظه کردیم که ویژه کت‌های بهنجار شده‌ی A یک مجموعه‌ی کامل را شکل می‌دهند. هر کت دلخواه در فضای کت را می‌توان برحسب ویژه کت‌های A بسط داد. به عبارت دیگر، در فضای اقلیدسی یک مجموعه از بردارهای یک‌ی متعامد به‌عنوان بردارهای پایه مورد استفاده قرار می‌گیرند. در فضای کت‌ها نیز، ویژه کت‌های A به‌عنوان کت‌های پایه به کار برده می‌شوند.

یک کت مشخص و دلخواه $|\alpha\rangle$ در فضای کت توسط ویژه کت‌های A ساخته می‌شود. بگذارید تا

بسط‌مان را به‌صورت زیر بنویسیم:

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle \quad (۷-۳-۱)$$

* خواننده‌ی آگاهی که با مکانیک موجی آشناست، می‌تواند کامل بودن ویژه توابع را با به کار بردن نظریه‌ی اشتروم-لیوویل در معادله موج شرودینگر اثبات کند، اما برای «به‌دست آوردن» معادله موج شرودینگر به‌عنوان اصول موضوعه، کامل بودن ویژه کت‌ها را می‌بایست مفروض داشت.

با ضرب $\langle a'' |$ از سمت چپ و به کار بردن خاصیت تعامد (۶-۳-۱) سریعاً می‌توانیم ضریب بسط را پیدا کنیم.

$$c_{a'} = \langle a' | \alpha \rangle \quad (۸-۳-۱)$$

به عبارت دیگر داریم:

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a' | \alpha \rangle \quad (۹-۳-۱)$$

که با بسط بردار \mathbf{V} در فضای (حقیقی) اقلیدسی قابل مقایسه است:

$$\mathbf{V} = \sum_i \hat{e}_i (\hat{e}_i \cdot \mathbf{V}) \quad (۱۰-۳-۱)$$

که در آن $\{\hat{e}_i\}$ یک مجموعه‌ی متعامد از بردارهای یک‌ه را تشکیل می‌دهد. اکنون دوباره اصل شرکت‌پذیری را یادآور می‌شویم: $\langle a' | \alpha \rangle \langle a'' |$ هم می‌تواند به عنوان ضرب عدد $\langle a' | \alpha \rangle$ در $\langle a'' |$ تفسیر شود و هم، به طوری معادل، می‌تواند به عنوان عمل عملگر $\langle a' | \alpha \rangle$ روی $|\alpha\rangle$ در نظر گرفته شود. از جا که $|\alpha\rangle$ در (۹-۳-۱) یک کت دلخواه است، باید داشته باشیم:

$$\sum_{a'} |a'\rangle \langle a' | = 1 \quad (۱۱-۳-۱)$$

که $\mathbf{1}$ در سمت راست معادله‌ی بالا نشان‌دهنده‌ی عملگر همانی (واحد) است. معادله‌ی (۱۱-۳-۱) به عنوان رابطه‌ی تمامیت یا بستاری شناخته می‌شود.

استخراج کاربرد مفید از (۱۱-۳-۱) مشکل است. می‌توانیم هر کجا که نیاز داشته باشیم عبارت (۱۱-۳-۱) را در بین یک رشته کت، عملگر و یا برای معلوم که به صورت مجاز در هم ضرب شده‌اند، جایگذاری کنیم. برای مثال $\langle a | \alpha \rangle$ را در نظر بگیرید، با وارد کردن عملگر همانی بین $|\alpha\rangle$ و $\langle a |$ داریم:

$$\begin{aligned} \langle a | \alpha \rangle &= \langle a | \cdot \left(\sum_{a'} |a'\rangle \langle a' | \right) \cdot |\alpha\rangle \\ &= \sum_{a'} |\langle a' | \alpha \rangle|^2 \end{aligned} \quad (۱۲-۳-۱)$$

این رابطه نشان می‌دهد که اگر $|\alpha\rangle$ بهنجار باشد، حتماً می‌بایست ضریب بسط در رابطه‌ی (۷-۳-۱) در معادله‌ی زیر صدق کند.

$$\sum_{a'} |c_{a'}|^2 = \sum_{a'} |\langle a' | \alpha \rangle|^2 = 1 \quad (۱۳-۳-۱)$$

بگذارید $\langle a' | a' \rangle$ را که در (۱-۳-۱۱) ظاهر شده است، در نظر بگیریم. از آنجا که این یک ضرب خارجی است باید یک عملگر باشد. این عملگر را بر $|\alpha\rangle$ اثر می دهیم:

$$(|a'\rangle\langle a'|) \cdot |\alpha\rangle = |a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle = c_{a'} |a'\rangle \quad (14-3-1)$$

می بینیم که $\langle a' | a' \rangle$ قسمتی از کت $|\alpha\rangle$ را که با $|a'\rangle$ موازی است انتخاب می کند، بنابراین $\langle a' | a' \rangle$ را به عنوان عملگر تصویر در امتداد کت پایه‌ی $|a'\rangle$ معرفی می کنیم و آن را با $\Lambda_{a'}$ نشان می دهیم.

$$\Lambda_{a'} \equiv |a'\rangle\langle a'| \quad (15-3-1)$$

رابطه‌ی تمامیت (۱-۳-۱۱) را می توان به شکل زیر نوشت:

$$\sum_{a'} \Lambda_{a'} = 1 \quad (16-3-1)$$

نمایش ماتریسی

اکنون با داشتن کت های پایه‌ی انتخاب شده، نشان می دهیم که چطور یک عملگر، مانند X ، با یک ماتریس مربعی نمایش داده می شود. نخست، دو مرتبه از (۱-۳-۱۱) استفاده می کنیم و عملگر X را به صورت زیر می نویسیم:

$$X = \sum_{a''} \sum_{a'} |a''\rangle\langle a''|X|a'\rangle\langle a'| \quad (17-3-1)$$

در مجموع N^2 عدد به شکل $\langle a''|X|a'\rangle$ وجود دارد که N بعد فضای کت است. می توانیم این اعداد را در یک ماتریس مربعی $N \times N$ قرار دهیم، به طوری که ستون و سطر آن را به صورت زیر نشان دهیم:

$$\begin{array}{c} \langle a''|X|a'\rangle \\ \text{row} \quad \text{column} \end{array} \quad (18-3-1)$$

می توانیم ماتریس را به شکل واضح زیر بنویسیم:

$$X \doteq \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|X|a^{(1)}\rangle & \langle a^{(1)}|X|a^{(2)}\rangle & \dots \\ \langle a^{(2)}|X|a^{(1)}\rangle & \langle a^{(2)}|X|a^{(2)}\rangle & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (19-3-1)$$

که در آن علامت \doteq برای "نشان داده می شود" به کار رفته است.*

* در این جا از علامت تساوی استفاده کردیم چون شکل ویژه‌ای از یک ماتریس، بر روی کتهای پایه‌ی خاصی را انتخاب کرده‌ایم. عملگر از نمایش عملگر متفاوت است. همان طور که بازیگر از تصویر بازیگر سواست.

با استفاده از (۳۸-۲-۱) می توان نوشت:

$$\langle a''|X|a' \rangle = \langle a'|X^+|a'' \rangle^* \quad (۲۰-۳-۱)$$

سرانجام، عملگرهای هرمیتی الحاقی که با (۲۴-۲-۱) تعریف می شوند، با مفهوم مزدوج مختلط ترانهاد رابطه دارند. اگر عملگر B هرمیتی باشد، داریم:

$$\langle a''|B|a' \rangle = \langle a'|B|a'' \rangle^* \quad (۲۱-۳-۱)$$

روشی که با آن $\langle a''|X|a' \rangle$ را به صورت یک ماتریس مربعی مرتب کردیم مطابق با قانون ضرب ماتریسی است. برای دیدن این نکته، می بایست به نمایش ماتریسی رابطه‌ی عملگر توجه کنید.

$$Z = XY \quad (۲۲-۳-۱)$$

داریم:

$$\begin{aligned} \langle a''|Z|a' \rangle &= \langle a''|XY|a' \rangle \\ &= \sum_{a'''} \langle a''|X|a''' \rangle \langle a'''|Y|a' \rangle \end{aligned} \quad (۲۳-۳-۱)$$

دوباره، عملگر همانی را همان طور که در (۱۱-۳-۱) آمده بین X و Y وارد کردیم.

حال بگذارید امتحان کنیم که چطور رابطه کت:

$$|\gamma\rangle = X|\alpha\rangle \quad (۲۴-۳-۱)$$

را می توان با استفاده از کت های پایه نمایش داد. ضرایب بسط $|\gamma\rangle$ را می توان با ضرب $|a'\rangle$ از سمت چپ به دست آورد.

$$\begin{aligned} \langle a'|\gamma\rangle &= \langle a'|X|\alpha\rangle \\ &= \sum_{a''} \langle a'|X|a'' \rangle \langle a''|\alpha\rangle \end{aligned} \quad (۲۵-۳-۱)$$

اما این می تواند به عنوان کاربردی از قانون ضرب ماتریس مربعی در یک ماتریس ستونی مدنظر قرار گرفته شود که در آن ضرایب بسط $|\alpha\rangle$ و $|\gamma\rangle$ خودشان به شکل ماتریس های ستونی زیرند:

$$|\alpha\rangle \doteq \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|\alpha\rangle \\ \langle a^{(2)}|\alpha\rangle \\ \langle a^{(3)}|\alpha\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad |\gamma\rangle \doteq \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|\gamma\rangle \\ \langle a^{(2)}|\gamma\rangle \\ \langle a^{(3)}|\gamma\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (۲۶-۳-۱)$$

همین طور داریم:

$$\langle \gamma | = \langle \alpha | X \quad (۲۷-۳-۱)$$

می‌توانیم ببینیم که

$$\langle \gamma | a' \rangle = \sum_{a''} \langle \alpha | a'' \rangle \langle a'' | X | a' \rangle \quad (۲۸-۳-۱)$$

بنابراین یک برا بوسیله‌ی ماتریس سطری به شکل زیر نمایش داده می‌شود.

$$\begin{aligned} \langle \gamma | &\doteq (\langle \gamma | a^{(1)} \rangle, \langle \gamma | a^{(2)} \rangle, \langle \gamma | a^{(3)} \rangle, \dots) \\ &= (\langle a^{(1)} | \gamma \rangle^*, \langle a^{(2)} | \gamma \rangle^*, \langle a^{(3)} | \gamma \rangle^*, \dots) \end{aligned} \quad (۲۹-۳-۱)$$

توجه کنید، هنگامی که آرایه‌های ماتریس ستونی به شکل (۲۹-۳-۱) نوشته شدند، مزدوج مختلط ظاهر می‌شود. ضرب داخلی $\langle \beta | \alpha \rangle$ را می‌توان به شکل ضرب یک ماتریس ستونی همانند $\langle \beta |$ در یک ماتریس سطری، مثل $|\alpha \rangle$ نوشت:

$$\begin{aligned} \langle \beta | \alpha \rangle &= \sum_{a'} \langle \beta | a' \rangle \langle a' | \alpha \rangle \\ &= (\langle a^{(1)} | \beta \rangle^*, \langle a^{(2)} | \beta \rangle^*, \dots) \begin{pmatrix} \langle a^{(1)} | \alpha \rangle \\ \langle a^{(2)} | \alpha \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (۳۰-۳-۱)$$

اگر ماتریس سطری $\langle \alpha |$ را در ماتریس ستونی $\langle \beta |$ ضرب کنیم، مزدوج مختلط عبارت قبل به دست می‌آید، که خاصیت بنیادین ضرب داخلی (۱۲-۲-۱) را نشان می‌دهد. در پایان، نمایش ماتریسی ضرب خارجی $|\beta \rangle \langle \alpha |$ به سادگی به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$|\beta \rangle \langle \alpha | \doteq \begin{pmatrix} \langle a^{(1)} | \beta \rangle \langle a^{(1)} | \alpha \rangle^* & \langle a^{(1)} | \beta \rangle \langle a^{(2)} | \alpha \rangle^* & \dots \\ \langle a^{(2)} | \beta \rangle \langle a^{(1)} | \alpha \rangle^* & \langle a^{(2)} | \beta \rangle \langle a^{(2)} | \alpha \rangle^* & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (۳۱-۳-۱)$$

در حالت خاص، اگر از ویژه‌کت‌های خود A به عنوان کت‌های پایه استفاده کنیم، نمایش ماتریسی مشاهده‌پذیر A بسیار ساده می‌شود. نخست داریم:

$$A = \sum_{a''} \sum_{a'} |a'' \rangle \langle a'' | A | a' \rangle \langle a' | \quad (۳۲-۳-۱)$$

اما آشکارا پیدا است که ماتریس مربعی $\langle a'' | A | a' \rangle$ قطری است.

$$\langle a''|A|a'\rangle = \langle a'|A|a'\rangle \delta_{a'a''} = a' \delta_{a'a''} \quad (۳۳-۳-۱)$$

$$\begin{aligned} A &= \sum_{a'} a' |a'\rangle \langle a'| \\ &= \sum_{a'} a' \Lambda_{a'} \end{aligned} \quad (۳۴-۳-۱)$$

سیستم‌ها با اسپین $\frac{1}{2}$

آموزنده است که در این جا حالت خاصی از سیستم‌ها که اسپین $\frac{1}{2}$ دارند را مورد بررسی قرار دهیم. کت‌های پایه‌ی مورد استفاده $|S_z; \pm\rangle$ هستند که برای اختصار آن‌ها را با $|\pm\rangle$ نشان می‌دهیم. ساده‌ترین عملگری که در فضای کت با $|\pm\rangle$ ساخته می‌شود، عملگر همانی است که طبق رابطه‌ی (۱۱-۳-۱) می‌توان آن را به صورت زیر نوشت:

$$1 = |+\rangle \langle +| + |-\rangle \langle -| \quad (۳۵-۳-۱)$$

طبق رابطه‌ی (۳۴-۳-۱)، می‌بایست قادر باشیم که S_z را به صورت زیر بنویسیم:

$$S_z = (\hbar/2)[(|+\rangle \langle +|) - (|-\rangle \langle -|)] \quad (۳۶-۳-۱)$$

رابطه‌ی ویژه کت - ویژه مقداری

$$S_z |\pm\rangle = \pm (\hbar/2) |\pm\rangle \quad (۳۷-۳-۱)$$

به سرعت از شرط تعامد $|\pm\rangle$ نتیجه گرفته می‌شود.

همچنین آموزنده است که به دو عملگر دیگر توجه کنیم:

$$S_+ \equiv \hbar |+\rangle \langle -|, \quad S_- \equiv \hbar |-\rangle \langle +| \quad (۳۸-۳-۱)$$

که هر دو غیرهرمیتی هستند. عملگر S_+ روی کت اسپین پایین $|- \rangle$ عمل می‌کند و آن را به کت اسپین بالای $|+ \rangle$ ضربدر \hbar تبدیل می‌کند. از دیگر سو، زمانی که S_+ روی کت اسپین بالای $|+ \rangle$ عمل می‌کند، آن را به کت تهی بدل می‌نماید. بنابراین S_+ که به طور فیزیکی این طور تعبیر می‌شود که مؤلفه‌ی اسپین را به اندازه‌ی یک واحد \hbar بالا می‌برد. اگر مؤلفه‌ی اسپین قابلیت افزایش بیشتر نداشته باشد به طور خودکار کت تهی به دست می‌آوریم. به همین ترتیب S_- را می‌توان به صورت عملگری معرفی کرد که مؤلفه‌ی اسپین را به اندازه‌ی یک واحد \hbar پایین می‌آورد. بعداً نشان می‌دهیم که S_{\pm} را می‌توان به شکل $S_x \pm iS_y$ نوشت.

برای تشکیل نمایش‌های ماتریسی عملگرهای تکانه‌ی زاویه‌ای، معمولاً ستون‌ها و سطرها را به‌شکل نزولی برحسب مؤلفه‌های تکانه‌ی زاویه‌ای مشخص می‌کنیم. یعنی، اولی متناظر با بیشینه‌ی مؤلفه‌های تکانه زاویه‌ای می‌گردد و دومی با بزرگ‌ترین مقدار بعدی و الی آخر. در مورد خاص اسپین $\frac{1}{2}$ ، داریم:

$$|+\rangle \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle \doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1-3-39 \text{ الف})$$

$$S_z \doteq \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad S_+ \doteq \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_- \doteq \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1-3-39 \text{ ب})$$

وقتی که در فصل ۳ راجع به فرمول‌بندی دو مؤلفه‌ای پاؤلی بحث می‌کنیم، به این روابط رجوع خواهیم کرد.

۴.۱ اندازه‌گیری‌ها، مشاهده‌پذیرها و روابط عدم قطعیت

اندازه‌گیری

پس از شرح ریاضیات فضای کت، اکنون در وضعیتی هستیم که نظریه‌ی کوانتومی فرآیندهای اندازه‌گیری را مورد بحث قرار دهیم. این مسأله برای شروع چندان ساده نیست، بنابراین به‌عنوان راهنمایی جمله‌ای از استاد بزرگ فیزیک، پی، ای. ام، دیراک، نقل می‌کنیم: "همواره یک اندازه‌گیری باعث می‌شود که سیستم به یکی از ویژه‌حالت‌های متغیر دینامیکی که در حال اندازه‌گیری است پرش کند" معنی این عبارت چیست؟ ما گفته‌ی ویراک را به‌این صورت تفسیر می‌کنیم که: پیش از آن که اندازه‌گیری روی مشاهده‌پذیر A صورت گیرد، فرض می‌شود که سیستم با یک ترکیب خطی نمایش داده می‌شود:

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|\alpha\rangle \quad (1-4-1)$$

هنگامی که اندازه‌گیری کامل می‌شود، سیستم به یکی از ویژه‌حالت‌ها "جهش" می‌کند. به‌عبارت دیگر:

$$|\alpha\rangle \xrightarrow{\text{اندازه‌گیری } A} |a'\rangle \quad (2-4-1)$$

به‌عنوان مثال، یک اتم نقره با جهت اسپین اختیاری، هنگامی که با یک دستگاه اشترن-گرلاخ از نوع SG_z مواجه می‌شود می‌تواند هر کدام از حالت‌های $|S_z; +\rangle$ یا $|S_z; -\rangle$ را اتخاذ کند. بنابراین یک اندازه‌گیری معمولاً حالت را تغییر می‌دهد. تنها استثنا وقتی است که حالت ابتدایی یکی از ویژه‌حالت‌های خود مشاهده‌پذیر تحت اندازه‌گیری باشد. در این مورد:

$$|a'\rangle \xrightarrow{\text{اندازه‌گیری } A} |a'\rangle \quad (3-4-1)$$

همان طور که بعداً راجع به آن بحث خواهیم کرد، می توان راجع به رابطه‌ی بالا مطمئن بود. وقتی اندازه گیری موجب شود که $\langle \alpha |$ به $\langle a' |$ تغییر یابد، گفته می شود که حاصل اندازه گیری A برابر با a' است. یعنی نتیجه‌ی اندازه گیری، یکی از ویژه مقادیر مشاهده پذیر تحت اندازه گیری می باشد.

با داشتن (۱-۴-۱)، که همان کت حالت سیستم فیزیکی پیش از اندازه گیری است، نمی توان دانست که سیستم به عنوان نتیجه‌ی اندازه گیری کدام یک از حالت های مختلف $\langle a' |$ را کسب می کند. به عنوان اصل موضوع بیان می کنیم که احتمال پرش به یک $\langle a' |$ خاص برابر است با

$$a' \text{ احتمال} = |\langle a' | \alpha \rangle|^2 \quad (۴-۴-۱)$$

به شرطی که $\langle \alpha |$ بهنجار شده باشد.

اگرچه تاکنون درباره‌ی یک سیستم فیزیکی منفرد صحبت کرده ایم، برای اینکه (۴-۴-۱) را به طور تجربی به دست آوریم، می بایست تعداد اندازه گیری بیشتری را روی یک آنسامبل (یعنی یک مجموعه) از سیستم های فیزیکی که بطور یکسان ساخته شده اند، انجام داد. همه‌ی این سیستم ها را با کت $\langle \alpha |$ نمایش می دهیم. به چنین آنسامبلی، یک آنسامبل خالص می گوئیم (درباره‌ی آنسامبل در فصل ۳ بیشتر صحبت می کنیم). به عنوان یک مثال، یک پرتو اتم نقره، که از نخستین دستگاه SG_2 در شکل ۱-۳ گذشته است و مؤلفه‌ی S_z آن بسته شده است، نمونه‌ای از یک آنسامبل خالص است. چون هر اتم عضو این آنسامبل با SG_2 مشخص می شود.

تعبیر احتمالاتی (۴-۴-۱) برای مربع ضرب داخلی $\langle a' | \alpha \rangle$ ، یکی از اصول موضوعه‌ی بنیادین در مکانیک کوانتومی است، بنابراین قابل اثبات نیست. این اصل در موارد بسیار زیادی نتایج خوبی به دست می دهد. فرض کنید کت حالت حتی قبل از اندازه گیری $\langle a' |$ باشد؛ پس بنابه (۴-۴-۱) احتمال حاصل شدن a' یا به طور دقیق تر، احتمال قرار گرفتن در $\langle a' |$ به عنوان نتیجه‌ای از اندازه گیری برابر با ۱ است که این، همان چیزی است که انتظار داریم. با یک بار دیگر اندازه گرفتن A ، نیز تنها $\langle a' |$ را به دست می آوریم. ^۳ به طور کلی، تکرار اندازه گیری های پی در پی یک مشاهده پذیر یکسان، نتایج یکسانی را می دهد. ^۴ به عبارت دیگر، اگر بخواهیم احتمال پرش سیستمی را که در حالت های ابتدایی $\langle a' |$ قرار دارد به ویژه کت دیگر $\langle a'' |$ به طوری که $a' \neq a''$ باشد را به دست آوریم، آنگاه (۴-۴-۱) صفر می شود. این به خاطر تعامد $\langle a' |$ و $\langle a'' |$ است. از نقطه نظر نظریه‌ی اندازه گیری، کت های متعامد با یکدیگر جمع ناپذیراند. برای مثال، اثر یک سیستم که با اسپین $\frac{1}{2}$ در $\langle S_z; + \rangle$ باشد، مطمئناً نمی تواند در $\langle S_z; - \rangle$ موثر باشد.

^۳ دقت کنید که $\langle a' |$ ویژه کت عملگر A است (توضیح مترجم).

^۴ در اینجا می بایست اندازه گیری های متوالی، به سرعت پشت سرهم واقع شوند. هنگامی که در فصل ۲ راجع به تحول زمانی کت حالت بحث می کنیم این نکته روشن خواهد شد.

به طور کلی، احتمال وقوع هر چیزی غیر منفی است. همچنین، جمع احتمالات مختلف برای یک رخداد برابر با ۱ است. هر دوی این انتظارات را می توان در اصل موضوعه‌ی احتمالاتی (۴-۴-۱) دید.

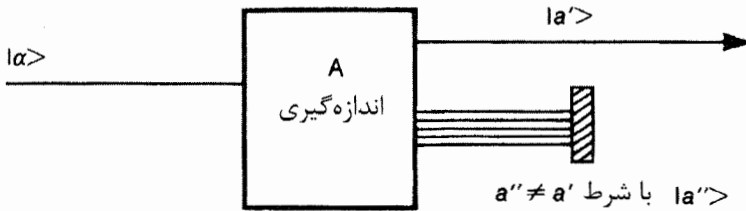
مقدار انتظاری A نسبت به حالت $|\alpha\rangle$ برابر است با:

$$\langle A \rangle \equiv \langle \alpha | A | \alpha \rangle \quad (۵-۴-۱)$$

برای نشان دادن حالت $|\alpha\rangle$ گاهی از نماد گذاری $\langle A \rangle_\alpha$ استفاده می کنیم. معادله‌ی (۵-۴-۱) یک تعریف است اما با این حال با درک ما از مقدار میانگین اندازه گیری در توافق است. چون می توان نوشت:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_{a'} \sum_{a''} \langle \alpha | a'' \rangle \langle a'' | A | a' \rangle \langle a' | \alpha \rangle \\ &= \sum_{a'} \underbrace{\langle \alpha | a' \rangle^2}_{\text{احتمال به دست آوردن } a'} \underbrace{a'}_{\text{مقدار اندازه گیری شده } a'} \end{aligned} \quad (۶-۴-۱)$$

بسیار مهم است که ویژه مقادیر را با مقادیر انتظاری اشتباه نگیریم. برای مثال مقدار انتظاری S_z برای سیستم اسپین $\frac{1}{2}$ می تواند هر مقدار حقیقی بین $-\hbar/2$ تا $+\hbar/2$ باشد؛ مثلاً $0.273\hbar$ در حالی که، ویژه مقادیر S_z تنها دو مقدارند: $\hbar/2$ و $-\hbar/2$.



شکل ۶-۱: اندازه گیری انتخابی

برای فهم بهتر مفهوم اندازه گیری در مکانیک کوانتومی، روش اندازه گیری انتخابی یا صافی را معرفی می کنیم. در بخش ۱-۱ تنظیم دستگاه اشترن-گرلاخ را طوری قرار دادیم که تنها یک مؤلفه‌ی اسپین از دستگاه گذر کند و مؤلفه‌ی دیگر را کاملاً بستیم. به طور کلی تر، فرآیندهای اندازه گیری را با دستگاهی که تنها یکی از ویژه کت های A را انتخاب می کند، انجام دادیم. در شکل ۶-۱ می بینید که $|\alpha\rangle$ عبور کرده و بقیه حذف می شوند. این روشی است که به آن اندازه گیری انتخابی گفته می شود. به این روش صافی کردن هم گفته می شود. چون تنها یکی از ویژه کت های A در طول آزمایش انتخاب می شود. به شکل ریاضی می توان گفت که این اندازه گیری انتخابی به معنی اعمال عملگر تصویر $\Lambda_{a'}$ به $|\alpha\rangle$ است:

$$\Lambda_{a'} |\alpha\rangle = |a'\rangle \langle a' | \alpha \rangle \quad (۷-۴-۱)$$

جی. شوینگر بر پایه‌ی آزمودن اندازه‌گیری‌های انتخابی، فرمول‌بندی برای مکانیک کوانتومی ارائه کرد. وی در ابتدا $M(a')$ را به‌عنوان نشانه‌ی اندازه‌گیری معرفی کرد. این نشانه در فرمول‌بندی ما همانند $\Lambda_{a'}$ یا $\langle a'|a'\rangle$ است. سپس با مطالعه بر روی خروجی‌های مختلف آزمایش‌های اشتزن-گرلاخ بخشی از مشخصات $M(a')$ (و همچنین $M(b', a')$ که با $\langle a'|b'\rangle$ تعریف می‌شود) را به‌دست آورد. با این روش از تمام ریاضیات مربوط به کت‌ها، براها و عملگرها را توجیه کرد. ما در این کتاب روش شوینگر را پی نمی‌گیریم. خوانندگان علاقه‌مند را به کتاب گاتفرید ارجاع می‌دهیم. (گاتفرید ۱۹۹۶ و ۱۹۲-۹)

یک بار دیگر سیستم‌های اسپین $\frac{1}{2}$

پیش از آنکه به یک بحث کلی درباره‌ی مشاهده‌پذیرها بپردازیم یک بار دیگر سیستم‌های اسپین $\frac{1}{2}$ را بررسی می‌کنیم. این بار نشان می‌دهیم هنگامی که نتایج آزمایش‌های متوالی اشتزن-گرلاخ با اصول موضوعه‌ی مکانیک کوانتومی که پیش‌تر بیان کردیم، در هم آمیزند، نه تنها ویژه‌کت‌های $S_{x,y}$ ، $\langle \pm |S_x; \pm \rangle$ و $\langle \pm |S_y; \pm \rangle$ را مشخص می‌کنند بلکه خود عملگرهای S_x و S_y را نیز تعیین می‌نمایند.

نخست، یادآوری می‌کنیم، هنگامی که پرتو $S_x +$ با یک دستگاه نوع $SG\hat{z}$ روبه‌رو می‌شود، به دو پرتو با شدت‌های مساوی تقسیم می‌شود. به این معنی که احتمال اینکه حالت $S_x +$ به هر کدام از حالت‌های $\langle \pm |S_y; \pm \rangle$ یا به‌طور ساده‌تر $\langle \pm |$ جهش کند برابر $\frac{1}{2}$ است. بنابراین:

$$\langle + |S_x; + \rangle = \langle - |S_x; + \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (۸-۴-۱)$$

بنابراین می‌توان کت $S_x +$ را به‌شکل زیر تشخیص داد:

$$|S_x; + \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\delta_1}|-\rangle \quad (۹-۴-۱)$$

که δ_1 حقیقی است. در نوشتن رابطه‌ی (۹-۴-۱) از این واقعیت که فاز کلی (مشترک بین $|+\rangle$ و $|-\rangle$) کت حالت بی‌اهمیت است، سود برده‌ایم. بنا به قرارداد، می‌توان ضریب $|+\rangle$ را حقیقی و مثبت در نظر گرفت. کت $S_x -$ می‌بایست بر $S_x +$ عمود باشد، چون $S_x +$ و $S_x -$ با یکدیگر جمع‌ناپذیراند. این شرط تعامد، نتیجه زیر را به‌دست می‌دهد:

$$|S_x; - \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\delta_1}|-\rangle \quad (۱۰-۴-۱)$$

که دوباره بنا به قرارداد ضریب $\langle + |$ را حقیقی و مثبت در نظر می‌گیریم. اکنون می‌توانیم عملگر S_x را با توجه به $(1-3-34)$ به صورت زیر بنویسیم:

$$\begin{aligned} S_x &= \frac{\hbar}{2} [(|S_x; + \rangle \langle S_x; + |) - (|S_x; - \rangle \langle S_x; - |)] \\ &= \frac{\hbar}{2} [e^{-i\delta_1} (|+ \rangle \langle - |) + e^{i\delta_1} (|- \rangle \langle + |)] \end{aligned} \quad (11-4-1)$$

توجه کنید که S_x که تشکیل داده‌ایم هرمیتی است، درست همان‌طور که باید باشد. با یک استدلال مشابه و جایگزینی S_y با S_x داریم:

$$|S_y; \pm \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\delta_2} |- \rangle \quad (12-4-1)$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2} [e^{-i\delta_2} (|+ \rangle \langle - |) + e^{i\delta_2} (|- \rangle \langle + |)] \quad (13-4-1)$$

آیا راهی برای مشخص کردن δ_1 و δ_2 وجود دارد؟ در حقیقت تنها یک قسمت از اطلاعات مانده است که هنوز از آن استفاده نکرده‌ایم. فرض کنید که یک پرتو از اتم‌های اسپین $\frac{1}{2}$ داریم که در جهت Z حرکت می‌کنند. حال می‌توانیم یک دسته از دستگاه‌های اشترن-گرلاخ SG_x و SG_z در نظر بگیریم که پشت سرهم، سر راه پرتو قرار گرفته‌اند. نتیجه‌ی این آزمایش کاملاً شبیه نتیجه‌ای است که پیش از این به $(1-4-8)$ منتهی شد.

$$\langle S_y; \pm | S_x; + \rangle = \langle S_y; \pm | S_x; - \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (14-4-1)$$

که با توجه به ناوردایی سیستم‌های فیزیکی تحت دوران، چیز عجیبی نیست. با قرار دادن $(1-4-10)$ و $(12-4-1)$ در $(14-4-1)$ رابطه‌ی زیر را به دست می‌آوریم:

$$\frac{1}{2} |1 \pm e^{i(\delta_1 - \delta_2)}| = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (15-4-1)$$

این رابطه تنها وقتی برقرار است که

$$\delta_2 - \delta_1 = \pi/2 \quad \text{or} \quad -\pi/2 \quad (16-4-1)$$

بنابراین همه‌ی آرایه‌های ماتریس S_x و S_y نمی‌توانند حقیقی باشند. اگر آرایه‌های ماتریس S_x حقیقی باشند، آرایه‌های ماتریس S_y می‌بایست تماماً موهومی محض باشند (و بالعکس). با توجه به همین سؤال خیلی ساده، نقش محسوس اعداد مختلط در مکانیک کوانتومی، دیده می‌شود. بنابر قرارداد آرایه‌های ماتریس S_x را

حقیقی اختیار می‌کنیم* و $\delta_1 = 0$ قرار می‌دهیم. اگر $\delta_1 = \pi$ اختیار شود، جهت مثبت محور x به جهت مخالف می‌چرخد. زاویه‌ی فاز دوم δ_2 باید $-\pi/2$ یا $\pi/2$ باشد. این واقعیت که هنوز ابهامی از این نوع وجود دارد، عجیب نیست. ما هنوز مشخص نکرده‌ایم که از کدام سیستم مختصات، راستگرد یا چپگرد، بهره می‌گیریم. با داشتن جهت x و z هنوز جهت مثبت محور y نامعلوم است. بعداً عملگر تکانه‌ی زاویه‌ای را به‌عنوان یک مولد چرخش در سیستم دستگاه مختصات راستگرد مورد بررسی قرار خواهیم داد. بنابراین، می‌توان نشان داد که $\delta_2 = \pi/2$ انتخاب صحیح است.

برای جمع‌بندی داریم:

$$|S_x; \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle \quad (۱۷-۴-۱) \text{ الف}$$

$$|S_y; \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle \pm \frac{i}{\sqrt{2}}|-\rangle \quad (۱۷-۴-۱) \text{ ب}$$

و

$$S_x = \frac{\hbar}{2} [(|+\rangle\langle -|) + (|-\rangle\langle +|)] \quad (۱۸-۴-۱) \text{ الف}$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2} [-i(|+\rangle\langle -|) + i(|-\rangle\langle +|)] \quad (۱۸-۴-۱) \text{ ب}$$

همان‌طور که می‌بینید ویژه‌کت‌های $S_x \pm$ و $S_y \pm$ که در این جا به‌دست آوردیم با حدس‌های قبلی‌مان که مبتنی بر مقایسه با نور قطبیده‌ی خطی و دایروی بود، مطابقت دارد (توجه کنید که در این مقایسه، تنها فاز نسبی است که بین مؤلفه‌های $|+\rangle$ و $|-\rangle$ اهمیت فیزیکی دارد). همچنین عملگرهای غیرهرمیتی S_{\pm} که با (۳۸-۳-۱) تعریف شدند را می‌توان به‌صورت زیر نوشت:

$$S_{\pm} = S_x \pm iS_y \quad (۱۹-۴-۱)$$

به سادگی می‌توان نشان داد که عملگرهای S_x و S_y ، به‌همراه S_z در روابط جابجایی زیر صدق می‌کنند:

$$[S_i, S_j] = i\epsilon_{ijk} \hbar S_k \quad (۲۰-۴-۱)$$

و رابطه‌ی پاد جابه‌جایی زیر برای آن‌ها برقرار است

$$\{S_i, S_j\} = \frac{1}{2} \hbar^2 \delta_{ij} \quad (۲۱-۴-۱)$$

* همیشه می‌توان یک عامل فاز اختیاری را به تعریف $|+\rangle$ و $|-\rangle$ افزود. در فصل ۳ وقتی که رفتار $| \pm \rangle$ تحت دوران مورد بررسی قرار می‌گیرد، این نکته روشن‌تر خواهد شد.

که جابه‌جایی $[,]$ و پاد جابه‌جایی $\{, \}$ را به شکل زیر تعریف می‌کنیم:

$$[A, B] \equiv AB - BA \quad (۴-۲۲ الف)$$

$$\{A, B\} \equiv AB + BA \quad (۴-۲۲ ب)$$

روابط جابه‌جایی در (۴-۲۰) ساده‌ترین روابط تکانه‌ی زاویه‌ای را، که در فصل ۳ جزئیات آن مورد بحث قرار می‌گیرد، خاطر نشان می‌کند. روابط پاد جابه‌جایی در (۴-۲۱) خاصیت ویژه‌ای از سیستم‌های اسپین $\frac{1}{2}$ است.

همین طور می‌توانیم عملگر $S_x S_x$ یا به طور اختصار S^2 را به صورت زیر معرفی کنیم:

$$S^2 \equiv S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 \quad (۴-۲۳)$$

با توجه به (۴-۲۱) این عملگر تنها از ضرب یک ثابت در عملگر همانی حاصل می‌شود:

$$S^2 = \left(\frac{3}{4}\right) \hbar^2 \quad (۴-۲۴)$$

به طور روشن داریم:

$$[S^2, S_i] = 0 \quad (۴-۲۵)$$

که در فصل ۳، آن را اثبات خواهیم کرد. برای اسپین‌های بیش از $\frac{1}{2}$ ، دیگر S^2 ضریبی از عملگر همانی نیست، اما (۴-۲۵) همچنان برقرار است.

مشاهده‌پذیرهای سازگار

اکنون به فرمول‌بندی کلی می‌رسیم و در مورد مشاهده‌پذیرهای سازگار در برابر مشاهده‌پذیرهای ناسازگار بحث می‌کنیم. مشاهده‌پذیرهای A و B را وقتی که عملگرهای نظیر آن‌ها با هم جابه‌جا شوند، سازگار می‌گوییم:

$$[A, B] = 0 \quad (۴-۲۶)$$

و وقتی که

$$[A, B] \neq 0 \quad (۴-۲۷)$$

ناسازگارند. برای مثال، S^2 و S_z مشاهده‌پذیرهای سازگارند. در حالی که S_x و S_y مشاهده‌پذیرهای ناسازگاری هستند.

حال بگذارید ابتدا مشاهده‌پذیرهای سازگار A و B را در نظر بگیریم. به‌طور معمول، فرض می‌کنیم که فضای کت با ویژه توابع A ساخته شده‌اند. همچنین می‌توان فضای کت یکسانی را در نظر گرفت که از ویژه کت‌های B تشکیل شده‌اند. اکنون می‌پرسیم؛ وقتی که A و B مشاهده‌پذیرهای سازگار هستند، چه رابطه‌ای بین ویژه‌گی‌های A و B برقرار است؟

قبل از جواب به این سؤال می‌بایست به نکته‌ی خیلی مهمی که پیش‌تر از آن گذشتیم، توجه کنیم. این نکته مفهوم تبهگنی است. فرض کنید دو (یا چند) ویژه کت مستقل خطی A دارای یک ویژه مقدار هستند، آنگاه به ویژه مقادیر دو ویژه کت تبهگن گفته می‌شود. در چنین موردی نماد $|a'\rangle$ که ویژه کت با ویژه مقادیر مشخص شده است، توصیف کاملی به ما نمی‌دهد. به علاوه، یادآوری می‌کنیم که پیش‌تر قضیه‌ی تعامد ویژه کت‌های مختلف را بدون فرض تبهگنی اثبات کردیم. حتی بدتر از این، هنگامی که ابعاد فضای کت، بزرگ‌تر از تعداد ویژه مقادیر مجازی A می‌شود، تمام مفاهیمی که در تشکیل فضای کت با $\{|a'\rangle\}$ به دست آمد، دچار مشکل می‌شود. خوشبختانه، در کاربردهای عملی مکانیک کوانتومی، به‌طور معمول در چنین حالتی، از ویژه مقادیر مشاهده‌پذیر مشابه دیگری که با عملگرها جابه‌جا می‌شود، مثلاً B ، برای مشخص کردن ویژه کت‌های تبهگن استفاده می‌شود.

اکنون برای بیان یک قضیه مهم آماده‌ایم:

قضیه. فرض کنید A و B مشاهده‌پذیرهای سازگاری هستند و ویژه مقادیر A غیرتبهگن است. آنگاه ماتریس $\langle a''|B|a'\rangle$ قطری است (یادآوری می‌کنیم که اگر $|a'\rangle$ به‌عنوان کت‌های پایه استفاده شود، ماتریس A نیز قطری است).

اثبات. اثبات این قضیه‌ی مهم، بسیار ساده است. با استفاده از تعریف (۴-۱-۲۶) برای مشاهده‌پذیرهای سازگار، می‌بینیم که:

$$\langle a''|[A, B]|a'\rangle = (a'' - a')\langle a''|B|a'\rangle = 0 \quad (۴-۱-۲۸)$$

بنابراین $\langle a''|B|a'\rangle$ صفر است مگر آن که $a' = a''$ باشد و اثبات ما کامل می‌شود. □

می‌توانیم آرایه‌های ماتریسی B را به شکل زیر بنویسیم.

$$\langle a''|B|a'\rangle = \delta_{a'a''}\langle a'|B|a'\rangle \quad (۴-۱-۲۹)$$

بنابراین می‌توان A و B را با ماتریس‌های قطری، با مجموعه یکسانی از کت‌های پایه نشان داد. با استفاده از (۳-۱-۱۷) و (۴-۱-۲۹) می‌توانیم B را به صورت زیر بنویسیم:

$$B = \sum_{a''} |a''\rangle \langle a''|B|a''\rangle \langle a''| \quad (۴-۱-۳۰)$$

فرض کنید این عملگر روی یک ویژه کت A اثر کند:

$$B|a'\rangle = \sum_{a''} |a''\rangle \langle a''|B|a'\rangle \langle a''|a'\rangle = (\langle a'|B|a'\rangle)|a'\rangle \quad (۳۱-۴-۱)$$

اما این چیزی جز معادله‌ی ویژه مقدری برای عملگر B با ویژه مقدار

$$b' \equiv \langle a'|B|a'\rangle \quad (۳۲-۴-۱)$$

نیست. بنابراین کت $|a'\rangle$ ویژه کت همزمان A و B است. برای آنکه تفاوتی بین دو عملگر نگذاشته باشیم می‌توانیم برای نمایش این کت‌های همزمان از نشانه $|a', b'\rangle$ استفاده کنیم.

مشاهده کردیم که مشاهده‌پذیرهای جابه‌جا شونده، ویژه کت‌های همزمان دارند. هرچند که این اثبات برای حالتی که ویژه کت‌های A غیر تبهگن هستند ارائه شد، اما حتی در حضور تبهگنی n -گانه نیز این بیان صادق است. بنابراین:

$$A|a^{(i)}\rangle = a'|a^{(i)}\rangle \quad \text{for } i=1,2,\dots,n \quad (۳۳-۴-۱)$$

کت $|a^{(i)}\rangle$ ، n کت متعامد A هستند، که همه یک ویژه مقدار a' دارند. در این حالت برای قطری کردن B می‌بایست یک ترکیب خطی از $|a^{(i)}\rangle$ ‌ها ارائه دهیم. قطری کردن عملگر B طی مراحلی که در بخش ۱-۵ مورد بحث قرار می‌گیرد، انجام می‌شود.

کت همزمان A و B که با $|a', b'\rangle$ نشان داده می‌شود، هنگامی که در آن تبهگنی وجود نداشته باشد، دارای خواص زیر است:

$$A|a', b'\rangle = a'|a', b'\rangle \quad (۳۴-۴-۱ \text{ الف})$$

$$B|a', b'\rangle = b'|a', b'\rangle \quad (۳۴-۴-۱ \text{ ب})$$

این نشانه‌گذاری گاهی اضافه به نظر می‌رسد. چون از (۳۲-۴-۱) پیداست که اگر a' را مشخص کنیم، لزوماً b' را می‌دانیم که در $|a', b'\rangle$ ظاهر می‌شود. نشانه‌گذاری $|a', b'\rangle$ وقتی که تبهگنی وجود داشته باشد قدرتمندتر به نظر می‌رسد. برای روشن شدن این مطلب ارائه‌ی یک مثال ساده مفید است.

هرچند در این کتاب تا فصل ۳ به بحث کاملی راجع به تکانه‌ی زاویه‌ای مداری نمی‌رسیم، اما خواننده احتمالاً با توجه به آموزش‌های پیش از این در مکانیک موجی می‌داند که ویژه مقادیر L^2 (مربع تکانه‌ی زاویه‌ای مداری) و L_z (مؤلفه‌ی z تکانه زاویه‌ای مداری) به ترتیب $\hbar l(l+1)$ و $m_l \hbar$ هستند. که با یک عدد صحیح مثبت و $m_l = -l, -l+1, \dots, +l$ برای نشان دادن یک حالت تکانه زاویه‌ای مداری کفایت

می کنند. لازم است که هم l و هم m_l تعیین شوند. برای مثال، اگر ما بگوییم $l = 1$ است، مقدار m_l می تواند $+1$ و 0 و -1 باشد. اگر بگوییم $m_l = 1$ و l می تواند 1 و 2 و 3 و باشد، تنها با مشخص کردن هم l و هم m_l موفق به مشخص کردن حالت تکانه زاویه ای مدار می خواهیم شد. اغلب یک شاخص جمع K' برای (a', b') به کار برده می شود. بنابراین:

$$|K'\rangle = |a', b'\rangle \quad (35-4-1)$$

به وضوح می توانیم نتایج خود را به حالتی که چندین (بیشتر از دو تا) مشاهده پذیر دو به دو سازگار داریم، تعمیم دهیم:

$$[A, B] = [B, C] = [A, C] = \dots = 0 \quad (36-4-1)$$

فرض کنید که بزرگ ترین مجموعه از مشاهده پذیرهای جابه جا شونده را پیدا کردیم. بنابراین نمی توانیم بدون در نظر گرفتن (36-4-1)، مشاهده پذیر دیگری را به مجموعه ای خود اضافه کنیم. ویژه مقادیر عملگرهای مجزای A و B و C ممکن است تبهگن باشند. اما اگر ترکیبی از (a', b', c', \dots) را معین کنیم، آنگاه ویژه کت های همزمان متناظر با A و B و C و به طور یکتا تعیین خواهند شد. می توانیم دوباره از یک شاخص جمع K' برای بیان (a', b', c', \dots) استفاده کنیم.

$$|K'\rangle = |a', b', c', \dots\rangle \quad (37-4-1)$$

داریم:

$$\langle K'' | K' \rangle = \delta_{K'K''} = \delta_{aa'} \delta_{bb'} \delta_{cc'} \dots \quad (38-4-1)$$

در حالی که رابطه ی تمامیت، یا بستاری، به صورت زیر نوشته می شود:

$$\sum_{K'} |K'\rangle \langle K'| = \sum_{a'} \sum_{b'} \sum_{c'} \dots |a', b', c', \dots\rangle \langle a', b', c', \dots| = 1 \quad (39-4-1)$$

اکنون اندازه گیری A و B را مورد توجه قرار می دهیم. البته وقتی که این دو مشاهده پذیرهای سازگار باشند. فرض می کنیم ابتدا A را اندازه می گیریم و a' را به عنوان نتیجه به دست می آوریم. پشت سر آن می توانیم B را اندازه گیری کرده و b' را به دست آوریم. در نهایت دوباره A را اندازه می گیریم. با تبعیت از روش های اندازه گیری با اطمینان می دانیم که نتیجه ی سومین اندازه گیری a' است. بنابراین دومین اندازه گیری (اندازه گیری B) اطلاعات قبلی ما را که از نخستین اندازه گیری به دست آمده بود، از بین نمی برد. وقتی که ویژه مقادیر A غیر تبهگن باشند این مطلب واضح تر است:

$$|\alpha\rangle \xrightarrow{\text{اندازه گیری } A} |a', b'\rangle \xrightarrow{\text{اندازه گیری } B} |a', b'\rangle \xrightarrow{\text{اندازه گیری } A} |a', b'\rangle \quad (40-4-1)$$

وقتی که تبهگنی داشته باشیم، این حالت پیش می‌آید که، پس از اولین اندازه‌گیری (اندازه‌گیری A)، که a' را نتیجه می‌دهد، سیستم به یکی از ترکیب‌های خطی خود پرش می‌کند.

$$\sum_i^n c_a^{(i)} |a', b^{(i)}\rangle \quad (۴۱-۴-۱)$$

n درجه‌ی تبهگنی است و تا زمانی که عملگر A مورد نظر باشد، کت‌های $|a', b^{(i)}\rangle$ ویژه مقادیر یکسان a' را دارند. دومین اندازه‌گیری (اندازه‌گیری B) تنها یک جمله در ترکیب خطی (۴۱-۴-۱) را انتخاب می‌کند، مثلاً $|a', b^{(i)}\rangle$ ، اما با انجام سومین اندازه‌گیری (اندازه‌گیری A) همچنان a' به دست می‌آید. چه تبهگنی وجود داشته باشد، چه نداشته باشد، اندازه‌گیری‌های A و B مزاحمتی برای هم ایجاد نمی‌کند. پس لغت سازگار در حقیقت عبارت مناسبی است.

مشاهده‌پذیرهای ناسازگار

اکنون به مشاهده‌پذیرهای ناسازگار که کلی‌ترند می‌پردازیم. اولین نکته‌ای که باید مورد تأکید قرار گیرد آن است که برای ناسازگار بودن، مشاهده‌پذیرها نباید یک مجموعه‌ی کامل از ویژه‌کت‌های همزمان داشته باشند. برای نشان دادن این مطلب، بگذارید تصور کنیم که عکس آن صادق است. آنگاه می‌باید یک مجموعه از مشاهده‌پذیرهای همزمان با مشخصات (۴-۳۴-الف) و (۴-۳۴-ب) وجود داشته باشد. به وضوح داریم:

$$AB|a', b'\rangle = Ab'|a', b'\rangle = a'b'|a', b'\rangle \quad (۴۲-۴-۱)$$

همچنین:

$$BA|a', b'\rangle = Ba'|a', b'\rangle = a'b'|a', b'\rangle \quad (۴۳-۴-۱)$$

بنابراین:

$$AB|a', b'\rangle = BA|a', b'\rangle \quad (۴۴-۴-۱)$$

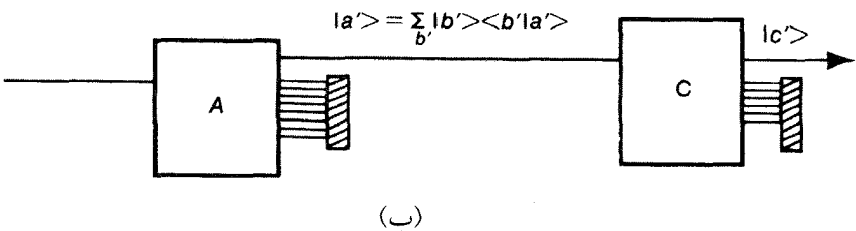
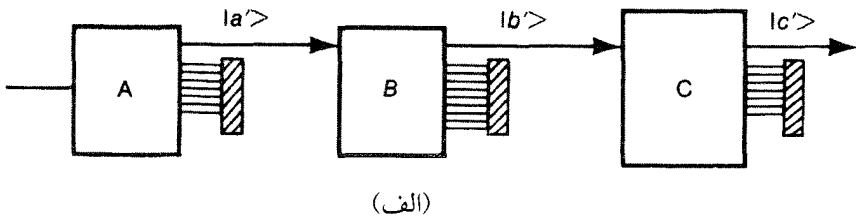
و بنابراین $[A, B] = 0$ ، که در تناقض با فرض است. بنابراین در حالت کلی، $|a', b'\rangle$ برای مشاهده‌پذیرهای ناسازگار معنی خاصی نمی‌سازد. هرچند یک استثنای جالب وجود دارد. ممکن است با وجود آن که A و B ناسازگار هستند، حالتی اتفاق افتد که در آن، زیرفضایی از فضای کت وجود داشته باشد که برای تمام اعضای این زیرفضا، رابطه‌ی (۴۴-۴-۱) برقرار باشد. یک مثال از نظریه‌ی تکانه‌ی زاویه‌ای مداری می‌تواند در این جا مفید واقع شود. حالت $l = 0$ (حالت s) را در نظر می‌گیریم. با وجود آنکه L_x و L_z جابه‌جا نمی‌شوند اما این حالت یک ویژه‌کت همزمان برای L_x و L_z است (با ویژه مقدار صفر برای هر دو عملگر). زیرفضا در این حالت تک‌بعدی است.

زمانی که در بخش ۱-۱ راجع به آزمایش‌های متوالی اشترن-گرلاخ بحث می‌کردیم با برخی از ویژگی‌های مشاهده‌پذیرهای ناسازگار مواجه شدیم. اکنون بحث کلی‌تری راجع به این آزمایش‌ها انجام می‌دهیم. چند اندازه‌گیری انتخابی متوالی را همان‌گونه که در شکل (۷-۱-الف) نشان داده شده است، در نظر بگیرید. اولین دستگاه (A) برخی از $|a'\rangle$ ‌های خاص را انتخاب می‌کند و بقیه را برمی‌گرداند. دومین دستگاه (B) نیز برخی از $|b'\rangle$ ‌های خاص را انتخاب و بقیه را حذف می‌کند و سومین دستگاه (C) نیز مقداری از $|c'\rangle$ ‌های خاص را انتخاب می‌کند و بقیه را برمی‌گرداند. می‌خواهیم زمانی که پرتوی خروجی از اولین فیلتر به یک بهنجار شده است، احتمال به‌دست آوردن $|c'\rangle$ را پیدا کنیم. از آن‌جا که احتمالات ضرب‌پذیر هستند، به‌وضوح داریم:

$$|\langle c'|b'\rangle|^2 |\langle b'|a'\rangle|^2 \quad (۴۵-۴-۱)$$

اکنون بگذارید با جمع روی b' ، احتمال کل را برای تمام خروجی‌های b' پیدا کنیم. در عمل این بدان معنی است که نخست احتمال به‌دست آوردن c' را در زمانی بیابیم که تمام b' ‌ها به‌جز اولی مسدود شده‌اند. سپس این عملیات را برای شرایطی که همه‌ی b' ‌ها به‌جز دومی بسته شده‌اند، تکرار می‌کنیم و به‌همین ترتیب کار را ادامه می‌دهیم. در نهایت روی تمام احتمالات جمع می‌زنیم و به‌دست می‌آوریم:

$$\sum_{b'} |\langle c'|b'\rangle|^2 |\langle b'|a'\rangle|^2 = \sum_{b'} \langle c'|b'\rangle \langle b'|a'\rangle \langle a'|b'\rangle \langle b'|c'\rangle \quad (۴۶-۴-۱)$$



شکل ۷-۱. اندازه‌گیری‌های انتخابی متوالی

اکنون این حالت را با چینش متفاوتی که در آن صافی B حذف شده (یا عمل نمی‌کند) مقایسه می‌کنیم. شکل ۱-۷-ب را ببینید. روشن است که احتمال تنها برابر $|c\langle a' \rangle|^2$ است که می‌توان آن را به شکل زیر نوشت:

$$|c\langle a' \rangle|^2 = \left| \sum_{b'} \langle c|b'\rangle \langle b'|a' \rangle \right|^2 = \sum_{b'} \sum_{b''} \langle c|b'\rangle \langle b'|a' \rangle \langle a'|b'' \rangle \langle b''|c \rangle \quad (47-4-1)$$

دقت کنید که (۴۶-۴-۱) و (۴۷-۴-۱) متفاوت هستند! این نکته تأمل برانگیز است. چون در هر دو مورد پرتو خالص $|a'\rangle$ را که از نخستین دستگاه (A) خارج می‌شود، می‌توان ساخته شده از ویژه‌کت‌های B در نظر گرفت

$$|a'\rangle = \sum_{b'} |b'\rangle \langle b'|a'\rangle \quad (48-4-1)$$

که جمع روی تمام مقادیر ممکن b' انجام می‌گیرد. نکته‌ی مهمی که باید مورد توجه قرار گیرد این است که نتیجه‌ای که از دستگاه C به دست می‌آید به اندازه‌گیری یا عدم اندازه‌گیری B بستگی دارد. در مورد اول، با آزمایش نشان می‌دهیم که کدام یک از ویژه مقادیر B در عمل به دست می‌آیند و در مورد دوم، ما تنها $|a'\rangle$ را همان‌طور که در (۴۸-۴-۱) پیدا است بر حسب $\langle b'|a'\rangle$ های مختلف تشکیل می‌دهیم. به بیان دیگر، در عمل، ثبت احتمالات به دست آمده از $\langle b'|a'\rangle$ های مختلف با یکدیگر متفاوت است هرچند که روی تمام b' ها جمع ببندیم. این مسأله قلب مکانیک کوانتومی است.

در چه شرایطی این دو بیان مسأله یکسان خواهند بود؟ به عنوان یک تمرین به عهده‌ی خواننده می‌گذاریم که نشان دهد، در غیاب تبه‌گنی، برای آن که این مسأله اتفاق افتد باید:

$$[A, B] = 0 \quad \text{یا} \quad [B, C] = 0 \quad (49-4-1)$$

یا به عبارت دیگر، خاصیتی را که نشان دادیم، مشخص‌کننده‌ی مشاهده‌پذیرهای ناسازگار است.

رابطه‌ی عدم قطعیت

آخرین عنوانی که در این بخش مورد بحث قرار می‌گیرد رابطه‌ی عدم قطعیت است. برای مشاهده‌پذیر معلوم A ، یک عملگر تعریف می‌کنیم،

$$\Delta A \equiv A - \langle A \rangle \quad (50-4-1)$$

که مقدار انتظاری برای حالت فیزیکی معین تحت بررسی، گرفته می‌شود. مقدار انتظاری $(\Delta A)^2$ به پاشندگی A معروف است. زیرا داریم:

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle = \langle (A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2) \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \quad (51-4-1)$$

عبارت اخیر (51-4-1) را می‌توان تعریف دیگری از پاشندگی انگاشت. بعضی اوقات عبارتهای واریانس و انحراف میانگین مربعی برای این کمیت به کار می‌رود. روشن است، زمانی که حالت مسأله، ویژه کت A باشد، پاشندگی صفر می‌شود. به زبان غیردقیق، پاشندگی یک مشاهده‌پذیر نشان‌گر "عدم تعیین" آن است. برای مثال برای حالت $S_z + S_x$ یک سیستم اسپین $\frac{1}{2}$ ، پاشندگی S_x را می‌توان به شکل زیر به دست آورد:

$$\langle S_x^2 \rangle - \langle S_x \rangle^2 = \hbar^2/4 \quad (52-4-1)$$

از طرف دیگر پیداست که پاشندگی $\langle \Delta S_z \rangle^2$ برای حالت $S_z + S_x$ برابر با صفر است. بنابراین برای حالت S_x, S_y, S_z حالت "تیز" دارد (پاشندگی S_z از بین می‌رود) در حالی که S_x نامعین است.

اکنون به بیان رابطه‌ی عدم قطعیت می‌پردازیم که حالت عمومی رابطه‌ی معروف عدم قطعیت $x - p$ است که در بخش ۱-۶ به آن می‌پردازیم. بگذارید تا A و B مشاهده‌گرهای ما باشند. آنگاه برای هر بیانی می‌بایست نامساوی زیر برقرار باشد:

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2 \quad (53-4-1)$$

برای اثبات این نامساوی، ابتدا به بیان ۳ لم می‌پردازیم:

لم ۱: نامساوی شوارتز

$$\langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle \geq |\langle \alpha | \beta \rangle|^2 \quad (54-4-1)$$

که با رابطه‌ی زیر در فضای حقیقی اقلیدسی قابل مقایسه است:

$$|\mathbf{a}|^2 |\mathbf{b}|^2 \geq |\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}|^2 \quad (55-4-1)$$

اثبات: ابتدا دقت کنید که

$$\langle (\alpha + \lambda^* \langle \beta | \alpha \rangle | \beta \rangle) \cdot (\alpha + \lambda | \beta \rangle) \rangle \geq 0 \quad (56-4-1)$$

که λ می‌تواند هر عدد مختلطی باشد. این نامساوی می‌بایست وقتی که λ برابر با $\langle \beta | \alpha \rangle / \langle \beta | \beta \rangle$ - است نیز برقرار باشد:

$$\langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle - |\langle \alpha | \beta \rangle|^2 \geq 0 \quad (57-4-1)$$

که همان معادله (54-4-1) است. \square

لم ۲: مقدار انتظاری یک عملگر هرمیتی، حقیقی خالص است.

اثبات: تنها کافی است که از (۱-۳-۲۱) استفاده کنید. □

لم ۳: مقدار انتظاری یک عملگر پادهرمیتی که با $C = -C^\dagger$ نشان داده می‌شود، موهومی خالص است.

اثبات: این اثبات نیز سراسر است. □

با دانستن این لم‌ها، در وضعیتی قرار داریم که می‌توانیم رابطه‌ی عدم قطعیت (۱-۴-۵۳) را اثبات کنیم. با استفاده از لم اول و با:

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= \Delta A | \rangle \\ |\beta\rangle &= \Delta B | \rangle \end{aligned} \quad (۱-۴-۵۸)$$

که کت خالی $| \rangle$ بیانگر این واقعیت است که می‌توانیم این عملیات را بر روی هر کتی انجام دهیم. داریم:

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq |\langle \Delta A \Delta B \rangle|^2 \quad (۱-۴-۵۹)$$

که در آن هرمیتی بودن ΔA و ΔB به کار برده شد. برای گسترش سمت راست (۱-۴-۵۹) داریم:

$$\Delta A \Delta B = \frac{1}{2} [\Delta A, \Delta B] + \frac{1}{2} \{ \Delta A, \Delta B \} \quad (۱-۴-۶۰)$$

که جابه‌جایی $[\Delta A, \Delta B]$ که برابر $[A, B]$ است، به‌طور واضح پادهرمیتی است:

$$([A, B])^\dagger = (AB - BA)^\dagger = BA - AB = -[A, B] \quad (۱-۴-۶۱)$$

در مقابل، یاد جابه‌جاگر $\{ \Delta A, \Delta B \}$ به‌وضوح پادهرمیتی است، بنابراین

$$\langle \Delta A \Delta B \rangle = \frac{1}{2} \underbrace{\langle [A, B] \rangle}_{\text{موهومی خالص}} + \frac{1}{2} \underbrace{\langle \{ \Delta A, \Delta B \} \rangle}_{\text{حقیقی خالص}} \quad (۱-۴-۶۲)$$

که لم‌های ۲ و ۳ در آن به کار رفته است حالا سمت راست (۱-۴-۵۹) می‌شود:

$$|\langle \Delta A \Delta B \rangle|^2 = \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2 + \frac{1}{4} |\langle \{ \Delta A, \Delta B \} \rangle|^2 \quad (۱-۴-۶۳)$$

اثبات (۱-۴-۵۳) کامل شد، چون حذف جمله‌ی دوم (یاد جابه‌جایی) از (۱-۴-۶۳) تنها نامساوی را قوی‌تر می‌کند.*

کاربردهای رابطه‌ی عدم قطعیت در سیستم‌های اسپین $\frac{1}{2}$ به‌عنوان تمرین وانهاده می‌شوند. در بخش ۶-۱ زمانی که درباره‌ی رابطه‌ی بنیادین جابه‌جایی $x-p$ بحث می‌کنیم به این بخش مراجعه می‌کنیم.

* برای واضح‌تر بودن، بیشتر نویسندگان از ΔA به‌جای $\langle (\Delta A)^2 \rangle$ استفاده می‌کنند، بنابراین رابطه‌ی عدم قطعیت را به‌صورت $\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|$ می‌نویسند. اما در این کتاب، ΔA و ΔB را به‌عنوان عملگر شناخته‌ایم ((۱-۴-۵۰) را ببینید)، نه عدد.

۵.۱ تغییر پایه‌ها

عملگر گذر

فرض کنید دو عملگر ناسازگار A و B داریم. فضای کت این مسأله را می‌توان، فضایی ساخته شده از مجموعه‌ی $\{|a'\rangle\}$ یا فضایی متشکل از مجموعه‌ی $\{|b'\rangle\}$ نشان داد. برای مثال، برای سیستم‌های اسپین $\frac{1}{2}$ ، $|S_z \pm\rangle$ را می‌توان به‌عنوان کت‌های پایه به کار برد، یا آنکه از $|S_x \pm\rangle$ به‌عنوان کت‌های پایه استفاده کرد. البته هر دوی این مجموعه کت‌های پایه‌ی متفاوت، می‌بایست فضای کت یکسانی بسازند. ما می‌خواهیم بدانیم که چطور این دو توصیف با یکدیگر در رابطه‌اند. تغییر مجموعه کت‌های پایه وابسته به تغییر پایه‌ها یا تغییر نمایش است. این پایه‌ها که ویژه کت‌های پایه را می‌سازند و با $\{|a'\rangle\}$ نشان داده می‌شوند، نمایش A یا گاهی، نمایش قطری A نامیده می‌شوند. چون ماتریس مربعی A در این پایه‌ها قطری است. کار اصلی ما ساخت یک عملگر گذر است که مجموعه‌ی متعامد قدیمی $\{|a'\rangle\}$ را به مجموعه‌ی متعامد جدید $\{|b'\rangle\}$ متصل می‌کند. برای رسیدن به این هدف، ابتدا باید نشان دهیم که:

قضیه. برای دو مجموعه‌ی معلوم از کت‌های پایه، که هر دو متعامد و کامل هستند، عملگر یکانی U وجود دارد به طوری که،

$$|b^{(1)}\rangle = U|a^{(1)}\rangle, |b^{(2)}\rangle = U|a^{(2)}\rangle, \dots, |b^{(N)}\rangle = U|a^{(N)}\rangle \quad (1-5-1)$$

عملگر را طوری تعریف می‌کنیم در دو معادله‌ی زیر صدق کند:

$$U^\dagger U = 1 \quad (2-5-1)$$

همین‌طور:

$$U U^\dagger = 1 \quad (3-5-1)$$

اثبات: این قضیه را با تشکیل مربع عملگر اثبات می‌کنیم. ادعا می‌کنیم که عملگر

$$U = \sum_k |b^{(k)}\rangle \langle a^{(k)}| \quad (4-5-1)$$

این کار را انجام می‌دهد و این U را روی $|a^{(l)}\rangle$ اثر می‌دهیم. واضح است که:

$$U|a^{(l)}\rangle = |b^{(l)}\rangle \quad (5-5-1)$$

که با استفاده از متعامد بودن $\{|a'\rangle\}$ به دست می‌آید. علاوه بر این U یکانی است:

$$U^\dagger U = \sum_k \sum_l |a^{(l)}\rangle \langle b^{(l)}| \langle b^{(k)}| \langle a^{(k)}| = \sum_k |a^{(k)}\rangle \langle a^{(k)}| = 1 \quad (6-5-1)$$

که در این جا از متعامد بودن $\{|b'\rangle\}$ و کامل بودن $\{|a'\rangle\}$ استفاده کردیم. رابطه (۱-۵-۳) نیز به همین

ترتیب اثبات می‌شود. \square

ماتریس گذر

آموزنده است که نمایش ماتریسی عملگر U را در پایه‌ی پیشین $\{|a'\rangle\}$ مورد مطالعه قرار دهیم. داریم:

$$\langle a^{(k)}|U|a^{(l)}\rangle = \langle a^{(k)}|b^{(l)}\rangle \quad (7-5-1)$$

که در آن از (۵-۵-۱) استفاده کردیم. به عبارت دیگر، آرایه‌های ماتریس عملگر U از ضرب داخلی برآهای پایه‌ی قدیمی در کت‌های پایه‌ی جدید ساخته می‌شوند. درباره‌ی ماتریس چرخش در سه بُعد یادآوری می‌کنیم که این ماتریس یک مجموعه‌ی واحد از بردارهای پایه $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ را به مجموعه‌ی دیگری $(\hat{x}', \hat{y}', \hat{z}')$ تبدیل می‌کند و می‌توان آن را به صورت زیر نوشت (برای مثال گلداشتاين ۱۹۸۰-۳۷-۱۲۸):

$$R = \begin{pmatrix} \hat{x} \cdot \hat{x}' & \hat{x} \cdot \hat{y}' & \hat{x} \cdot \hat{z}' \\ \hat{y} \cdot \hat{x}' & \hat{y} \cdot \hat{y}' & \hat{y} \cdot \hat{z}' \\ \hat{z} \cdot \hat{x}' & \hat{z} \cdot \hat{y}' & \hat{z} \cdot \hat{z}' \end{pmatrix} \quad (8-5-1)$$

ماتریس مربعی ساخته شده با $\langle a^{(k)}|U|a^{(l)}\rangle$ به ماتریس گذر از پایه‌های $\{|a'\rangle\}$ به پایه‌های $\{|b'\rangle\}$ موسوم است.

یک کت دلخواه $|\alpha\rangle$ داریم که ضرایب بسط آن $\langle a'|\alpha\rangle$ در پایه‌های پیشین مشخص است:

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|\alpha\rangle \quad (9-5-1)$$

چطور می‌توانیم ضرایب بسط در پایه‌های جدید $\langle b'|\alpha\rangle$ را به دست آوریم؟ جواب خیلی ساده است، تنها باید (۹-۵-۱) (برای جلوگیری از سردرگمی $a^{(l)}$ را با a' عوض کرده‌ایم) را در $\langle b^{(k)}|$ ضرب کنیم.

$$\langle b^{(k)}|\alpha\rangle = \sum_l \langle b^{(k)}|a^{(l)}\rangle \langle a^{(l)}|\alpha\rangle = \sum_l \langle a^{(k)}|U^\dagger|a^{(l)}\rangle \langle a^{(l)}|\alpha\rangle \quad (10-5-1)$$

در نمایش ماتریسی، رابطه‌ی (۱۰-۵-۱) بیان می‌کند که با اعمال ماتریس مربعی U^\dagger بر ماتریس ستونی در پایه‌ی قدیم، ماتریس ستونی برای $|\alpha\rangle$ در پایه‌های جدید به دست می‌آید:

$$(\text{New}) = (U^\dagger)(\text{old}) \quad (11-5-1)$$

به دست آوردن ارتباط بین آرایه‌های ماتریس قدیمی با ماتریس جدید نیز راحت است:

$$\begin{aligned} \langle b^{(k)}|X|b^{(l)}\rangle &= \sum_m \sum_n \langle b^{(k)}|a^{(m)}\rangle \langle a^{(m)}|X|a^{(n)}\rangle \langle a^{(n)}|b^{(l)}\rangle \\ &= \sum_m \sum_n \langle a^{(k)}|U^\dagger|a^{(m)}\rangle \langle a^{(m)}|X|a^{(n)}\rangle \langle a^{(n)}|U|a^{(l)}\rangle \end{aligned} \quad (12-5-1)$$

این رابطه‌ی آشنای تبدیل تشابهی در جبر ماتریسی است:

$$X' = U^\dagger X U \quad (۱۳-۵-۱)$$

و یک عملگر با جمع روی آرایه‌های قطری تعریف می‌شود:

$$\text{tr}(X) = \sum_{a'} \langle a' | X | a' \rangle \quad (۱۴-۵-۱)$$

اگرچه در این تعریف از مجموعه‌ی کت‌های پایه‌ی خاصی استفاده کردیم، اما نشان می‌دهیم که $\text{tr}(X)$ مستقل از نمایش است:

$$\begin{aligned} \sum_{a'} \langle a' | X | a' \rangle &= \sum_{a'} \sum_{b'} \sum_{b''} \langle a' | b' \rangle \langle b' | X | b'' \rangle \langle b'' | a' \rangle \\ &= \sum_{b'} \sum_{b''} \langle b'' | b' \rangle \langle b' | X | b'' \rangle \\ &= \sum_{b'} \langle b' | X | b' \rangle \end{aligned} \quad (۱۵-۵-۱)$$

همچنین می‌توان اثبات کرد که:

$$\text{tr}(XY) = \text{tr}(YX) \quad (الف) \quad (۱۶-۵-۱)$$

$$\text{tr}(U^\dagger X U) = \text{tr}(X) \quad (ب) \quad (۱۶-۵-۱)$$

$$\text{tr}(|a'\rangle\langle a''|) = \delta_{a'a''} \quad (ج) \quad (۱۶-۵-۱)$$

$$\text{tr}(|b'\rangle\langle a'|) = \langle a' | b' \rangle \quad (د) \quad (۱۶-۵-۱)$$

قطری کردن

هنوز درباره‌ی پیدا کردن ویژه مقادیر و ویژه کت‌های عملگر B که آرایه‌های ماتریسی آن در پایه‌های قدیمی $\{|a'\rangle\}$ مفروض‌اند، بحث نکرده‌ایم. این مسأله معادل آن است که ماتریس واحدی برای قطری کردن B بیابیم. اگرچه خواننده ممکن است از جبر ماتریسی با روش قطری کردن ماتریس آشنا باشد، اما پرداختن به این مسأله با استفاده از نمادگذاری براکت دیراک حائز اهمیت است.

می‌خواهیم ویژه مقادیر b' و ویژه توابع $|b'\rangle$ را طوری به دست آوریم که:

$$B|b'\rangle = b'|b'\rangle \quad (۱۷-۵-۱)$$

نخست این رابطه را به صورت زیر می نویسیم:

$$\sum_{a'} \langle a'' | B | a' \rangle \langle a' | b' \rangle = b' \langle a'' | b' \rangle \quad (18-5-1)$$

وقتی که $|b'\rangle$ در (17-5-1) نشانگر l آمین ویژه کت عملگر B باشد، می توانیم (18-5-1) را با نمایش ماتریسی به شکل زیر نشان دهیم:

$$\begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{13} & \dots \\ B_{21} & B_{22} & B_{23} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1^{(l)} \\ C_2^{(l)} \\ \vdots \end{pmatrix} = b^{(l)} \begin{pmatrix} C_1^{(l)} \\ C_2^{(l)} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (19-5-1)$$

با

$$B_{ij} = \langle a^{(i)} | B | a^{(j)} \rangle \quad (20-5-1 \text{ الف})$$

و

$$C_k^{(l)} = \langle a^{(k)} | b^{(l)} \rangle \quad (20-5-1 \text{ ب})$$

که i و j و k تا N (بعد فضای کت) تغییر می کنند. همان طور که از جبر خطی می دانیم پاسخ غیربدهی برای $C_k^{(l)}$ تنها وقتی ممکن است که معادله ی مشخصه ی

$$\det(B - \lambda I) = 0 \quad (21-5-1)$$

برقرار باشد. این یک معادله ی جبری درجه N برای λ است و N ریشه ی بدست آمده $b^{(l)}$ های مختلفی را مشخص می کنند که سعی در پیدا کردن آن ها داریم. با دانستن $b^{(l)}$ می توانیم $C_k^{(l)}$ های متناظر را، بدون در نظر گرفتن ثابتی که از شرط بهنجارش حاصل می شود، به دست آوریم. با مقایسه ی (20-5-1) ب) با (19-5-1) می بینیم که $C_k^{(l)}$ ها عناصر ماتریس یکانی هستند که پایه های $\{|a'\rangle\}$ را به $\{|b'\rangle\}$ تبدیل می کنند.

برای این فرآیند هرمیتی بودن B مهم است. برای مثال، S_+ را که با (38-3-1) یا (19-4-1) تعریف می شود در نظر بگیرید. به وضوح پیداست که این عملگر غیرهرمیتی است. ماتریس وابسته به آن در پایه های S_+ برابر است با:

$$S_+ \equiv \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (22-5-1)$$

این ماتریس را نمی توان با هیچ ماتریس یکانی ای قطری کرد. در فصل ۲ با ویژه حالت های یک عملگر غیرهرمیتی که یک حالت همدوس را با نوسان گر هماهنگ ساده می سازند، روبه رو خواهیم شد. به هر

حال، پیداست که برای چنین ویژه‌کت‌هایی نمی‌توان یک مجموعه‌ی متعامد کامل تشکیل داد و فرمول‌بندی را که در این بخش گسترش دادیم نمی‌توان برای آن به کار برد.

مشاهده‌پذیرهای یکانی همسان

با بحث درباره‌ی قضیه‌ی قابل تأملی برای تبدیل یکانی یک مشاهده‌پذیر، این بخش را تمام می‌کنیم. قضیه. دوباره فرض کنید دو حالت - پایه‌های متعامد $\{|a'\rangle\}$ و $\{|b'\rangle\}$ با عملگر U (۴-۵-۱) به هم متصل‌اند. با دانستن U ، می‌توان یک تبدیل یکانی برای A به صورت UAU^{-1} تشکیل داد. آنگاه A و UAU^{-1} را مشاهده‌پذیرهای یکانی همسان می‌گویند. معادله‌ی ویژه مقادیری A برابر است با:

$$A|a^{(l)}\rangle = a^{(l)}|a^{(l)}\rangle \quad (۲۳-۵-۱)$$

پیداست که داریم:

$$UAU^{-1}U|a^{(l)}\rangle = a^{(l)}U|a^{(l)}\rangle \quad (۲۴-۵-۱)$$

اما می‌توان این رابطه را به صورت زیر نوشت:

$$(UAU^{-1})|b^{(l)}\rangle = a^{(l)}|b^{(l)}\rangle \quad (۲۵-۵-۱)$$

این نتیجه برخلاف سادگی، بسیار عمیق است. این قضیه به ما می‌گوید که $|b'\rangle$ ها که ویژه‌کت‌های UAU^{-1} هستند، دقیقاً ویژه مقادیر یکسانی با ویژه مقادیر A دارند. به عبارت دیگر، عملگرهای یکانی همسان، طیف یکسانی دارند.

بنا به تعریف، ویژه‌کت $|b^{(l)}\rangle$ در رابطه‌ی زیر صدق می‌کند:

$$B|b^{(l)}\rangle = b^{(l)}|b^{(l)}\rangle \quad (۲۶-۵-۱)$$

با مقایسه‌ی (۲۵-۵-۱) و (۲۶-۵-۱)، می‌فهمیم که B و UAU^{-1} همزمان قطری می‌شوند. یک سؤال بدیهی آن است که آیا UAU^{-1} همان B است؟ جواب که در بیشتر اوقات مورد نظر ماست، بله است. برای مثال \mathcal{S}_x و \mathcal{S}_y را در نظر بگیرید. این دو عملگر با یک عملگر همانی با هم رابطه می‌یابند، که در مورد آن در فصل ۳ بحث می‌کنیم. این عملگر در عمل همان عملگر چرخش حول محور \mathcal{I} ها با زاویه‌ی $\pi/2$ است. در این جا خود \mathcal{S}_x یک تبدیل مکانی از \mathcal{S}_y است. از آن جا که می‌دانیم \mathcal{S}_x و \mathcal{S}_y دارای مجموعه‌ی یکسانی از ویژه مقادیر $+\hbar/2$ و $-\hbar/2$ هستند، می‌بینیم که این قضیه در این مثال خاص برقرار است.

۶.۱ مکان، تکانه و انتقال

طیف پیوسته

مشاهده‌پذیرهایی که تاکنون در نظر گرفته‌ایم با طیف ویژه‌مقداری گسسته فرض شده‌اند. اما در مکانیک کوانتومی مشاهده‌پذیرهایی با ویژه‌مقادیر پیوسته هم وجود دارد. برای مثال مؤلفه‌ی z تکانه p_z را در نظر بگیرد. این مشاهده‌پذیر نیز در مکانیک کوانتومی با یک عملگر هرمیتی نمایش داده می‌شود. برخلاف k_z ویژه‌مقادیر p_z (در یکاهای مناسب) می‌توانند هر مقدار حقیقی‌ای بین $-\infty$ تا $+\infty$ را اتخاذ کند.

ریاضیات یک فضای برداری که از ویژه‌کت‌هایی با طیف پیوسته تشکیل شده است، تا حدودی غیرقابل اعتماد است. پیداست که بُعد چنین فضایی بینهایت است. خوشبختانه خیلی از نتایجی که برای بُعد محدود فضای برداری با ویژه‌مقادیر گسسته استخراج کردیم، قابل تعمیم به این مسأله نیز هست. در جایی که این تعمیم‌پذیری برقرار نباشد، با علامت خطری مواجه هستیم.

با قیاس معادله‌ی ویژه‌مقداری (۱-۲-۵) با مورد طیف پیوسته کار را آغاز کرده و می‌نویسیم.

$$\langle \xi | \xi' \rangle = \langle \xi' | \xi \rangle \quad (1-6-1)$$

که ξ یک عملگر است و ξ' یک عدد معمولی است. به عبارت دیگر کت $\langle \xi | \xi' \rangle$ یک ویژه‌کت عملگر ξ با ویژه‌مقدار ξ' است. همان‌طور که $|a'\rangle$ یک ویژه‌کت عملگر A با ویژه‌مقدار a' است.

برای پیگیری این مشابهت علامت کرونیگر را با تابع دلتای دیراک δ تعویض می‌کنیم (یک جمع

گسسته روی ویژه‌مقادیر $\{a'\}$ را به یک انتگرال روی متغیرهای پیوسته‌ی ξ' بدل می‌کنیم) بنابراین:

$$\langle a' | a'' \rangle = \delta_{a'a''} \rightarrow \langle \xi' | \xi'' \rangle = \delta(\xi' - \xi'') \quad (1-6-2 \text{ الف})$$

$$\sum_{a'} |a'\rangle \langle a'| = 1 \rightarrow \int d\xi' |\xi'\rangle \langle \xi'| = 1 \quad (1-6-2 \text{ ب})$$

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a' | \alpha \rangle \rightarrow |\alpha\rangle = \int d\xi' |\xi'\rangle \langle \xi' | \alpha \rangle \quad (1-6-2 \text{ ج})$$

$$\sum_{a'} |\langle a' | \alpha \rangle|^2 = 1 \rightarrow \int d\xi' |\langle \xi' | \alpha \rangle|^2 = 1 \quad (1-6-2 \text{ د})$$

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \sum_{a'} \langle \beta | a' \rangle \langle a' | \alpha \rangle \rightarrow \langle \beta | \alpha \rangle = \int d\xi' \langle \beta | \xi' \rangle \langle \xi' | \alpha \rangle \quad (1-6-2 \text{ ه})$$

$$\langle a'' | A | a' \rangle = a' \delta_{a'a''} \rightarrow \langle \xi'' | \xi | \xi' \rangle = \xi' \delta(\xi'' - \xi'). \quad (1-6-2 \text{ و})$$

به ویژه توجه کنید که چطور رابطه‌ی تمامیت (۱-۲-۶ ب) در به‌دست آوردن (۱-۲-۶ ج) و (۱-۲-۶ ه) استفاده می‌شود.

ویژه‌کتهای مکان و اندازه‌گیری مکان

در بخش ۱-۴ فرض کردیم که اندازه‌گیری در مکانیک کوانتومی به‌نوعی فیلتر کردن است. برای گسترش این ایده به‌اندازه‌گیری مشاهده‌پذیرهایی که طیف پیوسته دارند، بهتر است که با یک مثال خاص کار کنیم. برای رسیدن به این هدف عملگر مکان (یا مختصات) را در یک بُعد در نظر می‌گیریم.

ویژه‌کتهای $|x'\rangle$ عملگر مکان x در رابطه‌ی زیر صدق می‌کنند:

$$x|x'\rangle = x'|x'\rangle \quad (۳-۶-۱)$$

به‌عنوان اصل موضوعه قبول می‌کنیم که $|x'\rangle$ ها کامل‌اند. در این جا x' تنها یک عدد با بُعد طول است. مثلاً $۰/۲۳$ سانتی‌متر، در حالی که x یک عملگر است. کت حالت یک حالت فیزیکی دلخواه را می‌توان برحسب $|x'\rangle$ نوشت:

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' |x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle \quad (۴-۶-۱)$$

اکنون یک اندازه‌گیری انتخابی بسیار ایده‌آل از مشاهده‌پذیر مکان را در نظر می‌گیریم. یک آشکارساز بسیار دقیق را طوری در نظر می‌گیریم که تنها زمانی روشن شود که ذره دقیقاً در x' قرار گیرد. به‌سرعت، پس از آنکه آشکارساز روشن شد، می‌توانیم بگوییم که حالت ما با $|x'\rangle$ نمایش داده می‌شود. به‌عبارت دیگر، زمانی که آشکارساز روشن می‌شود، $|\alpha\rangle$ به‌سرعت به $|x'\rangle$ "می‌پرد" همان‌طور که یک حالت اسپین اختیاری وقتی که با دستگاه SG از نوع S_x مواجه می‌شود به $S_x = \pm \hbar/2$ می‌پرد.

در کاربردهای عملی بهترین آشکارساز می‌تواند ذره را در یک باریکه اطراف x' شناسایی کند. یک آشکارساز واقعی وقتی روشن می‌شود که ذره در یک باریکه حول x' ($x' - \Delta/2, x' + \Delta/2$) واقع شود. زمانی که شمارش در چنین آشکارسازی منظور شود، کت حالت، ناگهان به‌شکل زیر تغییر می‌کند:

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx'' |x''\rangle \langle x''|\alpha\rangle \xrightarrow{\text{اندازه‌گیری}} \int_{x' - \Delta/2}^{x' + \Delta/2} dx'' |x''\rangle \langle x''|\alpha\rangle \quad (۵-۶-۱)$$

فرض شده است که $\langle x''|\alpha\rangle$ در این محدود تغییر محسوسی، نشان ندهد. احتمال اینکه آشکارساز روشن شود با عبارت زیر داده شده است:

$$|\langle x'|\alpha\rangle|^2 dx' \quad (۶-۶-۱)$$

که dx' را به‌جای Δ نوشتیم. این شبیه $|\langle a'|\alpha\rangle|^2$ برای احتمال رخداد $|\alpha\rangle$ در بین حالت‌های $|a'\rangle$ است. احتمال حضور بین $-\infty$ و $+\infty$ از رابطه‌ی زیر حاصل می‌شود:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx' |\langle x' | \alpha \rangle|^2 \quad (۷-۶-۱)$$

زمانی این عبارت بهنجار است که $|\alpha\rangle$ بهنجار شده باشد:

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle \alpha | x' \rangle \langle x' | \alpha \rangle = 1 \quad (۸-۶-۱)$$

خواننده‌ای که با مکانیک موجی آشنا باشد تاکنون باید دریافته باشد که $\langle x' | \alpha \rangle$ تابع موجی برای حالت فیزیکی $|\alpha\rangle$ است. در بخش ۷-۱ درباره‌ی تعیین ضرایب بسط تابع موج در نمایش x بیشتر حرف می‌زنیم.

ویژه کت مکان را می‌توان به سه بُعد گسترش داد. در مکانیک کوانتومی غیرنسبیتی فرض شده است که ویژه کت‌های مکان $|\mathbf{x}'\rangle$ کامل هستند. بنابراین با نادیده گرفتن درجات آزادی داخلی، همچون اسپین، می‌توان یک کت حالت خاص را برحسب $\{|\mathbf{x}'\rangle\}$ به صورت زیر نوشت:

$$|\alpha\rangle = \int d^3x' |\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \quad (۹-۶-۱)$$

که \mathbf{x}' بیان کننده‌ی x' و y' و z' است. به عبارت دیگر: $|\mathbf{x}'\rangle$ همانند بخش ۴-۱، ویژه کت همزمان مشاهده پذیرهای x و y و z است.

$$|\mathbf{x}'\rangle \equiv |x', y', z'\rangle \quad (۱۰-۶-۱) \text{ الف}$$

$$x|\mathbf{x}'\rangle = x'|\mathbf{x}'\rangle, \quad y|\mathbf{x}'\rangle = y'|\mathbf{x}'\rangle, \quad z|\mathbf{x}'\rangle = z'|\mathbf{x}'\rangle \quad (۱۰-۶-۱) \text{ ب}$$

برای آنکه همواره بتوانیم چنین ویژه کت‌های همزمانی را در نظر بگیریم، فرض می‌کنیم که سه مختصه‌ی بردار مکان را می‌توان با هر درجه‌ی دقت دلخواه به‌طور همزمان اندازه‌گیری کرد. بنابراین باید داشته باشیم:

$$\xi|\xi'\rangle = \xi'|\xi'\rangle \quad (۱۱-۶-۱)$$

که x_1 و x_2 و x_3 به ترتیب نشان‌دهنده‌ی x و y و z هستند.

انتقال

اکنون به معرفی مفهوم بسیار مهمی به نام انتقال یا جابه‌جایی می‌پردازیم. فرض کنید که کار را با حالتی که به خوبی در اطراف \mathbf{x}' جایگزیده است، آغاز می‌کنیم. بگذارید تا عملگری را در نظر بگیریم که این حالت را به حالت جایگزیده‌ی دیگری، این بار اطراف $\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'$ تغییر می‌دهد. در حالی که سایر

خصوصیات حالت (مثلاً جهت اسپین) بدون تغییر باقی می‌ماند. این چنین عملگری را انتقال بسیار کوچک به اندازه $d\mathbf{x}'$ تعریف می‌کنیم. عملگری که این کار را انجام می‌دهد با $\mathcal{T}(d\mathbf{x}')$ نشان داده می‌شود.

$$\mathcal{T}(d\mathbf{x}')|\mathbf{x}'\rangle = |\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'\rangle \quad (۱۲-۶-۱)$$

که بنابر قرارداد، عامل فاز اختیاری ممکن را برابر با واحد قرار دادیم. توجه کنید که سمت راست رابطه‌ی $|\mathbf{x}'\rangle$ (۱۲-۶-۱) دوباره یک کت حالت است، اما این بار ویژه مقدار آن $\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'$ می‌باشد. پیداست که $|\mathbf{x}'\rangle$ ویژه کت عملگر انتقال بی‌نهایت کوچک نیست.

با بسط کت حالت دلخواه $|\alpha\rangle$ برحسب ویژه کت‌های مکان، می‌توان اثر انتقال بی‌نهایت کوچک را روی $|\alpha\rangle$ آزمود:

$$|\alpha\rangle \rightarrow \mathcal{T}(d\mathbf{x}')|\alpha\rangle = \mathcal{T}(d\mathbf{x}') \int d^3x' |\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle = \int d^3x' |\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle \quad (۱۳-۶-۱)$$

همچنین می‌توانیم سمت راست (۱۳-۶-۱) را به صورت زیر بنویسیم:

$$\int d^3x' |\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle = \int d^3x' |\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}' - d\mathbf{x}'|\alpha\rangle \quad (۱۴-۶-۱)$$

چون انتگرال روی کل فضا گرفته می‌شود و \mathbf{x}' تنها یک متغیر انتگرال‌گیری است. این نشان می‌دهد که تابع موج حالت انتقال $|\alpha\rangle$ با تعویض $\mathbf{x}' - d\mathbf{x}'$ و \mathbf{x}' در $\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle$ به دست می‌آید.

بیان معادل دیگری برای انتقال وجود دارد که اغلب مورد استفاده قرار می‌گیرد. به جای آنکه انتقال بی‌نهایت کوچک به سیستم فیزیکی وارد شود، فرض می‌کنیم که این تغییر به سیستم مختصات وارد شود به طوری که مبدأ به اندازه $d\mathbf{x}'$ - در خلاف جهت مختصات جابه‌جا می‌شود. در این نگرش متفاوت از نظر فیزیکی این سؤال پیش می‌آید که یک کت یکسان از دید ناظری که سیستم مختصاتش به اندازه $d\mathbf{x}'$ - جابه‌جا شده چگونه دیده می‌شود. در این کتاب سعی می‌کنیم که از این دیدگاه استفاده نکنیم. پیداست که اشتباه نکردن این دو دیدگاه با یکدیگر بسیار حائز اهمیت است!

اکنون خواص عملگر انتقال بسیار کوچک $\mathcal{T}(d\mathbf{x}')$ را مرور می‌کنیم. نخستین ویژگی، خاصیت یکانی بودن است که به واسطه‌ی پایستگی احتمال ایجاد می‌شود. این منطقی است که اگر کت $|\alpha\rangle$ به یک بهنجار باشد کت انتقال یافته‌ی $|\alpha\rangle$ نیز به یک بهنجار باشد. بنابراین:

$$\langle \alpha|\alpha\rangle = \langle \alpha|\mathcal{T}^\dagger(d\mathbf{x}')\mathcal{T}(d\mathbf{x}')|\alpha\rangle \quad (۱۵-۶-۱)$$

این رابطه تضمین می‌کند که انتقال بی‌نهایت کوچک یکانی است:

$$\mathcal{T}^\dagger(dx')\mathcal{T}(dx')=1 \quad (۱۶-۶-۱)$$

به‌طور کلی، اندازه‌ی کتی که تحت تبدیلات یکانی قرار می‌گیرد، ناوردا باقی می‌ماند. برای پرداختن به خاصیت دوم؛ فرض می‌کنیم دو انتقال بی‌نهایت کوچک داریم که اولی را با dx' و بعدی را با dx'' نشان می‌دهیم. لازم نیست که dx' و dx'' هم‌جهت باشند. انتظار داریم که نتیجه‌ی این انتقال، تنها یک عملگر انتقال با جمع برداری $dx' + dx''$ باشد. بنابراین داریم:

$$\mathcal{T}(dx'')\mathcal{T}(dx')=\mathcal{T}(dx'+dx'') \quad (۱۷-۶-۱)$$

برای رسیدن به سومین خاصیت، یک انتقال در جهت مخالف را در نظر می‌گیریم؛ انتظار داریم که انتقال در جهت مخالف با معکوس انتقال اصلی برابر باشد:

$$\mathcal{T}(-dx')=\mathcal{T}^{-1}(dx') \quad (۱۸-۶-۱)$$

و چهارمین خاصیت، فرض می‌کنیم که $dx' \rightarrow 0$ است؛ در این حالت عملگر انتقال باید به عملگر همانی کاهش یابد:

$$\lim_{dx' \rightarrow 0} \mathcal{T}(dx')=1 \quad (۱۹-۶-۱)$$

و اختلاف بین $\mathcal{T}(dx')$ و عملگر همانی از مرتبه‌ی اول dx' است.

اکنون نشان می‌دهیم که اگر عملگر بی‌نهایت کوچک را به‌صورت زیر در نظر بگیریم:

$$\mathcal{T}(dx')=1-i\mathbf{K}\cdot dx' \quad (۲۰-۶-۱)$$

که مختصه‌های \mathbf{K} ، K_x ، K_y و K_z عملگرهای هرmitی هستند، آنگاه تمام مختصه‌هایی که بیان کردیم برقرار خواهند شد. نخستین مشخصه یکانی بودن $\mathcal{T}(dx')$ به‌صورت زیر به‌دست می‌آید:

$$\begin{aligned} \mathcal{T}^\dagger(dx')\mathcal{T}(dx') &= (1+i\mathbf{K}^\dagger\cdot dx')(1-i\mathbf{K}\cdot dx') \\ &= 1-i(\mathbf{K}-\mathbf{K}^\dagger)\cdot dx'+0[(dx')^2] \\ &\approx 1 \end{aligned} \quad (۲۱-۶-۱)$$

که جمله‌ی درجه دوم dx' را، از آن‌جا که انتقال بی‌نهایت کوچک است، می‌توان نادیده انگاشت.

ویژگی دوم (۱۷-۶-۱) را می‌توان به‌شکل زیر اثبات کرد:

$$\begin{aligned}\mathcal{F}(d\mathbf{x}'')\mathcal{F}(d\mathbf{x}') &= (1 - i\mathbf{K} \cdot d\mathbf{x}'')(1 - i\mathbf{K} \cdot d\mathbf{x}') \\ &\simeq 1 - i\mathbf{K} \cdot (d\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'') \\ &= \mathcal{F}(d\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'')\end{aligned}\quad (۲۲-۶-۱)$$

ویژگی های سوم و چهارم به روشنی از (۲۰-۶-۱) به دست می آیند.

با قبول (۲۰-۶-۱) به عنوان شکل صحیح برای $\mathcal{F}(d\mathbf{x}')$ ، در موقعیتی قرار می گیریم که یک رابطه ی بسیار بنیادین بین عملگر \mathbf{K} و عملگر \mathbf{x} به دست آوریم. نخست، توجه کنید که:

$$\mathbf{x}\mathcal{F}(d\mathbf{x}')|\mathbf{x}'\rangle = \mathbf{x}|\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'\rangle = (\mathbf{x}' + d\mathbf{x}')|\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'\rangle \quad (۲۳-۶-۱) \text{ الف}$$

و

$$\mathcal{F}(d\mathbf{x}')\mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle = \mathbf{x}'\mathcal{F}(d\mathbf{x}')|\mathbf{x}'\rangle = \mathbf{x}'|\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'\rangle \quad (۲۳-۶-۱) \text{ ب}$$

بنابراین:

$$[\mathbf{x}, \mathcal{F}(d\mathbf{x}')]| \mathbf{x}' \rangle = d\mathbf{x}'|\mathbf{x}' + d\mathbf{x}'\rangle = d\mathbf{x}'|\mathbf{x}'\rangle \quad (۲۴-۶-۱)$$

خطای به وجود آمده در نوشتن آخرین جمله ی (۲۴-۶-۱) از مرتبه ی دوم $d\mathbf{x}'$ است. اکنون می توانیم $|\mathbf{x}'\rangle$ را هر ویژه کت مکانی در نظر بگیریم و همان طور که می دانیم ویژه کت های مکان یک مجموعه ی کامل اند. بنابراین می بایست اتحاد عملگری زیر را داشته باشیم:

$$[\mathbf{x}, \mathcal{F}(d\mathbf{x}')] = d\mathbf{x}' \quad (۲۵-۶-۱)$$

یا

$$-i\mathbf{x}\mathbf{K} \cdot d\mathbf{x}' + i\mathbf{K} \cdot d\mathbf{x}'\mathbf{x} = d\mathbf{x}' \quad (۲۶-۶-۱)$$

که در سمت راست (۲۵-۶-۱) و (۲۶-۶-۱)، $d\mathbf{x}'$ برابر با عدد $d\mathbf{x}'$ ، ضربدر عملگر واحد در فضای کتی است که $|\mathbf{x}'\rangle$ در آن تشکیل شده است. با انتخاب $d\mathbf{x}'$ در جهت $\hat{\mathbf{x}}_i$ و تشکیل ضرب اسکالر با $\hat{\mathbf{x}}_i$ داریم:

$$[x_i, K_j] = i\delta_{ij} \quad (۲۷-۶-۱)$$

که δ_{ij} به عنوان ضرب عملگر همانی در نظر گرفته می شود.

تکانه به عنوان ایجادکننده ی انتقال

معادله ی (۲۷-۶-۱) رابطه ی بنیادی بین عملگرهای مکان x و y و z و عملگرهای K_x ، K_y و K_z است. به یاد می آوریم که عملگر K در تعریف عملگر انتقال بی نهایت کوچک در (۲۰-۶-۱) به کار رفت. چه مفهوم فیزیکی ای را می توانیم به \mathbf{K} بدهیم؟

جی. شوینگر، یک بار در درس مکانیک کوانتومی اش، متذکر می شود که "... برای ویژگی های بنیادی تنها نام ها را از فیزیک کلاسیک قرض می گیریم." در مورد حاضر نیز از مکانیک کلاسیک این سؤال را قرض می کنیم که تکانه ایجاد کننده ی انتقال بسیار کوچک است. در مکانیک کلاسیک یک انتقال بسیار کوچک را می توان به عنوان یک تبدیل کانونیک مدنظر قرار داد:

$$\mathbf{x}_{\text{new}} \equiv \mathbf{X} = \mathbf{x} + d\mathbf{x}, \quad \mathbf{p}_{\text{new}} \equiv \mathbf{P} = \mathbf{p} \quad (28-6-1)$$

که از تابع مولد زیر به دست می آید (گلدشتاین، ۱۹۸ و ۳۹۵ و ۴۱۱):

$$F(\mathbf{x}, \mathbf{P}) = \mathbf{x} \cdot \mathbf{P} + \mathbf{p} \cdot d\mathbf{x} \quad (29-6-1)$$

که \mathbf{P} و \mathbf{p} تکانه های متناظر اند.

این رابطه شباهت مستقیمی با عملگر انتقال بی نهایت کوچک (۱-۶-۲۰) در مکانیک کوانتومی دارد. به ویژه اگر یادآوری کنیم که $\mathbf{x} \cdot \mathbf{P}$ در (۱-۶-۲۹) تابع سازنده ایی برای انتقال همانی ($\mathbf{X} = \mathbf{x}, \mathbf{P} = \mathbf{p}$) است. بنابراین به این نتیجه می رسیم که \mathbf{K} از برخی جهات شبیه به عملگر تکانه در مکانیک کوانتومی است.

آیا می توان عملگر \mathbf{K} را به شکل خود عملگر تکانه تعریف کرد؟ متأسفانه از نظر ملاحظات ابعاد این فرض اشتباه است. عملگر \mathbf{K} بُعد ۱ بر طول دارد، چون $\mathbf{K} \cdot d\mathbf{x}'$ باید بدون بُعد باشد. اما منطقی است که قرار دهیم:

$$\mathbf{K} = \frac{\mathbf{p}}{\text{ثابت جهانی با بعد کنش}} \quad (30-6-1)$$

از اصول موضوعه ی مکانیک کوانتومی راهی برای مشخص کردن مقدار عددی درست این ثابت جهانی وجود ندارد. این ثابت از آن جهت مورد نیاز است که، از لحاظ تاریخی، فیزیک کلاسیک پیش از مکانیک کوانتومی با استفاده از ثابتهای مناسبی برای توصیف کمیت های ماکروسکوپیکی مثلاً محیط زمین، جرم ۱ سی سی آب، زمان متوسط یک روز خورشیدی و غیره، تبیین شده است. اگر فیزیک میکروسکوپیکی قبل از فیزیک ماکروسکوپیکی فرمول بندی می شد، مطمئناً فیزیکدانان ثابت های بنیادین به دست آمده را طوری انتخاب می کردند که ثابت جهانی ظاهر شده در (۱-۶-۳۰) برابر با واحد باشد.

مقیاسه ای با الکتروستاتیک می تواند مفید باشد. انرژی برهم کنش بین دو ذره به بار e که به فاصله ی r از یکدیگر قرار دارند متناسب با e^2 / r است. در ثابت های غیر معمول گاوسی، عامل تناسب برابر با ۱ است، اما در یکاهای متعارف mks، که برای مهندسان برق شناخته شده تر است، ثابت تناسب برابر $1 / 4\pi\epsilon_0$ است.

ثابت جهانی ای که در (۱-۶-۳۰) ظاهر می‌شود، همان ثابت \hbar است که در رابطه‌ی ال.دوبروی در سال ۱۹۲۴ آمده است:

$$\frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar} \quad (۱-۶-۳۱)$$

که λ طول موج یک "ذره موج" است. به عبارت دیگر، عملگر K ، عملگری کوانتومی است که با عدد موج (که 2π برابر عکس طول موج است و با k نشان داده می‌شود) متناظر است. با این تعریف عملگر بینهایت کوچک $\mathcal{T}(dx')$ برابر است با:

$$\mathcal{T}(dx') = 1 - ip \cdot dx' / \hbar \quad (۱-۶-۳۲)$$

که p عملگر تکانه است. اکنون رابطه‌ی جابه‌جایی (۱-۶-۲۷) برابر می‌شود با:

$$[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad (۱-۶-۳۳)$$

رابطه‌ی (۱-۶-۳۳) به‌عنوان نمونه، نشان می‌دهد که x و p_x (اما نه x و p_y) مشاهده‌پذیرهای ناسازگارند. بنابراین غیرممکن است که بتوان ویژه‌کت‌های همزمان x و p_x پیدا کرد. فرمول‌بندی کلی بخش ۱-۴ را برای به‌دست آوردن رابطه‌ی عدم قطعیت تکانه-مکان دبلویو. هایزنبرگ به‌کار می‌بریم:

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p_x)^2 \rangle \geq \hbar^2 / 4 \quad (۱-۶-۳۴)$$

برخی از کاربردهای (۱-۶-۳۴) در بخش ۱-۷ نشان داده می‌شوند.

تاکنون توجه خودمان را به انتقال‌های بی‌نهایت کوچک معطوف کردیم. یک انتقال محدود (یعنی، یک جابه‌جایی فضایی با مقدار محدود) را می‌توان از روی هم گذاشتن انتقال‌های بی‌نهایت کوچک متوالی به‌دست آورد. بگذارید تا انتقال محدود در راستای x را با $\Delta x'$ نمایش دهیم:

$$\mathcal{T}(\Delta x' \hat{x}) |x'\rangle = |x' + \Delta x' \hat{x}\rangle \quad (۱-۶-۳۵)$$

با اعمال N انتقال محدود، که هر کدام از آن‌ها را با $\Delta x' / N$ در راستای x نشان می‌دهیم و $N \rightarrow \infty$ قرار می‌دهیم، داریم:

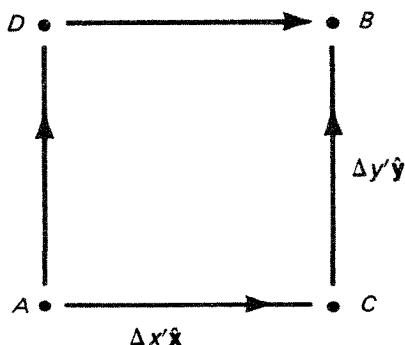
$$\begin{aligned} \mathcal{T}(\Delta x' \hat{x}) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{ip_x \Delta x'}{N\hbar} \right)^N \\ &= \exp\left(-\frac{ip_x \Delta x'}{\hbar} \right) \end{aligned} \quad (۱-۶-۳۶)$$

در این جا $\exp(-ip_x \Delta x' / \hbar)$ به‌عنوان تابعی از عملگر p_x به‌حساب می‌آید. در حالت کلی، برای هر عملگر دلخواه X داریم:

$$\exp(X) \equiv 1 + X + \frac{X^2}{2!} + \dots \quad (۳۷-۶-۱)$$

یکی از خاصیت‌های بنیادین انتقال آن است که انتقال‌های پی‌درپی در راستاهای مختلف، مثلاً راستای x و راستای y ، جابه‌جا پذیرند. این خاصیت را در شکل ۸-۱ به خوبی می‌بینیم. برای انتقال از A به B ، مهم نیست که از نقطه‌ی C یا نقطه‌ی D گذر کنیم. به‌طور ریاضی

$$\begin{aligned} \mathcal{T}(\Delta y' \hat{y}) \mathcal{T}(\Delta x' \hat{x}) &= \mathcal{T}(\Delta x' \hat{x} + \Delta y' \hat{y}) \\ \mathcal{T}(\Delta x' \hat{x}) \mathcal{T}(\Delta y' \hat{y}) &= \mathcal{T}(\Delta x' \hat{x} + \Delta y' \hat{y}) \end{aligned} \quad (۳۸-۶-۱)$$



شکل ۸-۱: انتقال‌های پی‌درپی در جهات مختلف

این نکته آن‌طور که به‌نظر می‌رسد، بدیهی نیست. همان‌طور که در فصل ۳ نشان خواهیم داد چرخش، پیرامون محورهای مختلف، جابه‌جا پذیر نیست. با فرض $\Delta x'$ و $\Delta y'$ ، تا مرتبه‌ی دوم، داریم:

$$\begin{aligned} [\mathcal{T}(\Delta y' \hat{y}), \mathcal{T}(\Delta x' \hat{x})] &= \left[\left(1 - \frac{ip_y \Delta y'}{\hbar} - \frac{p_y^2 (\Delta y')^2}{2\hbar^2} + \dots \right) \right. \\ &\quad \left. \left(1 - \frac{ip_x \Delta x'}{\hbar} - \frac{p_x^2 (\Delta x')^2}{2\hbar^2} + \dots \right) \right] \\ &= -\frac{(\Delta x')(\Delta y') [p_y, p_x]}{\hbar^2} \end{aligned} \quad (۳۹-۶-۱)$$

از آن‌جا که $\Delta x'$ و $\Delta y'$ دلخواه هستند، رابطه‌ی (۳۸-۶-۱) برقرار می‌باشد. یا:

$$[\mathcal{T}(\Delta y' \hat{y}), \mathcal{T}(\Delta x' \hat{x})] = 0 \quad (۴۰-۶-۱)$$

که رابطه‌ی زیر را نتیجه می‌دهد:

$$[p_x, p_y] = 0 \quad (۴۱-۶-۱)$$

یا به طور کلی تر

$$[p_i, p_j] = 0 \quad (۴۲-۶-۱)$$

این رابطه‌ی جابه‌جایی نتیجه‌ی مستقیم این واقعیت است که انتقال در راستاهای مختلف، جابه‌جاپذیرند. هر وقت که سازنده‌های تبدیلات با هم جابه‌جا شوند، گروه متناظر با آن‌ها آبدلی گفته می‌شود. گروه انتقال در سه بُعد آبدلی است.

معادله‌ی (۴۲-۶-۱) نشان می‌دهد که p_x ، p_y و p_z مشاهده‌پذیرهایی هستند که متقابلاً با یکدیگر سازگارند. بنابراین می‌توانیم ویژه‌کت‌های همزمانی برای p_x ، p_y و p_z در نظر بگیریم. داریم:

$$|\mathbf{p}'\rangle \equiv |p'_x, p'_y, p'_z\rangle \quad (۴۳-۶-۱) \text{ الف}$$

$$p_x |\mathbf{p}'\rangle = p'_x |\mathbf{p}'\rangle, p_y |\mathbf{p}'\rangle = p'_y |\mathbf{p}'\rangle, p_z |\mathbf{p}'\rangle = p'_z |\mathbf{p}'\rangle \quad (۴۳-۶-۱) \text{ ب}$$

آموزنده است که اثر $\mathcal{T}(d\mathbf{x}')$ را روی این چنین ویژه‌کت تکانه‌ای به‌دست آوریم:

$$\mathcal{T}(d\mathbf{x}') |\mathbf{p}'\rangle = \left(1 - \frac{i\mathbf{p}' \cdot d\mathbf{x}'}{\hbar}\right) |\mathbf{p}'\rangle = \left(1 - \frac{i\mathbf{p}' \cdot d\mathbf{x}'}{\hbar}\right) |\mathbf{p}'\rangle \quad (۴۴-۶-۱)$$

با اینکه تغییر فاز کوچکی به ویژه‌کت تکانه اعمال می‌شود ولی می‌بینیم که این ویژه‌کت یکسان باقی می‌ماند. بنابراین برخلاف $|\mathbf{x}'\rangle$ ، $|\mathbf{p}'\rangle$ ویژه‌کت $\mathcal{T}(d\mathbf{x}')$ است. چون:

$$[\mathbf{p}, \mathcal{T}(d\mathbf{x}')] = 0 \quad (۴۵-۶-۱)$$

اگرچه ویژه‌مقدار $\mathcal{T}(d\mathbf{x}')$ مختلط است، اما توجه کنید که ما انتظار هم نداشتیم که یک ویژه‌کت حقیقی داشته باشیم. چون $\mathcal{T}(d\mathbf{x}')$ با آنکه یکانی است ولی هرمیتی نیست.

روابط جابه‌جایی کانونیک

روابط جابه‌جایی که با مطالعه‌ی خواص انتقال به‌دست می‌آید را جمع‌بندی می‌کنیم:

$$[x_i, x_j] = 0, \quad [p_i, p_j] = 0, \quad [x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad (۴۶-۶-۱)$$

در این کتاب، این روابط زیربنای مکانیک کوانتومی را شکل می‌دهد. پی‌ای.ام. دیراک این روابط را "شرایط بنیادین کوانتوم" نامید. بیشتر اوقات آن‌ها به‌عنوان روابط جابه‌جایی کانونیک یا روابط جابه‌جایی بنیادین شناخته می‌شوند.

از نظر تاریخی، این دلیلو. هایزنبرگ بود که در سال ۱۹۲۵ نشان داد، قاعده‌ی ترکیب برای خطوط گذار اتمی که در آن زمان شناخته شده بود، را می‌توان با اختصاص آرایه‌ای از اعداد به فرکانس‌ها، که از

یک قاعده‌ی ضربی منطقی پیروی می‌کنند، بهتر شناخت. بلافاصله پس از او، ام. بورن و پی. جُردن نشان دادند که قاعده‌ی ضربی هایزنبرگ اساساً همان جبر ماتریسی است و براساس تشابه ماتریسی (۱-۶-۴۶) نظریه‌ای را گسترش دادند که امروزه به مکانیک ماتریسی، معروف است.*

همچنین در سال ۱۹۲۵، پی. ای. ام. دیراک مشاهده کرد که در روابط کوانتوم مکانیکی مختلفی که از روابط کلاسیکی متناظر به دست می‌آید، می‌بایست گروه‌ی پواسون با جابه‌جاگر به صورت زیر تعویض شوند:

$$[,]_{\text{کلاسیکی}} \rightarrow \frac{[,]}{i\hbar} \quad (۱-۶-۴۷)$$

یادآوری می‌کنیم که گروه‌ی کلاسیک پواسون برای توابعی از q و p به شکل زیر تعریف می‌شود.

$$[A(q, p), B(q, p)]_{\text{کلاسیکی}} \equiv \sum_s \left(\frac{\partial A}{\partial q_s} \frac{\partial B}{\partial p_s} - \frac{\partial A}{\partial p_s} \frac{\partial B}{\partial q_s} \right) \quad (۱-۶-۴۸)$$

برای مثال، در مکانیک کلاسیک، داریم:

$$[x_i, p_j]_{\text{کلاسیکی}} = \delta_{ij} \quad (۱-۶-۴۹)$$

که در مکانیک کوانتومی رابطه‌ی (۱-۶-۳۳) برقرار است.

قاعده‌ی (۱-۶-۴۷) دیراک منطقی است چون گروه‌ی کلاسیکی پواسون و جابه‌جاگر کوانتومی، خواص جبری یکسانی دارند. به خصوص، روابطی که در ادامه بیان شده‌اند را می‌توان برای $[,]$ اثبات کرد، حال می‌خواهد که این گروه‌ی پواسون باشد یا جابه‌جاگر کوانتومی:

$$[A, A] = 0 \quad (۱-۶-۵۰ \text{ الف})$$

$$[A, B] = -[B, A] \quad (۱-۶-۵۰ \text{ ب})$$

$$[A, c] = 0 \quad (c \text{ is just a number}) \quad (۱-۶-۵۰ \text{ ج})$$

$$[A + B, C] = [A, C] + [B, C] \quad (۱-۶-۵۰ \text{ د})$$

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C] \quad (۱-۶-۵۰ \text{ ه})$$

$$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0 \quad (۱-۶-۵۰ \text{ و})$$

* به همین خاطر، $pq - qp = h/2\pi i$ روی سنگ قبر ام. بورن در کوبننگن حک شده است.

آخرین رابطه، به اتحاد ژاکوبی معروف است.* اما، تفاوت‌های مهمی نیز وجود دارد. نخستین تفاوت این که، بُعد کروشه‌ی کلاسیکی پواسون با جابه‌جاگر کوانتومی متفاوت است، چون در (۱-۶-۴۸) دیفرانسیل‌گیری وجود دارد. دوم، کروشه‌ی پواسون دو تابع حقیقی از q و p حقیقی خالص است در حالی که جابه‌جاگر دو عملگر هرمیتی، پادهرمیتی است (لم ۳ در بخش ۱-۴ را ببینید). برای رعایت این اختلاف عامل $i\hbar$ ؛ در (۱-۶-۴۷) ظاهر شده است.

ما عمداً از بیان تشابه دیراک در به‌دست آوردن روابط جابه‌جایی کانونیک دوری گزیدیم. نتایج به‌دست آمده‌ی ما در روابط جابه‌جایی اساساً بر دو مطلب استوار است: (۱) خواص انتقال و (۲) تعریف سازنده‌ی انتقال با عملگر تکانه تقسیم بر ثابت جهانی با بعد کنش. معتقدیم که این نتایج بسیار قوی هستند، چون این نتایج در شرایطی که مشاهده‌پذیرها همتای کلاسیکی نداشته‌اند، به‌دست آمده است. برای مثال، مفهوم تکانه‌ی زاویه‌ای اسپین که در بخش ۱-۴ مورد توجه قرار گرفت. همتایی مثل p و q کلاسیکی ندارد. همان‌طور که در فصل ۳ نشان خواهیم داد، روابط تکانه زاویه‌ای اسپین را می‌توان با استفاده از خواص چرخش به‌دست آورد. درست همان‌طور که روابط جابه‌جایی کانونیک را با استفاده از خواص انتقال به‌دست آوردیم.

۷.۱ توابع موج در فضای تکانه و مکان

تابع موج فضای مکان

در این بخش به مطالعه‌ی خواص توابع موج در هر دو فضای تکانه و مکان می‌پردازیم. برای سادگی بگذارید که به حالت یک بعدی برگردیم. کت‌های پایه‌ی استفاده شده، کت‌های مکان هستند که در رابطه‌ای زیر صدق می‌کنند.

$$x|x'\rangle = x'|x'\rangle \quad (1-7-1)$$

با توجه به شرایط تعامد، طبق رابطه زیر بهنجارند:

$$\langle x''|x'\rangle = \delta(x'' - x') \quad (2-7-1)$$

یادآوری می‌کنیم که می‌توان کت مبین یک حالت فیزیکی را بر مبنای $|x'\rangle$ بسط داد:

$$|\alpha\rangle = \int dx' |x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle \quad (3-7-1)$$

* جالب است که اثبات اتحاد ژاکوبی در مکانیک کوانتومی بسیار ساده‌تر از همسان کلاسیکی آن است.

ضریب بسط $\langle x'|\alpha\rangle$ در عبارت زیر

$$|\langle x'|\alpha\rangle|^2 dx' \quad (۴-۷-۱)$$

احتمال یافتن ذره در باریکه‌ی dx' ، حول x' را به دست می‌دهد. در فرمول‌بندی ما ضرب داخلی $\langle x'|\alpha\rangle$ را به عنوان تابع موج $\psi_\alpha(x')$ برای حالت $|\alpha\rangle$ می‌دانیم:

$$\langle x'|\alpha\rangle = \psi_\alpha(x') \quad (۵-۷-۱)$$

در مکانیک موجی ابتدایی، تعبیر احتمالاتی برای ضریب بسط $\langle a'|\alpha\rangle (= c_{a'})$ و برای تابع موج $\psi_\alpha(x') (= \langle x'|\alpha\rangle)$ غالباً به صورت اصول موضوعه‌ی جداگانه‌ای ارائه می‌شوند. یکی از امتیازات بزرگ فرمول‌بندی ما، که در اصل توسط دیراک ارائه شد به این است که این دو گونه تعبیر، یکی می‌شوند. $\psi_\alpha(x')$ یک ضریب بسط درست مانند $c_{a'}$ است ((۳-۷-۱) را ببینید). با پیروی از ردپای دیراک به یکپارچگی مکانیک کوانتومی می‌رسیم.

ضرب داخلی $\langle \beta|\alpha\rangle$ را در نظر بگیرید. با استفاده از تمامیت $|x'\rangle$ داریم:

$$\begin{aligned} \langle \beta|\alpha\rangle &= \int dx' \langle \beta|x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle \\ &= \int dx' \psi_\beta^*(x') \psi_\alpha(x') \end{aligned} \quad (۶-۷-۱)$$

پس $\langle \beta|\alpha\rangle$ با همپوشانی در تابع موج فرمول‌بندی می‌شود. توجه کنید که ما $\langle \beta|\alpha\rangle$ را به عنوان انتگرال همپوشانی تعریف نکرده بودیم. تعریف $\langle \beta|\alpha\rangle$ با انتگرال همپوشانی از اصل موضوعه تمامیت برای $|x'\rangle$ ناشی می‌شوند. به عبارت کلی‌تر تعریف $\langle \beta|\alpha\rangle$ ، مستقل از نمایش، به صورت دامنه‌ی احتمال یافتن حالت $|\alpha\rangle$ در حالت $|\beta\rangle$ است.

بگذارید این بار بسط

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|\alpha\rangle \quad (۷-۷-۱)$$

را با زبان توابع موج تفسیر کنیم. می‌بایست دو طرف رابطه‌ی (۷-۷-۱) را از سمت چپ در ویژه برای $|x'\rangle$ ضرب کنیم. بنابراین:

$$\langle x'|\alpha\rangle = \sum_{a'} \langle x'|a'\rangle \langle a'|\alpha\rangle \quad (۸-۷-۱)$$

در مکانیک موجی معمولی این جمله به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\psi_\alpha(x') = \sum_{a'} c_{a'} u_{a'}(x')$$

که در آن، ما ویژه تابع عملگر A را با ویژه مقدار a' نمایش نمی‌دهیم:

$$u_{a'}(x') = \langle x' | a' \rangle \quad (9-7-1)$$

حال بگذارید امتحان کنیم که چگونه $\langle \beta | A | \alpha \rangle$ را می‌توان با استفاده از توابع موج، برای $\langle \alpha \rangle$ و $|\beta\rangle$ نوشت. به روشنی داریم:

$$\begin{aligned} \langle \beta | A | \alpha \rangle &= \int dx' \int dx'' \langle \beta | x' \rangle \langle x' | A | x'' \rangle \langle x'' | \alpha \rangle \\ &= \int dx' \int dx'' \psi_{\beta}^*(x') \langle x' | A | x'' \rangle \psi_{\alpha}(x'') \end{aligned} \quad (10-7-1)$$

پس برای حل $\langle \beta | A | \alpha \rangle$ می‌باید آرایه‌های ماتریس $\langle x' | A | x'' \rangle$ را بدانیم. که این ماتریس در حالت کلی تابعی از دو متغیر x' و x'' است.

اگر مشاهده‌پذیر A تابعی از عملگر مکان x باشد، مسأله بسیار ساده می‌شود. به ویژه اگر فرض کنیم:

$$A = x^2 \quad (11-7-1)$$

که در مسأله‌ی نوسان گر هماهنگ که در فصل ۲ مورد بررسی قرار می‌گیرد، عملاً در هامیلتونی وارد می‌شود. داریم:

$$\langle x' | x^2 | x'' \rangle = (\langle x' |) \cdot (x''^2 | x'' \rangle) = x''^2 \delta(x' - x'') \quad (12-7-1)$$

که در آن از (۱-۷-۱) و (۲-۷-۱) استفاده کرده‌ایم. اکنون انتگرال دوگانه در (۱۰-۷-۱) به یک انتگرال یگانه کاهش می‌یابند.

$$\begin{aligned} \langle \beta | x^2 | \alpha \rangle &= \int dx' \langle \beta | x' \rangle x'^2 \langle x' | \alpha \rangle \\ &= \int dx' \psi_{\beta}^*(x') x'^2 \psi_{\alpha}(x') \end{aligned} \quad (13-7-1)$$

در حالت کلی:

$$\langle \beta | f(x) | \alpha \rangle = \int dx' \psi_{\beta}^*(x') f(x') \psi_{\alpha}(x') \quad (14-7-1)$$

توجه کنید که $f(x)$ در سمت چپ عبارت (۱۴-۷-۱) یک عملگر است. در حالی که $f(x')$ در سمت راست عملگر نیست.

عملگر تکانه در پایه‌ی مکان

اکنون می‌خواهیم ببینیم که عملگر تکانه در پایه‌ی x (یعنی در نمایشی که ویژه‌کتهای مکان به‌عنوان کت پایه استفاده شده‌اند) چگونه نمایش داده می‌شود. با تعریف تکانه به‌عنوان سازنده‌ی انتقال بی‌نهایت کوچک شروع می‌کنیم:

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{ip\Delta x'}{\hbar}\right)|\alpha\rangle &= \int dx' \mathcal{T}(\Delta x')|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle \\ &= \int dx'|x' + \Delta x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle \\ &= \int dx'|x'\rangle\langle x' - \Delta x'|\alpha\rangle \\ &= \int dx'|x'\rangle\left(\langle x'|\alpha\rangle - \Delta x' \frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\alpha\rangle\right) \end{aligned} \quad (15-7-1)$$

با مقایسه‌ی دو طرف داریم:

$$p|\alpha\rangle = \int dx'|x'\rangle\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\alpha\rangle\right) \quad (16-7-1)$$

یا

$$\langle x'|p|\alpha\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\alpha\rangle \quad (17-7-1)$$

که در آن از خاصیت تعامد (۲-۷-۱) استفاده کردیم. برای آرایه‌های ماتریس p در نمایش x ، داریم:

$$\langle x'|p|x''\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'}\delta(x' - x'') \quad (18-7-1)$$

از (۱۶-۷-۱) به اتحاد بسیار مهمی دست می‌یابیم:

$$\begin{aligned} \langle \beta|p|\alpha\rangle &= \int dx' \langle \beta|x'\rangle\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\alpha\rangle\right) \\ &= \int dx' \psi_\beta^*(x')\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'}\right)\psi_\alpha(x') \end{aligned} \quad (19-7-1)$$

فرمول‌بندی ما در (۱۹-۷-۱) یک اصل موضوع نیست. بلکه از آن برای استخراج خواص اساسی تکانه

استفاده شد. با چند بار اعمال (۱۷-۷-۱) داریم:

$$\langle x' | p^n | \alpha \rangle = (-i\hbar)^n \frac{\partial^n}{\partial x'^n} \langle x' | \alpha \rangle \quad (20-7-1)$$

$$\langle \beta | p^n | \alpha \rangle = \int dx' \psi_\beta^*(x') (-i\hbar)^n \frac{\partial^n}{\partial x'^n} \psi_\alpha(x') \quad (21-7-1)$$

تابع موج فضای تکانه

تاکنون تنها در پایه‌ی x کار کردیم. در عمل یک تقارن کامل بین x و p وجود دارد (بدون توجه به یک علامت منفی). می‌توانیم این تقارن را در روابط جابه‌جایی کانونی ببینیم. حال بگذارید در پایه‌ی p یعنی در نمایش تکانه کار کنیم.

کار را در فضای یک بُعدی ادامه می‌دهیم. ویژه‌کت‌های پایه در پایه‌ی p به صورت زیر مشخص می‌شوند:

$$p | p' \rangle = p' | p' \rangle \quad (22-7-1)$$

و

$$\langle p' | p'' \rangle = \delta(p' - p'') \quad (23-7-1)$$

همانند ویژه‌کت‌های مکان $\{|x'\rangle\}$ ، ویژه‌کت‌های تکانه $|p'\rangle$ هم یک فضای کت می‌سازند. بنابراین می‌توان کت حالت دلخواه $|\alpha\rangle$ را به صورت زیر بسط داد:

$$|\alpha\rangle = \int dp' | p' \rangle \langle p' | \alpha \rangle \quad (24-7-1)$$

می‌توانیم برای ضریب بسط $\langle p' | \alpha \rangle$ ، یک تعبیر احتمالاتی داشته باشیم. در این صورت که احتمال آنکه از اندازه‌گیری p ، در باریکه‌ی dp' ، ویژه مقدار p' به دست آید، برابر با $| \langle p' | \alpha \rangle |^2 dp'$ است. مرسوم است که $\langle p' | \alpha \rangle$ را تابع موج فضای تکانه بنامیم و اغلب برای نمایش آن از نماد $\phi_\alpha(p')$ استفاده می‌شود:

$$\langle p' | \alpha \rangle = \phi_\alpha(p') \quad (25-7-1)$$

اگر $|\alpha\rangle$ بهنجار باشد، داریم:

$$\int dp' \langle \alpha | p' \rangle \langle p' | \alpha \rangle = \int dp' |\phi_\alpha(p')|^2 = 1 \quad (26-7-1)$$

اکنون بگذارید تا ارتباطی بین نمایش x و نمایش p برقرار کنیم. یادآوری می‌کنیم که در مورد طیف گسسته، تغییر پایه‌ها از مجموعه‌ی قدیمی $\{|a'\rangle\}$ به مجموعه‌ی جدید $\{|b'\rangle\}$ با ماتریس انتقال

(۷-۵-۱) به دست می‌آید. به همین صورت انتظار داریم که در این جا هم اطلاعات خواسته شده در $\langle x' | p' \rangle$ که هم تابعی از x' است و هم تابعی از p' ، وجود داشته باشد. معمولاً به $\langle x' | p' \rangle$ تابع انتقال از نمایش x به نمایش p گفته می‌شود. برای به دست آوردن شکل صریح $\langle x' | p' \rangle$ ، ابتدا رابطه‌ی (۷-۱-۱۷) را یادآوری می‌کنیم. با قرار ویژه کت تکانه‌ی $|p'\rangle$ به جای $|\alpha\rangle$ داریم:

$$\langle x' | p' \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \langle x' | p' \rangle \quad (۲۷-۷-۱)$$

یا

$$p' \langle x' | p' \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \langle x' | p' \rangle \quad (۲۸-۷-۱)$$

جواب معادله‌ی دیفرانسیل برای $\langle x' | p' \rangle$ برابر است با:

$$\langle x' | p' \rangle = N \exp\left(\frac{ip'x'}{\hbar}\right) \quad (۲۹-۷-۱)$$

N ثابت بهنجارش است که در یک لحظه مشخص می‌شود. با وجود اینکه تابع انتقال $\langle x' | p' \rangle$ یک تابع با دو متغیر x' و p' است، می‌توانیم آن را موقتاً تابعی از x' با p' ثابت در نظر بگیریم. این تابع را می‌توان به عنوان دامنه‌ی احتمال برای یافتن ویژه حالت مشخص p' تکانه در x' در نظر گرفت. به عبارت دیگر این تابع، تابع موج برای ویژه حالت تکانه $|p'\rangle$ است و غالباً به عنوان ویژه تابع تکانه (هنوز در فضای x) در نظر گرفته می‌شود. بنابراین (۷-۱-۲۹) به سادگی می‌گوید که تابع موج ویژه حالت تکانه یک موج تخت است. جالب است که این جواب موج تحت را بدون حل معادله‌ی شرودینگر (که هنوز آن را نوشته‌ایم) به دست آوریم.

بگذارید برای به دست آوردن ثابت بهنجارش N نخست فرض کنیم که:

$$\langle x' | x'' \rangle = \int dp' \langle x' | p' \rangle \langle p' | x'' \rangle \quad (۳۰-۷-۱)$$

طرف چپ برابر با $\delta(x' - x'')$ است. طرف راست را می‌توان با استفاده از شکل صریح $\langle x' | p' \rangle$ به دست آورد:

$$\begin{aligned} \delta(x' - x'') &= |N|^2 \int dp' \exp\left[\frac{ip'(x' - x'')}{\hbar}\right] \\ &= 2\pi\hbar |N|^2 \delta(x' - x'') \end{aligned} \quad (۳۱-۷-۱)$$

بنا به قرارداد N را حقیقی خالص و مثبت انتخاب می‌کنیم، در نهایت داریم:

$$\langle x' | p' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{ip'x'}{\hbar}\right) \quad (۳۲-۷-۱)$$

اکنون نشان می‌دهیم که چگونه تابع موج فضای مکان با تابع موج فضای تکانه ارتباط دارد. همه‌ی آن چیزی که باید انجام دهیم به‌قرار زیر است:

$$\langle x' | \alpha \rangle = \int dp' \langle x' | p' \rangle \langle p' | \alpha \rangle \quad (الف ۳۳-۷-۱)$$

و

$$\langle p' | \alpha \rangle = \int dx' \langle p' | x' \rangle \langle x' | \alpha \rangle \quad (ب ۳۳-۷-۱)$$

برابرند با:

$$\psi_\alpha(x') = \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right] \int dp' \exp\left(\frac{ip'x'}{\hbar}\right) \phi_\alpha(p') \quad (الف ۳۴-۷-۱)$$

و

$$\phi_\alpha(p') = \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right] \int dx' \exp\left(\frac{-ip'x'}{\hbar}\right) \psi_\alpha(x') \quad (ب ۳۴-۷-۱)$$

این جفت معادله، همان چیزی است که از قضیه‌ی تبدیل فوریه انتظار می‌رود. در شکل ریاضیاتی ما همان‌طور که عملیات فوریه در تبدیلات انتگرالی وارد می‌شود، عمل می‌کنیم.

بسته موج‌های گاوسی

برای روشن شدن فرمول‌بندی کلی، بررسی یک مثال فیزیکی مفید است. چیزی را که به نام **بسته موج گاوسی** می‌شناسیم و تابع موج آن در فضای x به‌صورت زیر است در نظر بگیرید:

$$\langle x' | \alpha \rangle = \left[\frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{d}} \right] \exp\left[ikx' - \frac{x'^2}{2d^2} \right] \quad (۳۵-۷-۱)$$

این یک موج تخت با عدد موج k است که با یک تابع موج گاوسی به مرکز مبدأ همراه شده است. احتمال مشاهده‌ی ذره برای $d > |x'|$ به سرعت به سمت صفر می‌رود. به‌طور کمی‌تر چگالی احتمال $|\langle x' | \alpha \rangle|^2$ حالتی گاوسی با عرض d دارد.

اکنون به محاسبه‌ی مقادیر انتظاری x ، x^2 ، p و p^2 می‌پردازیم. پیداست که بنا به تقارن مقدار

انتظاری x برابر با صفر است:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle \alpha | x' \rangle x' \langle x' | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' |\langle x' | \alpha \rangle|^2 x' = 0 \quad (۳۶-۷-۱)$$

برای x^2 داریم:

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' x'^2 |\langle x' | \alpha \rangle|^2 \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{\pi} d} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dx' x'^2 \exp \left[\frac{-x'^2}{d^2} \right] \\ &= \frac{d^2}{2} \end{aligned} \quad (۳۷-۷-۱)$$

که:

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{d^2}{2} \quad (۳۸-۷-۱)$$

رابطه‌ی پاشندگی را برای عملگر مکان نتیجه می‌دهد. مقدار انتظاری p و p^2 را نیز می‌توان به صورت زیر به دست آورد:

$$\langle p \rangle = \hbar k \quad (الف) \quad (۳۹-۷-۱)$$

$$\langle p^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2d^2} + \hbar^2 k^2 \quad (ب) \quad (۳۹-۷-۱)$$

که محاسبه‌ی آن به عنوان یک تمرین رها شده است. بنابراین پاشندگی تکانه برابر است با:

$$\langle (\Delta p)^2 \rangle = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = \frac{\hbar^2}{2d^2} \quad (۴۰-۷-۱)$$

با استفاده از (۳۸-۷-۱) و (۴۰-۷-۱) می‌توانیم رابطه‌ی عدم قطعیت هایزنبرگ (۳۴-۶-۱) را ارزیابی کنیم. در این مورد ضرب عدم قطعیت برابر است با:

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4} \quad (۴۱-۷-۱)$$

این رابطه مستقل از d است. بنابراین وقتی با یک بسته موج گاوسی سر و کار داریم، عملاً در رابطه‌ی کلی (۳۴-۶-۱)، به جای نامساوی، تساوی ظاهر می‌شود. به همین خاطر بسته موج گاوسی را غالباً، بسته‌ای با حداقل عدم قطعیت می‌نامند.

اکنون به فضای تکانه می‌رویم. با انتگرال گیری مستقیم و مربع کامل کردن عامل نمایی، به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} \langle p' | \alpha \rangle &= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right) \left(\frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{d}} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dx' \exp \left(\frac{-ip'x'}{\hbar} + ikx' - \frac{x'^2}{2d^2} \right) \\ &= \sqrt{\frac{d}{\hbar\pi}} \exp \left[\frac{-(p' - \hbar k)^2 d^2}{2\hbar^2} \right] \end{aligned}$$

(۴۲-۷-۱)

تابع موج تکانه نیز، روش دیگری برای به دست آوردن و $\langle p \rangle \langle p^2 \rangle$ مهیا می‌کند، که محاسبه آن به عنوان تمرین رها شده است.

احتمال یافتن ذره با تکانه‌ی p' (در فضای تکانه) تابعی گاوسی است که این تابع حول $\hbar k$ قرار گرفته است. احتمال یافتن ذره در x' (در فضای مکان) نیز به همان صورت، تابعی گاوسی است که حول صفر گسترده شده است. همچنین، طول دو تابع گاوسی با معکوس یکدیگر متناسب‌اند. این مطلب راه دیگری برای بیان ثابت بودن ضرب عدم قطعیت $\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle$ است که به طور دقیق در (۴۱-۷-۱) محاسبه شد. عرض زیاد تابع احتمال در فضای p منجر به باریکی تابع احتمال در فضای x خواهد شد و برعکس.

به عنوان یک مثال حدی، قرار دهید $d \rightarrow \infty$. بنابراین تابع موج فضای مکان (۳۵-۷-۱) به موجی تخت که همه‌ی فضا را در بر گرفته است تبدیل می‌شود. احتمال یافتن ذره ثابت و مستقل از x' است. در مقابل، تابع موج فضای تکانه شبیه به تابع δ است و قله‌ی تیزی در $\hbar k$ دارد. با فرض مخالف یعنی $d \rightarrow 0$ ، تابع موج فضای مکان شبیه به تابع دلتا و جایگزیده است اما تابع موج فضای تکانه (۴۲-۷-۱) مستقل از p' و ثابت است.

دیدیم که یک حالت کاملاً جایگزیده (در فضای x) وابسته به یک حالت خاص از برهم نهی ویژه حالت‌های تکانه با تمام مقادیر ممکن تکانه است. حتی آن دسته از ویژه حالت‌های تکانه را که تکانه‌ی آن‌ها قابل مقایسه یا بیشتر از mc است نیز باید به حساب آورد. هرچند، در چنین تکانه‌های بزرگی توصیفات وابسته به مکانیک کوانتومی غیرنسبیتی با شکست مواجه می‌شود.* با وجود این محدودیت، فرمول‌بندی ما که بر پایه‌ی وجود ویژه‌کت‌های مکان $\langle x' \rangle$ استوار است، کاربرد وسیعی دارد.

* استنتاج مفهوم حالت جایگزیده در مکانیک کوانتومی نسبیتی بسیار مشکل است. این به خاطر وجود «حالت‌هایی با انرژی منفی» یا تولید جفت است (ساکورایی،

گسترش به سه بُعد

برای سادگی، در این بخش تاکنون، تنها در فضای یک‌بعدی کار کردیم، اما اگر تغییرات لازم را انجام دهیم می‌توانیم نتایج را به سه بُعد تعمیم دهیم. کت‌های پایه‌ای که مورد استفاده قرار می‌گیرند، در فضای مکان باید در رابطه‌ی زیر صدق کنند:

$$\mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle = \mathbf{x}'|\mathbf{x}'\rangle \quad (۴۳-۷-۱)$$

یا ویژه‌کت‌های تکانه باید در رابطه‌ی زیر قرار بگیرند:

$$\mathbf{p}|\mathbf{p}'\rangle = \mathbf{p}'|\mathbf{p}'\rangle \quad (۴۴-۷-۱)$$

این کت‌ها شرایط بهنجارش را به دست می‌دهند.

$$\langle \mathbf{x}'|\mathbf{x}''\rangle = \delta^3(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') \quad (۴۵-۷-۱ \text{ الف})$$

و

$$\langle \mathbf{p}'|\mathbf{p}''\rangle = \delta^3(\mathbf{p}' - \mathbf{p}'') \quad (۴۵-۷-۱ \text{ ب})$$

که δ^3 نمایش‌دهنده‌ی تابع δ سه بُعدی است:

$$\delta^3(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') = \delta(x' - x'')\delta(y' - y'')\delta(z' - z'') \quad (۴۶-۷-۱)$$

رابطه‌ی تمامیت به صورت زیر درمی‌آید:

$$\int d^3x' |\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}'| = 1 \quad (۴۷-۷-۱ \text{ الف})$$

و

$$\int d^3p' |\mathbf{p}'\rangle \langle \mathbf{p}'| = 1 \quad (۴۷-۷-۱ \text{ ب})$$

که می‌توان از آن برای بیان یک کت حالت اختیاری استفاده کرد:

$$|\alpha\rangle = \int d^3x' |\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle \quad (۴۸-۷-۱ \text{ الف})$$

$$\xi|\xi'\rangle = \xi'|\xi'\rangle \quad (۴۸-۷-۱ \text{ ب})$$

ضرایب بسط $\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle$ و $\langle \mathbf{p}'|\alpha\rangle$ به ترتیب برابر با توابع موج $\psi_\alpha(\mathbf{x}')$ و $\phi_\alpha(\mathbf{p}')$ در فضای مکان و تکانه هستند. وقتی عملگر تکانه بین $|\beta\rangle$ و $|\alpha\rangle$ قرار می‌گیرد، داریم:

$$\xi|\xi'\rangle = \xi'|\xi'\rangle \quad (۴۹-۷-۱)$$

تابع تبدیل قابل مقایسه با (۳۲-۷-۱) است.

$$\langle \mathbf{x}' | \mathbf{p}' \rangle = \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \right] \exp\left(\frac{i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}'}{\hbar}\right) \quad (۵۰-۷-۱)$$

بنابراین:

$$\psi_{\alpha}(\mathbf{x}') = \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \right] \int d^3p' \exp\left(\frac{i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}'}{\hbar}\right) \phi_{\alpha}(\mathbf{p}') \quad (۵۱-۷-۱) \text{ الف}$$

و

$$\phi_{\alpha}(\mathbf{p}') = \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \right] \int d^3x' \exp\left(\frac{-i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}'}{\hbar}\right) \psi_{\alpha}(\mathbf{x}') \quad (۵۱-۷-۱) \text{ ب}$$

بررسی بُعد تابع موج جذاب است. در مسائل یک بعدی شرط بهنجارش (۱-۶-۸) نتیجه می‌دهد که $|\langle x' | \alpha \rangle|^2$ بُعد عکس طول دارد، بنابراین خود تابع موج باید بُعد $(\text{طول})^{-1/2}$ داشته باشد. همین‌طور، تابع موج در مسائل سه بعدی باید بُعد $(\text{طول})^{-3/2}$ داشته باشد چون $|\langle x' | \alpha \rangle|^2$ روی تمام حجم فضا باید برابر با یک (بدون بُعد) باشد.

مسائل

۱- نشان دهید

$$[AB, CD] = -AC\{D, B\} + A\{C, B\}D - C\{D, A\}B + \{C, A\}DB$$

۲- فرض کنید ماتریس 2×2 X (که الزاماً هرمیتی یا واحد نمی‌باشد) به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$X = a_0 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a}$$

که a_0 و $a_{1,2,3}$ عدد هستند.

الف) a_0 و a_k ($k=1,2,3$) به چه صورتی به $\text{tr}(X)$ و $\text{tr}(\sigma_k X)$ وابسته‌اند؟

ب) a_0 و a_k را برحسب آرایه‌های ماتریسی X_{ij} به دست آورید.

۳- نشان دهید که دترمینان ماتریس 2×2 $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a}$ تحت تبدیل

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a} \rightarrow \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a}' \equiv \exp\left(\frac{i\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}} \phi}{2}\right) \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a} \exp\left(\frac{-i\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}} \phi}{2}\right)$$

ناوردا است. a'_k را برحسب a_k در حالی که \hat{n} در جهت مثبت محور Z باشد به دست آورید و نتیجه‌ی خود را تفسیر کنید.

۴- با استفاده از جبر براکت عبارات زیر را اثبات و یا محاسبه کنید:

الف) $\text{tr}(XY) = \text{tr}(YX)$ ؛ وقتی که X و Y عملگر هستند.

ب) $(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger$ ، که X و Y عملگر هستند.

ج) $\exp[if(A)] = ?$ را به شکل براکت بنویسید. که A عملگری هرمیتی با ویژه مقادیر معلوم است.

د) $\sum_{a'} \psi_{a'}^*(\mathbf{x}') \psi_{a'}(\mathbf{x}'')$ که در آن $\langle \mathbf{x}' | a' \rangle = \psi_{a'}(\mathbf{x}')$

۵- الف) دو کت $|\alpha\rangle$ و $|\beta\rangle$ را در نظر بگیرید. فرض کنید $\langle a' | \alpha \rangle$ و $\langle a'' | \alpha \rangle$ و و $\langle a' | \beta \rangle$ و $\langle a'' | \beta \rangle$ و ... معلومند و در آن‌ها $|a'\rangle$ و $|a''\rangle$ و یک مجموعه‌ی کامل از کت‌های پایه را تشکیل می‌دهند.

نمایش ماتریسی $|\beta\rangle\langle\alpha|$ را در این پایه به دست آورید.

ب) اکنون یک سیستم با اسپین $\frac{1}{2}$ را در نظر بگیرید و $|\alpha\rangle$ و $|\beta\rangle$ را به ترتیب $|s_z = \hbar/2\rangle$ و

$|s_x = \hbar/2\rangle$ قرار دهید. ماتریس مربعی متناظر با $|\beta\rangle\langle\alpha|$ را در پایه‌ی معمولی (s_z قطری) به طور

صریح بنویسید.

۶- $|i\rangle$ و $|j\rangle$ را به عنوان ویژه کت‌های عملگر هرمیتی A در نظر بگیرید. تحت چه شرایطی می‌توان نتیجه

گرفت که $|i\rangle + |j\rangle$ هم ویژه کت A است؟ جواب خود را توضیح دهید.

۷- فرض کنید یک فضای کت با ویژه کت‌های عملگر هرمیتی A ، $\{|a'\rangle\}$ ساخته شده است. و هیچ تبهگنی

وجود ندارد.

الف) نشان دهید که

$$\prod_{a'} (A - a')$$

عملگر تهی است.

ب) معنی عبارت

$$\prod_{a'' \neq a'} \frac{(A - a'')}{(a' - a'')} ?$$

چیست؟

ج) قسمت‌های الف) و ب) را با فرض اینکه A برابر با S_z در یک سیستم اسپین $\frac{1}{2}$ است به دست

آورید.

۸- با استفاده از تعامد $|+\rangle$ و $|-\rangle$ نشان دهید:

$$[S_i, S_j] = i\epsilon_{ijk} \hbar S_k, \quad \{S_i, S_j\} = \left(\frac{\hbar^2}{2}\right) \delta_{ij}$$

که در آن

$$S_x = \frac{\hbar}{2} (|+\rangle\langle -| + |- \rangle\langle +|), \quad S_y = \frac{i\hbar}{2} (-|+\rangle\langle -| + |- \rangle\langle +|)$$

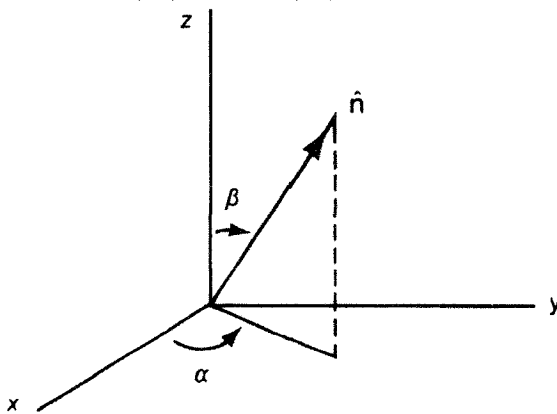
$$S_z = \frac{\hbar}{2} (|+\rangle\langle +| - |- \rangle\langle -|)$$

۹- عبارت $|\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}; +\rangle$ را به طوری که

$$\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}} |\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}; +\rangle = \left(\frac{\hbar}{2}\right) |\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}; +\rangle$$

تشکیل دهید. در آن با زوایای نشان داده شده در شکل مشخص می‌شود. جواب خود را با یک ترکیب خطی از $|+\rangle$ و $|-\rangle$ نشان دهید. (توجه: جواب برابر است با

$$\cos\left(\frac{\beta}{2}\right) |+\rangle + \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) e^{i\alpha} |-\rangle$$



اما تنها به اینکه این جواب در معادله‌ی ویژه مقدراری بالا صدق می‌کند، بسنده نکنید. همچنین از عملگرهای دوران، که بعداً در این کتاب معرفی می‌شوند، استفاده نکنید.

۱۰- عملگر هامیلتونی برای یک سیستم دو حالته (دو ترازه) با عبارت

$$H = a(|1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2| + |1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|)$$

نشان داده می‌شود، که a عددی با بُعد انرژی است. ویژه مقادیر انرژی و ویژه کت‌های متناظر انرژی را (به صورت یک ترکیب خطی از $|1\rangle$ و $|2\rangle$) بیابید.

۱۱- یک سیستم دو حالته (دو ترازه) با هامیلتونی

$$H = H_{11}|1\rangle\langle 1| + H_{22}|2\rangle\langle 2| + H_{12}[|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|]$$

نشان داده می‌شود که H_{11} و H_{22} و H_{12} اعداد حقیقی با بُعد انرژی هستند و $|1\rangle$ و $|2\rangle$ ویژه کت‌های یک عملگر یکسان به جز H هستند. ویژه مقادیر و ویژه کت‌های متناظر انرژی را بیابید. از اینکه جواب شما برای

$H_{12} = 0$ به درستی رفتار می کند، اطمینان حاصل کنید. (شما برای حل این مسأله به چکنویس نیاز ندارید) بدون اثبات از این واقعیت استفاده کنید که:

$$(\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}) |\hat{\mathbf{n}}; +\rangle = \frac{\hbar}{2} |\hat{\mathbf{n}}; +\rangle$$

که $|\hat{\mathbf{n}}; +\rangle$ با عبارت

$$|\hat{\mathbf{n}}; +\rangle = \cos \frac{\beta}{2} |+\rangle + e^{i\alpha} \sin \frac{\beta}{2} |-\rangle$$

داده می شود. در این عبارت β و α به ترتیب زوایای قطبی و سمتی هستند که $\hat{\mathbf{n}}$ را مشخص می کنند.

۱۲- یک سیستم با اسپین $\frac{1}{2}$ ، در یک ویژه حالت $\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}$ با ویژه مقدار $\hbar/2$ مشخص می شود که $\hat{\mathbf{n}}$ در آن بردار واحدی در صفحه xz است و با مثبت محور z زاویه γ می سازد.

الف) فرض کنید S_x را اندازه گیری می کنیم. احتمال به دست آوردن $\hbar/2$ چقدر است؟

ب) پاشندگی S_x را محاسبه کنید، یعنی:

$$\langle (S_x - \langle S_x \rangle)^2 \rangle$$

را به دست آورید. (برای اطمینان خاطر جواب خود را برای حالت های خاص π و $\pi/2$ و $\gamma = 0$

امتحان کنید.)

۱۳- یک پرتو از اتم های اسپین $\frac{1}{2}$ از یک سری دستگاه های اشترن گریلاخ به صورت زیر می گذرد:

الف) نخستین اندازه گیری اتم های $s_z = \hbar/2$ را عبور می دهد و اتم های $s_z = -\hbar/2$ را بازمی گرداند.

ب) دومین اندازه گیری اتم های $s_n = \hbar/2$ را عبور داده و اتم های $s_n = -\hbar/2$ را بازمی گرداند که در آن، s_n ویژه مقدار عملگر $\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}$ است که خود $\hat{\mathbf{n}}$ در صفحه xz نسبت به محور z زاویه β می سازد.

ج) سومین اندازه گیری اتم های $s_z = -\hbar/2$ را گذر داده و اتم های $s_z = \hbar/2$ را برمی گرداند. شدت پرتوی نهایی $s_z = -\hbar/2$ در حالتی که $s_z = \hbar/2$ که از دستگاه اول خارج شد به یک بهنجار شده باشد، چقدر است؟ اگر بخواهیم پرتوی نهایی $s_z = -\hbar/2$ را بیشینه کنیم باید جهت گیری دستگاه دوم را در چه سمتی قرار دهیم؟

۱۴- یک مشاهده پذیر معلوم در مکانیک کوانتومی نمایش ماتریسی 3×3 به صورت زیر دارد:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

الف) ویژه بردارهای بهنجار و ویژه مقادیر متناظر این مشاهده پذیر را بیابید. آیا هیچ گونه تبهگنی ای وجود دارد؟

ب) مثال فیزیکی برای این مشاهده پذیر بیان کنید.

۱۵- A و B را به عنوان دو مشاهده پذیر در نظر بگیرید. فرض کنید ویژه کت همزمان A و B $\{|a', b'\rangle\}$ یک مجموعه‌ی متعامد از کت‌های پایه را تشکیل می‌دهد. آیا می‌توان همواره نتیجه گرفت که

$$[A, B] = 0?$$

اگر جواب شما بله است، ادعای خود را ثابت کنید. اگر جواب نه است، یک نقض بیاورید.

۱۶- دو عملگر هرمیتی پاد جابه‌جا گردند:

$$\{A, B\} = AB + BA = 0$$

آیا ممکن است که این دو یک ویژه کت همزمان (یعنی، مشترک) داشته باشند؟ ادعای خود را یا اثبات کنید و یا نشان دهید.

۱۷- دو مشاهده پذیر A_1 و A_2 ، که به طور صریح به زمان وابسته نیستند، جابه‌جا نمی‌شوند:

$$[A_1, A_2] \neq 0$$

از طرف دیگر می‌دانیم که A_1 و A_2 با هامیلتونی جابه‌جا می‌شوند:

$$[A_1, H] = 0, \quad [A_2, H] = 0$$

اثبات کنید که در حالت کلی، ویژه حالت‌های انرژی تبهگن هستند. آیا انتظار این را داشتید؟ به عنوان یک مثال مسأله‌ی نیروی مرکزی $H = \mathbf{p}^2/2m + V(r)$ با $A_1 \rightarrow L_z$ ، $A_2 \rightarrow L_x$ را در نظر بگیرید.

۱۸- الف) ساده‌ترین راه برای استخراج نامساوی شوارتز به ترتیب زیر است. اول داریم:

$$(\langle \alpha | + \lambda^* \langle \beta |) \cdot (|\alpha\rangle + \lambda |\beta\rangle) \geq 0$$

برای هر عدد مختلط λ این رابطه برقرار است. حال λ طوری انتخاب کنید که نامساوی بالا به نامساوی شوارتز منتج شود.

ب) نشان دهید که علامت تساوی در رابطه‌ی عمومی عدم قطعیت وقتی برقرار است که حالت مورد سؤال در رابطه‌ی

$$\Delta A |\alpha\rangle = \lambda \Delta B |\alpha\rangle$$

صدق کند، که در آن λ موهومی صرف است.

ج) با استفاده از قوانین مکانیک موجی که منجر به تابع موج برای یک بسته موج گاوسی داده شده با عبارت

$$\langle x' | \alpha \rangle = (2\pi d^2)^{-1/4} \exp \left[\frac{i \langle p \rangle x'}{\hbar} - \frac{(x' - \langle x \rangle)^2}{4d^2} \right]$$

می‌شود. صریحاً محاسبه کنید که این تابع در حداقل رابطه‌ی عدم قطعیت

$$\sqrt{\langle (\Delta x)^2 \rangle} \sqrt{\langle (\Delta p)^2 \rangle} = \frac{\hbar}{2}$$

صدق می‌کند. ثابت کنید که الزام

$$\langle x' | \Delta x | \alpha \rangle = (\text{عدد موهومی}) \langle x' | \Delta x | \alpha \rangle$$

برای یک بسته موج گاوسی همان‌طور که از قسمت دایر می‌آید، برقرار است.

۱۹- الف) محاسبه کنید:

$$\langle (\Delta S_x)^2 \rangle \equiv \langle S_x^2 \rangle - \langle S_x \rangle^2$$

که این مقدار انتظاری برای حالت $S_z +$ مدنظر است. با استفاده از نتایج خود، رابطه‌ی کلی عدم

قطعیت را بیازمایید

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} | \langle [A, B] \rangle |^2$$

که در آن $A \rightarrow S_x$ و $B \rightarrow S_y$ است.

ب) رابطه‌ی عدم قطعیت را به‌ازای $A \rightarrow S_x$ و $B \rightarrow S_y$ برای حالت $S_x +$ آزمایش کنید.

۲۰- یک ترکیب خطی از کت‌های $|+\rangle$ و $|-\rangle$ بیابید که ضرب عدم قطعیت

$$\langle (\Delta S_x)^2 \rangle \langle (\Delta S_y)^2 \rangle$$

پیشینه کند. به‌طور صریح نشان دهید که در ترکیب خطی‌ای که یافته‌اید، رابطه‌ی عدم قطعیت برای S_x و S_y

نقض نمی‌شود.

۲۱- ضرب عدم قطعیت $x - p$ ، $\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle$ را برای یک ذره یک بعدی که بین دو دیواره‌ی

سخت

$$V = \begin{cases} 0 & \text{برای } 0 < x < a \\ \infty & \text{بقیه‌ی جاها} \end{cases}$$

قرار گرفته است بیابید. این کار را برای هر دو حالت پایه و برانگیخته انجام دهید.

۲۲- تخمین غیردقیقی از مرتبه‌ی بزرگی مدت زمانی که یک قطعه یخ روی نقطه اتکایش در حال تعادل

است ارائه دهید. فرض کنید که تنها قید وارد بر مسأله رابطه‌ی عدم قطعیت هایزنبرگ است. همچنین فرض

کنید که نقطه اتکای یخ و سطح زیر و سخت هستند. تخمینی که می‌زنید نباید تغییری در مرتبه‌ی بزرگی

مدت زمان ایجاد کند. اندازه و وزن تکه یخ را مقادیر معقولی در نظر بگیرید یک نتیجه‌ی عددی تقریبی

بدست آورید و آنرا برحسب ثانیه بیان کنید.

۲۳- یک فضای کت سه بعدی فرض کنید. اگر یک مجموعه از کت‌های متعامد- که آن‌ها را با $|1\rangle$ و $|2\rangle$ و $|3\rangle$ نشان می‌دهیم- به‌عنوان کت‌های پایه استفاده شوند و عملگرهای A و B به‌صورت زیر باشند:

$$A \doteq \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & -a & 0 \\ 0 & 0 & -a \end{pmatrix}, \quad B \doteq \begin{pmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -ib \\ 0 & ib & 0 \end{pmatrix}$$

که a و b هر دو حقیقی‌اند.

(الف) پیدا است که A طیفی تبه‌گن دارد. آیا B نیز طیفی تبه‌گن دارد؟

(ب) نشان دهید که A و B جابه‌جا پذیرند.

(ج) یک مجموعه‌ی جدید از کت‌های متعامد بیابید که ویژه‌کت‌های هم‌زمان A و B باشند. ویژه‌مقادیر A و B را برای هر کدام از سه ویژه‌کت مشخص کنید. آیا ویژه‌مقادیری که مشخص کرده‌اید به‌طور کامل هر کدام از ویژه‌کت‌ها را مشخص می‌کنند؟

۲۴- الف) ثابت کنید $(1 + i\sigma_x)(1/\sqrt{2})$ با عمل روی یک اسپینور دو مؤلفه‌ای، در نمایش ماتریسی، می‌تواند به‌عنوان عملگر چرخش حول محور X به‌اندازه‌ی $\pi/2$ ظاهر شود. (علامت منفی نشان‌دهنده‌ی این است که چرخش ساعت‌گرد است).

(ب) وقتی که ویژه‌کت‌های S_x به‌عنوان کت‌های پایه استفاده شوند، ماتریسی S_z را تشکیل دهید.

۲۵- وقتی که تمام اعداد آرایه‌های ماتریس $\langle b'|A|b''\rangle$ در برخی از پایه‌ها (مثلاً در اینجا در پایه‌ی $\{|b'\rangle\}$) حقیقی باشند در این صورت بعضی از نویسندگان عملگر A را حقیقی تعریف می‌کنند. آیا این مفهوم مستقل از نمایش است؟ یعنی آیا آرایه‌های ماتریس در پایه‌هایی غیر از $\{|b'\rangle\}$ هم حقیقی باقی می‌مانند؟ ادعای خود را برای عملگرهای آشنایی نظیر S_x و S_z (مسئله‌ی ۲۴ را ببینید) یا x و p_x بیازمایید.

۲۶- ماتریس تبدیلی که S_x را در پایه‌ای قطری به S_z اتصال می‌دهد بیابید. نشان دهید که نتیجه‌ی شما در توافق با رابطه‌ی کلی زیر است.

$$U = \sum_r |b^{(r)}\rangle \langle a^{(r)}|$$

۲۷- الف) فرض کنید که $f(A)$ تابعی از عملگر هرمیتی A با خصوصیت $A|a'\rangle = a'|a'\rangle$ است. وقتی که ماتریس تبدیل از پایه‌های a' به b' را می‌دانیم، مقدار $\langle b''|f(A)|b'\rangle$ را محاسبه کنید.

(ب) مشابه با نتایج قسمت (الف) برای مقادیر پیوسته، رابطه‌ی

$$\langle p''|F(r)|p'\rangle$$

را محاسبه کنید. جواب خود را تا آن‌جا که می‌توانید ساده کنید. توجه کنید که r برابر با

$$\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

است. که x و y و z عملگر هستند.

۲۸- الف) x و p_x را مکان و تکانه در یک بُعد در نظر بگیرید. گروهی پواسون کلاسیکی را محاسبه کنید.

$$[x, F(p_x)]_{\text{کلاسیکی}}$$

ب) این بار x و p_x را عملگرهای کوانتومی متناظر در نظر بگیرید. جابه‌جایی زیر را محاسبه کنید.

$$\left[x, \exp\left(\frac{ip_x a}{\hbar}\right) \right]$$

ج) با استفاده از نتایج به دست آمده در قسمت (ب)، ثابت کنید که:

$$[x_i, G(\mathbf{p})] = i\hbar \frac{\partial G}{\partial p_i}, \quad [p_i, F(\mathbf{x})] = -i\hbar \frac{\partial F}{\partial x_i}$$

یک ویژه حالت برای عملگر مکان x است. ویژه مقدار متناظر چیست؟

۲۹- الف) در صفحه‌ی ۲۴۷، کتاب گاتفرید (۱۹۶۶) شرح داده شده که برای تمام توابع F و G که بتوان

آن‌ها را به شکل سری توانی برحسب شناسه‌هایشان بسط داد، روابط

$$[x_i, G(\mathbf{p})] = i\hbar \frac{\partial G}{\partial p_i}, \quad [p_i, F(\mathbf{x})] = -i\hbar \frac{\partial F}{\partial x_i}$$

را می‌توان «به سادگی» از روابط بنیادین جابه‌جایی آن‌ها به دست آورد. این شرح را اثبات کنید.

ب) $[x^2, p^2]$ را محاسبه کنید. جواب خود را با گروهی کلاسیکی پواسون کلاسیکی $[x^2, p^2]$ مقایسه کنید.

۳۰- عملگر انتقال برای یک جابه‌جایی محدود فضایی از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\mathcal{T}(\mathbf{l}) = \exp\left(\frac{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{l}}{\hbar}\right)$$

که P عملگر تکانه است.

الف) جابه‌جایی زیر را محاسبه کنید.

$$[x_i, \mathcal{T}(\mathbf{l})]$$

ب) با استفاده از قسمت الف (یا موارد دیگر)، نشان دهید که چطور مقدار انتظاری $\langle \mathbf{x} \rangle$ تحت انتقال

تغییر می‌کند.

۳۱. در متن درس درباره‌ی تأثیر $\mathcal{T}(d\mathbf{x}')$ روی ویژه‌کت‌های تکانه، مکان و بطور کلی روی دیگر

ویژه‌کت‌های $\langle \alpha \rangle$ ، بحث کردیم. در این جا می‌خواهیم رفتار مقادیر انتظاری $\langle \mathbf{x} \rangle$ و $\langle \mathbf{p} \rangle$ را تحت انتقال

بی‌نهایت کوچک مورد بررسی قرار دهیم. با استفاده از (۱-۶-۲۵) و (۱-۶-۴۵) و $\langle \alpha | \mathcal{T}(d\mathbf{x}') | \alpha \rangle$ ،

اثبات کنید: $\langle \mathbf{p} \rangle \rightarrow \langle \mathbf{p} \rangle + d\mathbf{x}' \cdot \langle \mathbf{p} \rangle$ و $\langle \mathbf{x} \rangle \rightarrow \langle \mathbf{x} \rangle$ تحت یک انتقال بی‌نهایت کوچک رخ می‌دهد.

۳۲- الف) با استفاده از بسته موج گاوسی (۳۵-۷-۱)، مقادیر انتظاری p و p^2 را که در روابط (۳۹-۷-۱) الف) و (۳۹-۷-۱) ب) آمده‌اند، به دست آورید.

ب) با استفاده از تابع موج فضای تکانه مقادیر انتظاری p و p^2 را محاسبه کنید.

۳۳- الف) عبارت‌های زیر را اثبات کنید:

$$\langle p'|x|\alpha\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \langle p'|\alpha\rangle \quad \text{(الف)}$$

$$\langle \beta|x|\alpha\rangle = \int dp' \phi_{\beta}^*(p') i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \phi_{\alpha}(p') \quad \text{(ب)}$$

که $\phi_{\alpha}(p') = \langle p'|\alpha\rangle$ و $\phi_{\beta}(p') = \langle p'|\beta\rangle$ توابع موج در فضای تکانه‌اند.

ب) مفهوم فیزیکی عبارت

$$\exp\left(\frac{ix\Xi}{\hbar}\right)$$

چيست؟ که در آن x عملگر مکان و Ξ عددی با بُعد تکانه است. پاسخ خود را شرح دهید.

فصل دوم

دینامیک کوانتومی

تا این جا درباره‌ی اینکه سیستم‌های فیزیکی چطور با زمان تغییر می‌کنند، صحبت نکرده‌ایم. این فصل منحصراً به دینامیک کت‌های حالت و یا عملگرها اختصاص دارد. به عبارت دیگر، در اینجا به بیان معادلات مکانیک کوانتومی، شبیه معادلات حرکت نیوتون (یا لاگرانژ یا هامیلتونی) می‌پردازیم.

۱.۲ تحول زمانی و معادله‌ی شرودینگر

اولین نکته‌ی مهمی که باید به خاطر داشته باشیم این است که زمان در مکانیک کوانتومی تنها یک مؤلفه است و نه یک عملگر، به‌ویژه، در فصل پیش زمان به عنوان یک مشاهده‌پذیر قلمداد نشد. به همین خاطر اگر آن‌طور که درباره‌ی عملگر مکان به بحث پرداختیم، راجع به زمان صحبت کنیم، کاری بی‌معنی انجام داده‌ایم. در تحول تاریخی مکانیک کوانتومی، ال.دی. دوبروی و ای. شرودینگر با رهیافت از طریق نوعی هموردایی، بین انرژی و زمان با تکانه و مکان، به تجانس غیرقابل انتظاری دست یافتند. هنوز وقتی که به دورنمای مکانیک کوانتومی می‌نگریم، ردی از تقارن بین زمان و مکان را نمی‌بینیم. نظریه‌ی نسبیتی میدان‌های کوانتومی با زمان و مختصات فضایی به یک شکل برخورد می‌کند. اما این کار به این بها انجام می‌شود که مکان از جایگاه عملگری خود، به یک مؤلفه تنزل می‌یابد.

عملگر تحول زمانی

مسئله‌ی پایه‌ای ما در این فصل این است که چطور یک کت حالت با زمان تغییر می‌کند؟ فرض کنید یک سیستم فیزیکی داریم که کت حالت آن در t_0 با $|\alpha\rangle$ معرفی می‌شود. در حالت کلی در زمان بعدی انتظار نداریم که سیستم در حالت $|\alpha\rangle$ باقی مانده باشد. بگذارید کت متناظر با حالت را در زمان بعدی با

$$|\alpha, t_0; t\rangle, \quad (t > t_0) \quad (1-1-2)$$

نشان دهیم. که در آن α و t_0 را نوشته‌ایم تا خاطر نشان کنیم که سیستم پیش از این، در زمان t_0 ، در حالت $|\alpha\rangle$ بوده است. از آن جا که زمان متغیری پیوسته است انتظار داریم که:

$$\lim_{t \rightarrow t_0} |\alpha, t_0; t\rangle = |\alpha\rangle \quad (2-1-2)$$

و می‌توانیم به خوبی از نماد گذاری مختصر

$$|\alpha, t_0; t_0\rangle = |\alpha, t_0\rangle \quad (۳-۱-۲)$$

استفاده کنیم. کار اصلی ما بررسی تحول زمانی یک کت حالت است:

$$|\alpha, t_0\rangle = |\alpha\rangle \xrightarrow{\text{تحول زمانی}} |\alpha, t_0; t\rangle \quad (۴-۱-۲)$$

از طرف دیگر، علاقه‌مندیم بررسی کنیم که تحت تحول زمانی $t \rightarrow t_0$ ، کت حالت چگونه دگرگون می‌شود. همانند بحث انتقال، دو کت با یک عملگر که به آن عملگر تحول زمانی $\mathcal{U}(t, t_0)$ می‌گوییم به هم مرتبط‌اند.

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \mathcal{U}(t, t_0)|\alpha, t_0\rangle \quad (۵-۱-۲)$$

عملگر تحول زمانی معرفی شده، چه خصوصیتی باید داشته باشد؟ نخستین خصوصیت مهم یکانی بودن آن است که ناشی از پایستگی احتمال است. فرض کنید که در زمان t_0 ، کت حالت بر حسب ویژه کت‌های عملگر A بسط داده شود:

$$|\alpha, t_0\rangle = \sum_{a'} c_{a'}(t_0)|a'\rangle \quad (۶-۱-۲)$$

به همین صورت، در زمان بعد داریم:

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \sum_{a'} c_{a'}(t)|a'\rangle \quad (۷-۱-۲)$$

در حالت کلی انتظار نداریم که اندازه‌ی هر کدام از ضرایب بسط ثابت بماند*

$$|c_{a'}(t)| \neq |c_{a'}(t_0)| \quad (۸-۱-۲)$$

به‌عنوان مثال، یک سیستم اسپین $\frac{1}{2}$ را در نظر بگیرید به طوری که تکانه‌ی اسپین مغناطیسی آن تحت تأثیر یک میدان مغناطیسی یکنواخت در جهت z قرار بگیرد. فرض کنید که در زمان t_0 اسپین در جهت مثبت x است. یعنی سیستم در یک ویژه حالت S_x با ویژه مقدار $\hbar/2$ است. همان‌طور که بعداً در این بخش نشان خواهیم داد، با گذر زمان، اسپین در صفحه‌ی xy ، حرکت می‌کند. این بدان معنی است که احتمال مشاهده کردن $S_x +$ در زمان $t > t_0$ دیگر برابر یک نیست. به این ترتیب، یک احتمال برای $S_x -$ وجود دارد اما در تمام زمان‌ها جمع احتمالات برای $S_x +$ و $S_x -$ واحد باقی می‌ماند. در نماد گذاری

(۶-۱-۲) و (۷-۱-۲) داریم:

$$\sum_{a'} |c_{a'}(t_0)|^2 = \sum_{a'} |c_{a'}(t)|^2 \quad (۹-۱-۲)$$

* بعداً نشان می‌دهیم که اگر هامیلتونی با A جابه‌جا شود، آنگاه $|c_{a'}(t)|$ مساوی با $|c_{a'}(t_0)|$ خواهد بود.

این رابطه برای تک تک ضرایب بسط (۲-۱-۸) برقرار است. به عبارت دیگر، اگر کت حالت در ابتدا به یک بهنجار شده باشد، در همهی زمان‌های بعدی بهنجار به یک، باقی خواهد ماند:

$$\langle \alpha, t_0 | \alpha, t_0 \rangle = 1 \Rightarrow \langle \alpha, t_0; t | \alpha, t_0; t \rangle = 1 \quad (10-1-2)$$

این خصوصیت مانند مورد انتقال، تنها وقتی تضمین می‌شود که عملگر تحول زمانی، یکانی باشد. به همین دلیل یکانی بودن:

$$\mathcal{U}^\dagger(t, t_0) \mathcal{U}(t, t_0) = 1 \quad (11-1-2)$$

یکی از خاصیت‌های بنیادین عملگر \mathcal{U} است. به همین خاطر تصادفی نیست که بیشتر نویسندگان، یکانی بودن را به عنوان نقطه‌ی آغاز پایداری احتمال می‌دانند.

مشخصه‌ی دیگری که ما از عملگر \mathcal{U} انتظار داریم، خاصیت ترکیب است:

$$\mathcal{U}(t_2, t_0) = \mathcal{U}(t_2, t_1) \mathcal{U}(t_1, t_0), \quad (t_2 > t_1 > t_0) \quad (12-1-2)$$

این معادله بیان می‌کند که اگر بخواهیم تحول زمانی از t_0 تا t_2 را پیدا کنیم، همانند آن است که ابتدا تحول زمانی متناظر از t_0 تا t_1 و سپس از t_1 تا t_2 را به دست آوریم. توجه کنید که معادله‌ی (۲-۱-۱۲) را از راست به چپ می‌خوانیم!

همچنین فرض عملگر تحول زمانی بی‌نهایت کوچک $\mathcal{U}(t_0 + dt, t_0)$ می‌تواند سودمند باشد:

$$|\alpha, t_0; t_0 + dt\rangle = \mathcal{U}(t_0 + dt, t_0) |\alpha, t_0\rangle \quad (13-1-2)$$

بنابه پیوستگی [(۲-۱-۲) را ببینید]، زمانی که dt به سمت صفر میل می‌کند، می‌باید عملگر تحول زمانی برابر با واحد گردد:

$$\lim_{dt \rightarrow 0} \mathcal{U}(t_0 + dt, t_0) = 1 \quad (14-1-2)$$

و همانند مورد انتقال، انتظار داریم که اختلاف بین $\mathcal{U}(t_0 + dt, t_0)$ و 1 از مرتبه‌ی اول dt باشد.

ادعا می‌کنیم که آنچه نیاز داریم با عبارت زیر برآورد می‌شود:

$$\mathcal{U}(t_0 + dt, t_0) = 1 - i\Omega dt \quad (15-1-2)$$

که Ω یک عملگر هرمیتی است.*

$$\Omega^\dagger = \Omega \quad (16-1-2)$$

* اگر عملگر Ω وابستگی صریح به زمان داشته باشد، می‌بایست در زمان t_0 محاسبه شود.

رابطه‌ی (۱۵-۱-۲) خاصیت ترکیب عملگر جابه‌جایی بی‌نهایت کوچک زمانی را برآورد می‌کند.

$$\mathcal{U}(t_0 + dt_1 + dt_2, t_0) = \mathcal{U}(t_0 + dt_1 + dt_2, t_0 + dt_1) \mathcal{U}(t_0 + dt_1, t_0) \quad (17-1-2)$$

با در نظر گرفتن جملات تا مرتبه‌ی dt ، خاصیت یکانی بودن محقق می‌شود.

$$\mathcal{U}^\dagger(t_0 + dt, t_0) \mathcal{U}(t_0 + dt, t_0) = (1 + i\Omega^\dagger dt)(1 - i\Omega dt) \approx 1 \quad (18-1-2)$$

که در آن از جملات مرتبه $(dt)^2$ با مراتب بالاتر، صرف‌نظر شد.

عملگر Ω ، بُعد فرکانس یا همان معکوس زمان را دارد. آیا مشاهده‌پذیر آشنایی با بُعد فرکانس وجود دارد؟ یادآوری می‌کنیم که در نظریه‌ی قدیمی کوانتومی، رابطه‌ی پلانک-انیشتمین به‌عنوان یک اصل موضوعه، رابطه‌ای بین فرکانس زاویه‌ای ω و انرژی برقرار می‌کند.

$$E = \hbar\omega \quad (19-1-2)$$

بگذارید این ایده را از مکانیک کلاسیک فرض بگیریم که هامیلتونی سازنده‌ی تحول زمانی است (گلدشتاین ۱۹۸۰ و ۸-۴۰۷). پس طبیعی است که رابطه‌ی عملگری هامیلتونی H به‌قرار زیر باشد:

$$\Omega = \frac{H}{\hbar} \quad (20-1-2)$$

در مجموع عملگر تحول نهانی بی‌نهایت کوچک به‌شکل زیر نوشته می‌شود:

$$\mathcal{U}(t_0 + dt, t_0) = 1 - \frac{iHdt}{\hbar} \quad (21-1-2)$$

که H عملگر هامیلتونی، هرمیتی فرض می‌شود. خواننده ممکن است پرسد، \hbar ی که در این جا معرفی شد با \hbar ی که در عملگر انتقال (۱-۶-۳۲) ظاهر شد چه ارتباطی دارد. این سؤال را می‌توان با مقایسه‌ی معادله‌ی کوانتوم مکانیکی حرکت (که بعداً استخراج می‌کنیم) و معادله‌ی کلاسیکی حرکت، پاسخ دهیم. خواهیم دید که اگر هر دو \hbar یکسان نباشند، نمی‌توانیم به معادله‌ی زیر برسیم:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p}{m} \quad (22-1-2)$$

این رابطه حد کلاسیکی متناظر با رابطه‌ی کوانتوم مکانیکی است.

معادله‌ی شرودینگر

اکنون در موقعیتی هستیم که می‌توانیم یک معادله‌ی دیفرانسیل بنیادین برای عملگر تحول زمانی $\mathcal{U}(t, t_0)$ بنویسیم. خاصیت ترکیب عملگر تحول زمانی را با جایگذاری $t_1 \rightarrow t$ و $t_2 \rightarrow t + dt$ در (۲-۱۲) به کار می‌بریم:

$$\mathcal{U}(t + dt, t_0) = \mathcal{U}(t + dt, t) \mathcal{U}(t, t_0) = \left(1 - \frac{iH dt}{\hbar}\right) \mathcal{U}(t, t_0) \quad (۲۳-۱-۲)$$

که در آن احتیاجی به بی‌نهایت کوچک بودن اختلاف $t - t_0$ نیست. داریم:

$$\mathcal{U}(t + dt, t_0) - \mathcal{U}(t, t_0) = -i \left(\frac{H}{\hbar}\right) dt \mathcal{U}(t, t_0) \quad (۲۴-۱-۲)$$

که می‌توان آن را به شکل معادله دیفرانسیلی نوشت:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) = H \mathcal{U}(t, t_0) \quad (۲۵-۱-۲)$$

این معادله‌ی شرودینگر برای عملگر تحول زمانی است. هر اتفاقی که از تحول زمانی ناشی می‌شود، از این معادله پیروی می‌کند.

معادله‌ی (۲-۱۲) بلافاصله به معادله‌ی شرودینگر، برای کت حالت منجر می‌شود. با ضرب دو طرف (۲-۱۲) از سمت راست در $|\alpha, t_0\rangle$ داریم:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle = H \mathcal{U}(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle \quad (۲۶-۱-۲)$$

اما $|\alpha, t_0\rangle$ به t وابسته نیست. بنابراین داریم:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0; t\rangle = H |\alpha, t_0; t\rangle \quad (۲۷-۱-۲)$$

که در آن از رابطه‌ی (۲-۱۵) استفاده شد.

اگر ما $\mathcal{U}(t, t_0)$ را داشته باشیم و بعلاوه بدانیم که $\mathcal{U}(t, t_0)$ چطور روی کت ابتدایی $|\alpha, t_0\rangle$ عمل می‌کند، لازم نیست که نگران حل معادله‌ی شرودینگر برای کت حالت (۲-۱۲) باشیم. ما تنها می‌باید $\mathcal{U}(t, t_0)$ را بر $|\alpha, t_0\rangle$ اثر دهیم. با این کار می‌توانیم کت حالت را در هر زمان t به دست آوریم. پس اولین کار ما به دست آوردن راه حل اساسی معادله‌ی شرودینگر، برای عملگر تحول زمانی (۲-۱۲) است. سه حالت وجود دارد که می‌باید هر کدام را جداگانه مد نظر قرار دارد:

حالت ۱: عملگر هامیلتونی مستقل از زمان است. به همین خاطر حتی وقتی که t در حال تغییر است عملگر H بدون تغییر باقی می ماند. هامیلتونی یک تکانه‌ی مغناطیسی اسپین که با یک میدان مغناطیسی مستقل از زمان بر هم کنش دارد نمونه‌ای از این حالت است. پاسخ (۲-۱-۲۵) در چنین حالتی به صورت زیر است:

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \exp\left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right] \quad (28-1-2)$$

برای اثبات این عبارت بگذارید تا تابع نمایی را به صورت زیر بسط دهیم:

$$\exp\left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right] = 1 - \frac{iH(t-t_0)}{\hbar} + \left[\frac{(-i)^2}{2}\right] \left[\frac{H(t-t_0)}{\hbar}\right]^2 + \dots \quad (29-1-2)$$

مشتق گیری نسبت به زمان از این عبارت، نتیجه می دهد:

$$\frac{\partial}{\partial t} \exp\left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right] = \frac{-iH}{\hbar} + \left[\frac{(-i)^2}{2}\right] 2\left(\frac{H}{\hbar}\right)^2 (t-t_0) + \dots \quad (30-1-2)$$

واضح است که عبارت (۲۸-۱-۲) در معادله دیفرانسیل (۲۵-۱-۲) صدق می کند. همچنین شرایط مرزی نیز برقرار است. چون در $t \rightarrow t_0$ رابطه‌ی (۲۸-۱-۲) برابر با عملگر واحد است. راه دیگر برای به دست آوردن (۲۸-۱-۲)، ترکیب عملگرهای تحول زمانی بی نهایت کوچک، درست نظیر روشی که برای به دست آوردن (۱-۶-۳۶) به کار بردیم، است:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left[1 - \frac{(iH/\hbar)(t-t_0)}{N}\right]^N = \exp\left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right] \quad (31-1-2)$$

حالت ۲: عملگر هامیلتونی H وابسته به زمان است اما H ها در زمان‌های مختلف با هم جابه‌جا می شوند. به عنوان یک مثال، بگذارید تکانه‌ی مغناطیسی اسپین، تحت تأثیر میدان مغناطیسی قرار بگیرد که شدت آن با زمان تغییر کند، اما جهت آن همواره ثابت باشد. پاسخ (۲-۱-۲۵) در این حالت به شکل زیر است:

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \exp\left[-\left(\frac{i}{\hbar}\right) \int_{t_0}^t dt' H(t')\right] \quad (32-1-2)$$

به روش یکسانی این رابطه نیز اثبات می شود. برای سادگی $H(t-t_0)$ در (۲۹-۱-۲) و (۳۰-۱-۲) با $\int_{t_0}^t dt' H(t')$ تعویض شده‌اند.

حالت ۳: H ها در زمان‌های، مختلف با هم جابه‌جا نشوند. به‌عنوان مثال، همان تکانه‌ی مغناطیسی اسپین مفروض را در نظر بگیرید که این بار جهت میدان مغناطیسی برهمکنش کننده با آن، با زمان تغییر می‌کند. به‌طوری که: در زمان $t = t_1$ در راستای x است و در $t = t_2$ در راستای y و به‌همین صورت به تغییر ادامه می‌دهد. از آن‌جا که S_x و S_y جابه‌جا نمی‌شوند، $H(t_1)$ و $H(t_2)$ که حاصل $\mathbf{S} \cdot \mathbf{B}$ هستند نیز با هم جابه‌جا نمی‌شوند. پاسخ در این حالت با عبارت زیر داده می‌شود:

$$\mathcal{U}(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^{t_1} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1) H(t_2) \cdots H(t_n) \quad (۳۳-۱-۲)$$

بعد از آنکه اف-جی-دایسون در نظریه‌ی میدان کوانتومی بسطی به این شکل ارائه داد، گاهی به این عبارت **سری دایسون** می‌گویند. در اینجا به اثبات (۳۳-۱-۲) نمی‌پردازیم چون اثبات این عبارت، بسیار شبیه به آن چیزی است که در فصل ۵ برای عملگر تحول زمانی در تصویر برهم‌کنش ارائه می‌دهیم. در کاربردهای ابتدایی، تنها حالت ۱ مورد توجه قرار می‌گیرد. در ادامه‌ی قسمت‌های این فصل فرض می‌کنیم که عملگر H مستقل از زمان است. در فصل ۵ به هامیلتونی‌های وابسته به زمان می‌رسیم.

ویژه‌کتهای انرژی

برای آنکه بتوانیم عملگر تحول زمانی (۲۸-۱-۲) را بر کت کلی ابتدایی $|\alpha\rangle$ اثر دهیم. ابتدا باید بدانیم که این عملگر چطور بر روی کتهای پایه به کار رفته در بسط $|\alpha\rangle$ اثر می‌کند. در حالت خاص، اگر کتهای پایه‌ی به کار رفته ویژه‌کت‌های A باشند، یعنی:

$$[A, H] = 0 \quad (۳۴-۱-۲)$$

محاسبات خیلی سراسر خواهد شد. در این حالت ویژه‌کت‌های A که ویژه‌کت H هم هستند ویژه‌کت‌های انرژی نام دارند که ویژه‌مقادیر آن‌ها را با $E_{a'}$ نشان می‌دهیم.

$$H|a'\rangle = E_{a'}|a'\rangle \quad (۳۵-۱-۲)$$

اکنون می‌توانیم عملگر تحول زمانی را بر حسب $|a'\rangle \langle a'|$ بسط دهیم. برای سادگی t_0 را برابر با صفر انتخاب می‌کنیم. داریم:

$$\begin{aligned}\exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right) &= \sum_{a'} \sum_{a''} |a''\rangle \langle a''| \exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right) |a'\rangle \langle a'| \\ &= \sum_{a'} |a'\rangle \exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right) \langle a'| \end{aligned} \quad (۳۶-۱-۲)$$

با نوشتن عملگر تحول زمانی به این شکل، قادریم که هر مسأله با هر مقدار اولیه‌ای که بسط کت اولیه‌ی آن $\{|a'\rangle\}$ مشخص باشد را حل کنیم. به‌عنوان یک مثال، فرض کنید که کت اولیه دارای بسط زیر باشد:

$$|\alpha, t_0 = 0\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle \quad (۳۷-۱-۲)$$

بنابراین داریم:

$$|\alpha, t_0 = 0; t\rangle = \exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right) |\alpha, t_0 = 0\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|\alpha\rangle \exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right) \quad (۳۸-۱-۲)$$

به‌عبارت دیگر، ضرایب بسط به‌شکل زیر با زمان تغییر می‌کنند.

$$c_{a'}(t=0) \rightarrow c_{a'}(t) = c_{a'}(t=0) \exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right) \quad (۳۹-۱-۲)$$

که اندازه‌ی آن بدون تغییر می‌ماند. توجه کنید که فازهای نسبی مختصه‌های مختلف با زمان تغییر می‌کنند، چون فرکانس‌های نوسانی مختلف‌اند.

یک مورد استثنایی این است که حالت ابتدایی در یکی از حالت‌های $\{|a'\rangle\}$ رخ دهد. در ابتدا داریم:

$$|\alpha, t_0 = 0\rangle = |a'\rangle \quad (۴۰-۱-۲)$$

و در زمان بعدی داریم:

$$|\alpha, t_0 = 0; t\rangle = |a'\rangle \exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right) \quad (۴۱-۱-۲)$$

بنابراین اگر سیستم در ابتدا یک ویژه حالت همزمان A و H باشد، زمان‌های بعدی نیز باقی خواهد ماند. حداکثر چیزی که ممکن است رخ دهد تغییر فاز، به‌اندازه‌ی $\exp(-iE_{a'}t/\hbar)$ است. به‌همین خاطر اگر یک مشاهده‌پذیر با H جابه‌جاپذیر باشد ((۳۴-۱-۲) را ببینید)، ثابت حرکت است.

از بحث گذشته نتیجه می‌شود که اصلی‌ترین کار ما در مکانیک کوانتومی تلاش برای یافتن مشاهده‌پذیری است که با H جابه‌جا می‌شود و سپس محاسبه‌ی ویژه مقادیر آن است. وقتی که این کار

انجام شد، کت ابتدایی را برحسب ویژه کت‌های آن مشاهده‌پذیر بسط می‌دهیم و عملگر تحول زمانی را روی آن اعمال می‌کنیم. این کار آخر، ممکن است مطابق (۲-۱-۳۹)، یک تغییر فاز به هریک از ضرایب بسط وارد کند.

هرچند ما حالتی را مد نظر قرار دادیم که تنها یک مشاهده‌پذیر A با H جا به جا می‌شود. اما می‌توانیم به سادگی نتایج خود را به حالتی تعمیم دهیم که چندین مشاهده‌پذیر سازگار متقابل، با H جا به جا می‌شوند:

$$\begin{aligned} [A, B] &= [B, C] = [A, C] = \dots = 0 \\ [A, H] &= [B, H] = [C, H] = \dots = 0 \end{aligned} \quad (۴۲-۱-۲)$$

با استفاده از نمادگذاری بخش ۴-۱ [(۳۷-۴-۱)] داریم:

$$\exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right) = \sum_{K'} |K'\rangle \exp\left(\frac{-iE_{K'}t}{\hbar}\right) \langle K'| \quad (۴۳-۱-۲)$$

که در آن $E_{k'}$ با تعیین a' و b' و c' و ... به صورت واحد تعیین می‌شود. بنابراین پیدا کردن یک مجموعه‌ی کامل از مشاهده‌پذیرهایی که دو به دو با هم سازگارند و همچنین با H جا به جا می‌شوند، اهمیت بنیادینی دارد. وقتی که این مجموعه پیدا شد، کت اولیه را به عنوان برهم‌نهی ویژه‌ی کت‌های A و B و C و ... و H بیان می‌کنیم. آخرین مرحله تنها اعمال عملگر تحول زمانی (۲-۱-۴۳) است. با این روش می‌توان بیشتر مسائل عمومی با H مستقل از زمان را حل کرد.

وابستگی زمانی مقدار انتظاری

مطالعه‌ی اینکه چگونه مقدار انتظاری یک مشاهده‌پذیر به عنوان تابعی از زمان تغییر می‌کند، می‌تواند در این جا مؤثر باشد. فرض کنید که در $t = 0$ کت اولیه یکی از ویژه حالت‌های عملگر A است که با H جا به جا می‌شود. همان طور که در (۲-۱-۴۰) می‌بینیم، اکنون به مقدار انتظاری مشاهده‌پذیر B که نیازی به جا به جا شدن آن با A و یا H نیست، توجه می‌کنیم. از آن جا که برای کت حالت در زمان‌های بعدی داریم:

$$|a', t_0 = 0; t\rangle = \mathcal{U}(t, 0)|a'\rangle \quad (۴۴-۱-۲)$$

$\langle B \rangle$ از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} \langle B \rangle &= (\langle a' | \mathcal{U}^\dagger(t, 0) \cdot B \cdot \mathcal{U}(t, 0) | a' \rangle) \\ &= \langle a' | \exp\left(\frac{iE_a t}{\hbar}\right) B \exp\left(\frac{-iE_a t}{\hbar}\right) | a' \rangle \\ &= \langle a' | B | a' \rangle \end{aligned} \quad (۴۵-۱-۲)$$

که مستقل از t است. بنابراین مقدار انتظاری مشاهده‌پذیر برحسب ویژه حالت‌های انرژی مستقل از زمان است. به همین خاطر ویژه حالت‌های انرژی را به‌عنوان حالت‌های پایا در نظر می‌گیریم.

وقتی که مقدار انتظاری برحسب یک برهم‌نهی از ویژه حالت‌های انرژی بیان شود، این وضعیت جذاب‌تر می‌شود. این حالت غیر پایا است. فرض می‌کنیم که در ابتدا داریم:

$$|\alpha, t_0 = 0\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle \quad (۴۶-۱-۲)$$

به راحتی مقدار انتظاری B را محاسبه می‌کنیم:

$$\begin{aligned} \langle B \rangle &= \left[\sum_{a'} c_{a'}^* \langle a' | \exp\left(\frac{iE_{a'}t}{\hbar}\right) \right] \cdot B \cdot \left[\sum_{a''} c_{a''} \exp\left(\frac{-iE_{a''}t}{\hbar}\right) |a''\rangle \right] \\ &= \sum_{a'} \sum_{a''} c_{a'}^* c_{a''} \langle a' | B |a''\rangle \exp\left[\frac{-i(E_{a''} - E_{a'})t}{\hbar}\right] \end{aligned} \quad (۴۷-۱-۲)$$

همان‌طور که ملاحظه می‌کنید این بار مقدار انتظاری شامل جملات نوسانی است که فرکانس زاویه‌ای آن‌ها با توجه به شرط فرکانس $\omega_{a''a'}$ - بوهر تعیین می‌شود.

$$\omega_{a''a'} = \frac{(E_{a''} - E_{a'})}{\hbar} \quad (۴۸-۱-۲)$$

حرکت تقدیمی اسپین

شرح یک مثال در این جا مفید است. یک مثال خیلی ساده را در نظر می‌گیریم که در آن فرمول‌بندی کلی‌ای که تا به حال بیان کرده‌ایم روشن‌تر می‌شود.

کار را با هامیلتوی یک سیستم اسپین $\frac{1}{2}$ با تکانه‌ی مغناطیسی $e\hbar/2m_e c$ که با میدان مغناطیسی خارجی B برهم‌کنش دارد، شروع می‌کنیم:

$$H = - \left(\frac{e}{m_e c} \right) \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} \quad (۴۹-۱-۲)$$

(برای الکترون $e < 0$). B را میدان مغناطیسی ثابت و یکنواختی در راستای Z در نظر می‌گیریم. بنابراین می‌توانیم H را به‌صورت زیر بنویسیم:

$$H = - \left(\frac{eB}{m_e c} \right) S_z \quad (۵۰-۱-۲)$$

از آن جا که S_z و H تنها با یک ضرب ثابت به هم وابسته اند، با یکدیگر جابه جا می شوند. ویژه حالت های S_z ، ویژه حالت های هامیلتونی نیز هستند و ویژه مقادیر انرژی وابسته به شکل زیرند:

$$E_{\pm} = \mp \frac{e\hbar B}{2m_e c}, \text{ برای } S_z \pm \quad (51-1-2)$$

بنا به قرارداد ω را طوری تعریف می کنیم که اختلاف بین دو ویژه مقدار انرژی برابر $\hbar\omega$ باشد:

$$\omega \equiv \frac{|e|B}{m_e c} \quad (52-1-2)$$

می توانیم عملگر H را به شکل ساده شده ی زیر بنویسیم:

$$H = \omega S_z \quad (53-1-2)$$

همه ی اطلاعات برای تحول زمان در عملگر تحول زمانی قرار دارد:

$$\mathcal{U}(t, 0) = \exp\left(\frac{-i\omega S_z t}{\hbar}\right) \quad (54-1-2)$$

این عملگر را روی حالت اولیه اثر می دهیم. کت های پایه ای که برای بسط کت اولیه ی به کار می بریم، ویژه کت های S_z ، $|+\rangle$ و $|-\rangle$ هستند که ویژه کت های انرژی نیز می باشند. فرض کنید در زمان $t = 0$ سیستم با رابطه ی زیر مشخص شود:

$$|\alpha\rangle = c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle \quad (55-1-2)$$

با اعمال (54-1-2) به این سیستم، می بینیم که سیستم در زمان بعدی به شکل زیر درمی آید:

$$|\alpha, t_0 = 0; t\rangle = c_+ \exp\left(\frac{-i\omega t}{2}\right) |+\rangle + c_- \exp\left(\frac{+i\omega t}{2}\right) |-\rangle \quad (56-1-2)$$

که در آن از رابطه ی زیر استفاده شده است:

$$H|\pm\rangle = \left(\frac{\pm \hbar\omega}{2}\right)|\pm\rangle \quad (57-1-2)$$

اکنون بگذارید، حالت را محدودتر کنیم و تنها حالتی را در نظر بگیریم که کت ابتدایی معرف اسپین رو به بالا است. در این حالت داریم:

$$c_+ = 1, \quad c_- = 0 \quad (58-1-2)$$

رابطه ی (56-1-2) بیان می کند که در زمان بعدی حالت رو به بالای اسپین حفظ می شود که این مسأله ی عجیبی نیست چون با یک حالت پایا سر و کار داریم.

سپس، اجازه دهید فرض کنیم که سیستم در ابتدا در حالت $S_x +$ است. با مقایسه‌ی (۱-۴-۱۷ الف) و (۲-۱-۵۵) می‌بینیم که:

$$c_+ = c_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (۲-۱-۵۹)$$

محاسبه‌ی احتمال اینکه سیستم را در زمان‌های بعدی در حالت‌های $S_x \pm$ پیدا کنیم، سراسر است:

$$\begin{aligned} |\langle S_x \pm | \alpha, t_0 = 0; t \rangle|^2 &= \left| \left[\left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right) \langle + | \pm \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right) \langle - | \right] \cdot \left[\left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right) \exp\left(\frac{-i\omega t}{2}\right) | + \rangle \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right) \exp\left(\frac{+i\omega t}{2}\right) | - \rangle \right] \right|^2 \\ &= \left| \frac{1}{2} \exp\left(\frac{-i\omega t}{2}\right) \pm \frac{1}{2} \exp\left(\frac{+i\omega t}{2}\right) \right|^2 \\ &= \begin{cases} \cos^2 \frac{\omega t}{2}, & \text{برای } S_x + \\ \sin^2 \frac{\omega t}{2}, & \text{برای } S_x - \end{cases} \end{aligned} \quad \begin{array}{l} (۲-۱-۶۰ الف) \\ (۲-۱-۶۰ ب) \end{array}$$

حتی وقتی که اسپین در ابتدا در جهت مثبت محور x ها قرار دارد، میدان مغناطیسی خارجی که در راستای z قرار داشت، موجب می‌شود که اسپین بچرخد. به‌عنوان یک نتیجه به‌دست آورده‌یم که در زمان‌های بعدی احتمال محدودی برای یافتن اسپین در حالت $S_x -$ وجود دارد. جمع دو احتمال در تمام زمان‌ها ثابت باقی می‌ماند که در توافق با یکانی بودن عملگر تحول زمانی است.

با استفاده از (۱-۴-۶) می‌توانیم مقدار انتظاری S_x را به‌صورت زیر بنویسیم:

$$\begin{aligned} \langle S_x \rangle &= \left(\frac{\hbar}{2} \right) \cos^2 \left(\frac{\omega t}{2} \right) + \left(-\frac{\hbar}{2} \right) \sin^2 \left(\frac{\omega t}{2} \right) \\ &= \left(\frac{\hbar}{2} \right) \cos \omega t \end{aligned} \quad (۲-۱-۶۱)$$

این مقدار با یک فرکانس زاویه‌ای که متناظر با اختلاف بین دو ویژه مقدار انرژی تقسیم بر \hbar است نوسان می‌کند. که این در توافق با فرمول کلی (۲-۱-۴۷) است. به‌همین صورت برای S_y و S_z داریم:

$$\langle S_y \rangle = \left(\frac{\hbar}{2} \right) \sin \omega t \quad (۲-۱-۶۲ الف)$$

$$\langle S_z \rangle = 0 \quad (۲-۱-۶۲ ب)$$

از نظر فیزیکی این بدان معنی است که اسپین در صفحه‌ی xy حرکت تقدیمی انجام می‌دهد. بعدها وقتی در فصل ۳ راجع به عملگر چرخش بحث می‌کنیم بیشتر راجع به حرکت تقدیمی اسپین توضیح می‌دهیم.

دامنه‌ی همبستگی و رابطهی عدم قطعیت انرژی-زمان

این بخش را با پرسیدن اینکه چطور کت‌های حالت در زمان‌های مختلف با یکدیگر همبسته می‌مانند به پایان می‌بریم. فرض کنید، کت اولیه‌ی یک سیستم فیزیکی در زمان $t = 0$ با $|\alpha\rangle$ داده شده باشد. با گذر زمان این کت به $|\alpha, t_0 = 0; t\rangle$ تغییر می‌کند که آن را با استفاده از عملگر تحول زمانی به دست می‌آوریم. توجه خود را به این مسأله معطوف می‌کنیم که کت حالت در زمان بعدی t چقدر شبیه به کت حالت ما در زمان $t = 0$ است. به همین منظور بین دو کت حالت در زمان‌های مختلف، ضرب داخلی تشکیل می‌دهیم:

$$\begin{aligned} C(t) &\equiv \langle \alpha | \alpha, t_0 = 0; t \rangle \\ &= \langle \alpha | \mathcal{U}(t, 0) | \alpha \rangle \end{aligned} \quad (۶۳-۱-۲)$$

این رابطه، به عنوان دامنه همبستگی شناخته شده است. اندازه‌ی $C(t)$ کمیتی را برای تعیین میزان "شباهت" بین کت‌های حالت در زمان‌های مختلف ارائه می‌دهد.

به عنوان یک مثال حدی، حالت خاصی را فرض کنید که در آن کت اولیه $|\alpha\rangle$ یک ویژه کت H باشد. در این صورت داریم:

$$C(t) = \langle a' | a', t_0 = 0; t \rangle = \exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right) \quad (۶۴-۱-۲)$$

بنابراین اندازه‌ی دامنه همبستگی، همان‌طور که برای یک حالت پایا انتظار می‌رود، همواره برابر واحد است. در حالت کلی‌تر که کت اولیه یک برهم نهی از $\{|a'\rangle\}$ است، همانند ۲-۱-۳۷، داریم:

$$\begin{aligned} C(t) &= \left(\sum_{a'} c_{a'}^* \langle a' | \right) \left[\sum_{a''} c_{a''} \exp\left(\frac{-iE_{a''}t}{\hbar}\right) | a'' \rangle \right] \\ &= \sum_{a'} |c_{a'}|^2 \exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right) \end{aligned} \quad (۶۵-۱-۲)$$

همین‌طور که روی جملات نوسانی با فرکانس وابسته به زمان جمع می‌بندیم، در مقادیر بزرگ t امکان صرف نظر کردن از جملات فراهم می‌شود. انتظار داریم که دامنه همبستگی در $t = 0$ از واحد شروع شده به تدریج با گذر زمان کاهش یابد.

برای تخمین بهتر (۲-۱-۶۵)، بگذارید کت‌های حالت را به صورت یک برهم‌نهی از تعداد زیادی از ویژه‌کت‌های انرژی با انرژی‌های همسان در نظر بگیریم. به طوری که بتوان آن را یک طیف شبه پیوسته تصور کرد. بنابراین اجازه داریم که انتگرال را جایگزین علامت سیگما کنیم:

$$\sum_{a'} \rightarrow \int dE \rho(E), \quad c_{a'} \rightarrow g(E) \Big|_{E \approx E_{a'}} \quad (۲-۱-۶۶)$$

که در آن $\rho(E)$ نشان دهنده چگالی ویژه‌کت‌های انرژی است. اکنون رابطه‌ی (۲-۱-۶۵) تبدیل می‌شود به:

$$C(t) = \int dE |g(E)|^2 \rho(E) \exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right) \quad (۲-۱-۶۷)$$

که شرط بهنجارش در آن به شکل زیر است:

$$\int dE |g(E)|^2 \rho(E) = 1 \quad (۲-۱-۶۸)$$

در حالت‌های واقعی فیزیکی $|g(E)|^2 \rho(E)$ در حوالی $E = E_0$ دارای قله است و پهنای آن برابر ΔE است. پس (۲-۱-۶۷) می‌شود:

$$C(t) = \exp\left(\frac{-iE_0 t}{\hbar}\right) \int dE |g(E)|^2 \rho(E) \exp\left[\frac{-i(E - E_0)t}{\hbar}\right] \quad (۲-۱-۶۹)$$

می‌بینیم که در مقادیر بزرگ t ، یعنی در زمان‌های طولانی، تابع زیر انتگرال به سرعت نوسان می‌کند. اگر $|E - E_0|$ آنقدر کوچک باشد که بتوان آن را با \hbar/t قابل مقایسه دانست، این نوسان رخ نمی‌دهد. اگر بازه‌ای که در آن $|E - E_0| \approx \hbar/t$ است، بسیار باریکتر از ΔE باشد، به علت حذف شدید هیچ سهم محسوسی برای $C(t)$ نمی‌ماند. زمان مشخصه‌ای که در آن اندازه‌ی دامنه‌ی همبستگی اختلاف قابل توجهی با ۱ (واحد) پیدا می‌کند برابر است با:

$$t = \frac{\hbar}{\Delta E} \quad (۲-۱-۷۰)$$

حتی با اینکه این رابطه برای برهم‌نهی حالت‌ها با یک طیف انرژی شبه پیوسته به دست آمد. این رابطه برای سیستم‌های دو ترازه هم برقرار است. در مسأله‌ی حرکت تقدیمی اسپین که پیش‌تر به آن پرداختیم، کت حالت که در ابتدا $|S_x + \rangle$ است، پس از گذشت زمانی تقریباً برابر با $\hbar/(E_+ - E_-) \sim 1/\omega$ شروع به از دست دادن هویت خود خواهد کرد. این مسأله را در (۲-۱-۶۰) هم دیدیم.

به عنوان یک نتیجه از تحول زمانی کت حالت سیستم‌های فیزیکی، این سیستم‌ها پس از گذشت زمانی از مرتبه‌ی $\hbar/\Delta E$ شکل ابتدایی خود را از دست خواهند داد. برای روشن شدن این مطلب معمولاً گفته می‌شود که رابطه‌ی عدم قطعیت زمان-انرژی به شکل زیر است:

$$\Delta t \Delta E \approx \hbar \quad (2-1-71)$$

اگرچه این رابطه به طور آشکار عدم قطعیتی بین انرژی و زمان را نشان می‌دهد اما طبیعت بسیار متفاوتی از رابطه‌ی عدم قطعیت بین دو مشاهده پذیر ناسازگار، که در بخش ۱-۴ راجع به آن بحث کردیم، دارد. در فصل ۵ در جریان نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان به رابطه‌ی (۲-۱-۷۲) باز می‌گردیم.

۲.۲ تصویر شرودینگر در برابر تصویر هایزنبرگ

عملگرهای یکانی

در بخش پیش درباره‌ی مفهوم گسترش زمان با توجه به عملگر تحول زمانی که روی کت‌ها اثر می‌کند، بحث کردیم. این دستاورد در دینامیک کوانتومی به تصویر شرودینگر معروف است. در دینامیک کوانتومی فرمول‌بندی دیگری وجود دارد که در آن به جای کت‌ها، مشاهده‌پذیرها با زمان تغییر می‌کنند. این فرمول‌بندی به تصویر هایزنبرگ معروف است. قبل از آنکه جزییات تمایز بین این دو تصویر را بیان کنیم، کمی درباره‌ی عملگرهای یکانی بحث می‌کنیم.

عملگرهای یکانی در جهت هدف‌های متعددی در مکانیک کوانتومی استفاده می‌شوند. در این کتاب (در بخش ۱-۵) عملگری را معرفی کردیم که دارای خاصیت یکانی بود. در آن بخش به این سؤال رسیدگی کردیم که کت‌های پایه در یک نمایش با کت‌های پایه در نمایش‌های دیگر ارتباط دارند. فرض کردیم که کت‌های حالت با تغییر کت‌های پایه، بدون تغییر می‌مانند و تنها مقادیر عددی ضرایب بسط برای $|\alpha\rangle$ در نمایش‌های مختلف تغییر می‌کند. در ادامه دو عملگر یکانی معرفی کردیم که در عمل کت‌های حالت را تغییر می‌دادند. یکی عملگر انتقال در بخش ۱-۶ و دیگری عملگر تحول زمانی در بخش ۲-۱. داریم:

$$|\alpha\rangle \rightarrow U|\alpha\rangle \quad (2-2-1)$$

که U می‌تواند $\mathcal{P}(dx)$ یا $\mathcal{U}(t, t_0)$ باشد. در این جا $U|\alpha\rangle$ یک کت حالت متناظر با یک سیستم فیزیکی است که تحت انتقال یا تحول زمانی قرار گرفته است.

به خاطر داشتن این نکته مهم است که، ضرب داخلی بین یک برای حالت و یک کت حالت، تحت هر تبدیل یکانی که کت‌های حالت را تغییر دهد، بدون تغییر می‌ماند:

$$\langle \beta | \alpha \rangle \rightarrow \langle \beta | U^\dagger U | \alpha \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle \quad (2-2-2)$$

با استفاده از این واقعیت که تبدیل روی کت‌های حالت اثر می‌گذارد و نه روی عملگرها، می‌توانیم تغییر روی $\langle \beta | X | \alpha \rangle$ را ببینیم:

$$\langle \beta | X | \alpha \rangle \rightarrow (\langle \beta | U^\dagger) \cdot X \cdot (U | \alpha \rangle) = \langle \beta | U^\dagger X U | \alpha \rangle \quad (3-2-2)$$

اکنون می‌توانیم یک روش بسیار ساده‌ی ریاضیاتی را به کار ببریم. از اصل شرکت‌پذیری ضرب داریم:

$$(\langle \beta | U^\dagger) \cdot X \cdot (U | \alpha \rangle) = \langle \beta | \cdot (U^\dagger X U) \cdot | \alpha \rangle \quad (4-2-2)$$

آیا در این مشاهده، فیزیکی وجود دارد؟ این اتحاد ریاضیاتی دو روش را برای تبدیلات یکانی ارائه می‌کند:

روش ۱: با عملگرهایی که تغییر نمی‌کنند و $|\alpha\rangle \rightarrow U|\alpha\rangle$

روش ۲: با کت‌های حالتی که تغییر نمی‌کنند و $X \rightarrow U^\dagger X U$.

در فیزیک کلاسیک ما چیزی به نام کت حالت تعریف نمی‌کردیم. در آن‌جا فقط راجع به انتقال، تحول زمانی و نظایر آن بحث می‌کردیم. این مسأله به خاطر این ممکن است که در واقع عملگرها، نظیر x و L ، مشاهده‌پذیرهای مکانیک کلاسیک را تغییر می‌دهند. بنابراین حدس می‌زنیم که اگر از روش ۲ پیروی کنیم با مکانیک کلاسیک ارتباط نزدیکی می‌یابیم.

در این‌جا یک مثال ساده می‌تواند مفید واقع شود. به عملگر انتقال بی‌نهایت کوچک $\mathcal{T}(dx')$ بازمی‌گردیم. فرمول‌بندی ارائه شده در ۱-۶ بر مبنای روش ۱ استوار است. $\mathcal{T}(dx')$ روی کت‌های حالت اثر کرده و روی عملگر مکان بی‌تأثیر می‌ماند:

$$|\alpha\rangle \rightarrow \left(1 - \frac{i\mathbf{p} \cdot d\mathbf{x}'}{\hbar}\right) |\alpha\rangle$$

$$\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} \quad (6-2-2)$$

اما اگر از روش ۲ پیروی کنیم خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &\rightarrow |\alpha\rangle \\ \mathbf{x} &\rightarrow \left(1 + \frac{i\mathbf{p}\cdot d\mathbf{x}'}{\hbar}\right)\mathbf{x}\left(1 - \frac{i\mathbf{p}\cdot d\mathbf{x}'}{\hbar}\right) \\ &= \mathbf{x} + \left(\frac{i}{\hbar}\right)[\mathbf{p}\cdot d\mathbf{x}', \mathbf{x}] \\ &= \mathbf{x} + d\mathbf{x}' \end{aligned} \quad (7-2-2)$$

این که هر دو روش منجر به یک نتیجه برای مقدار انتظاری x خواهد شد را به عنوان تمرین به عهده‌ی خواننده خواهیم گذاشت:

$$\langle \mathbf{x} \rangle \rightarrow \langle \mathbf{x} \rangle + \langle d\mathbf{x}' \rangle \quad (8-2-2)$$

کت‌های پایه و مشاهده‌پذیرها در تصویر شرودینگر و تصویر هایزنبرگ

اکنون به عملگر زمانی $\mathcal{U}(t, t_0)$ برمی‌گردیم. در بخش پیش آموختیم که کت‌های حالت به چه صورتی با زمان تحول می‌یابند. این بدان معنی است که ما از روش ۱ پیروی کرده‌ایم که تصویر شرودینگر نامیده می‌شود. در مقابل می‌توانستیم از روش ۲ تبعیت کنیم که تصویر هایزنبرگ نامیده می‌شود.

در تصویر شرودینگر عملگرهای وابسته به مشاهده‌پذیرها نظیر x و p_y و S_z در گذر زمان ثابت‌اند. در حالی که کت‌های حالت همان‌طور که در بخش پیش دیدید، با گذر زمان در حال تغییرند. در مقابل، در تصویر هایزنبرگ عملگرهای متناظر با مشاهده‌پذیرها با زمان تغییر می‌کنند در حالی که کت‌های حالت ثابت‌اند. یعنی کت‌ها همان‌طور که در t_0 بودند، منجمد می‌شوند. بنابر قرارداد و برای سادگی، t_0 را در $\mathcal{U}(t, t_0)$ برابر با صفر می‌گیریم و با $\mathcal{U}(t)$ که با رابطه‌ی زیر تعریف می‌شود کار می‌کنیم:

$$\mathcal{U}(t, t_0 = 0) \equiv \mathcal{U}(t) = \exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right) \quad (9-2-2)$$

با توجه به رابطه‌ی (۲-۲-۵) در روش ۲، مشاهده‌پذیر را در روش هایزنبرگ با رابطه‌ی زیر نشان می‌دهیم:

$$A^{(H)}(t) \equiv \mathcal{U}^\dagger(t) A^{(S)} \mathcal{U}(t) \quad (10-2-2)$$

که شاخص‌های H و S به ترتیب بیان‌کننده‌ی تصویر هایزنبرگ و شرودینگر است. در زمان $t = 0$ ، مشاهده‌پذیر تصویر هایزنبرگ و مشاهده‌پذیر تصویر شرودینگر بر هم منطبق‌اند:

$$A^{(H)}(0) = A^{(S)} \quad (11-2-2)$$

کت‌های حالت نیز در هر دو تصویر در $t = 0$ بر هم منطبق‌اند. در زمان بعدی t ، کت حالت تصویر هاینبرگ در زمان $t = 0$ منجمد می‌شود:

$$|\alpha, t_0 = 0; t\rangle_H = |\alpha, t_0 = 0\rangle \quad (۱۲-۲-۲)$$

که مستقل از t است. این مساله تناقض مشهودی با کت حالت تصویر شرودینگر دارد:

$$|\alpha, t_0 = 0; t\rangle_S = \mathcal{U}(t)|\alpha, t_0 = 0\rangle \quad (۱۳-۲-۲)$$

واضح است که مقدار انتظاری $\langle A \rangle$ در هر دو تصویر یکسان است:

$$\begin{aligned} {}_S\langle \alpha, t_0 = 0; t | A^{(S)} | \alpha, t_0 = 0; t \rangle_S &= \langle \alpha, t_0 = 0 | \mathcal{U}^\dagger A^{(S)} \mathcal{U} | \alpha, t_0 = 0 \rangle \\ &= {}_H\langle \alpha, t_0 = 0; t | A^{(H)}(t) | \alpha, t_0 = 0; t \rangle_H \end{aligned} \quad (۱۴-۲-۲)$$

معادله حرکت هاینبرگ

اکنون به استخراج یک معادله‌ی بنیادین در تصویر هاینبرگ می‌پردازیم. فرض می‌شود که $A^{(S)}$ به‌طور صریح وابسته به زمان نیست. این حالت در بیشتر وضعیت‌های فیزیکی حالت مطلوبی است. (با مشتق‌گیری از ۱۰-۲-۲) داریم:

$$\begin{aligned} \frac{dA^{(H)}}{dt} &= \frac{\partial \mathcal{U}^\dagger}{\partial t} A^{(S)} \mathcal{U} + \mathcal{U}^\dagger A^{(S)} \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \mathcal{U}^\dagger H \mathcal{U} \mathcal{U}^\dagger A^{(S)} \mathcal{U} + \frac{1}{i\hbar} \mathcal{U}^\dagger A^{(S)} \mathcal{U} \mathcal{U}^\dagger H \mathcal{U} \\ &= \frac{1}{i\hbar} [A^{(H)}, \mathcal{U}^\dagger H \mathcal{U}] \end{aligned} \quad (۱۵-۲-۲)$$

که در آن از روابط زیر استفاده کردیم [(۲-۱-۲۵) را ببینید]:

$$\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} H \mathcal{U} \quad (\text{الف } ۱۶-۲-۲)$$

$$\frac{\partial \mathcal{U}^\dagger}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \mathcal{U}^\dagger H \quad (\text{ب } ۱۶-۲-۲)$$

از آن‌جا که H در اصل، در تصویر شرودینگر معرفی شده بود، با توجه به (۱۰-۲-۲) می‌توانیم رابطه‌ی زیر را تعریف کنیم:

$$H^{(H)} = \mathcal{U}^\dagger H \mathcal{U} \quad (۱۷-۲-۲)$$

اما در کاربردهای مقدماتی که در آن \mathcal{U} با $(2-2-9)$ نشان داده می‌شود، واضح است که H و \mathcal{U} جابه‌جاپذیرند، بنابراین:

$$\mathcal{U}^\dagger H \mathcal{U} = H \quad (18-2-2)$$

به همین خاطر می‌توانیم $(2-2-15)$ را به صورت زیر بنویسیم:

$$\frac{dA^{(H)}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [A^{(H)}, H] \quad (19-2-2)$$

این رابطه به معادله‌ی حرکت هایزنبرگ معروف است. توجه کنید که این رابطه را با استفاده از خواص عملگر تحول زمانی و تعریف معادله‌ای برای $A^{(H)}$ به دست آوردیم.

مقایسه‌ی $(2-2-19)$ با معادله‌ی کلاسیکی حرکت، در شکل کروش‌ی پواسون، می‌تواند آموزنده باشد. در فیزیک کلاسیک، برای A که تابعی از q و p است و صریحاً به زمان وابسته نیست داریم: (گلدشتاین ۱۹۸۰، ۶-۴۰۵)

$$\frac{dA}{dt} = [A, H]_{\text{کلاسیکی}} \quad (20-2-2)$$

بار دیگر، قانون کوانتش دیراک به معادله‌ی صحیحی در مکانیک کلاسیک منجر می‌شود. از لحاظ تاریخی رابطه‌ی $(2-2-19)$ ابتدا توسط پی. ای. ام دیراک نوشته شد، که او - با توجه به شخصیت متواضعش - این معادله را، معادله‌ی حرکت هایزنبرگ نامید. حائز اهمیت است که بدانیم رابطه‌ی $(2-2-19)$ همیشه حتی در مواردی که $A^{(H)}$ مشابه کلاسیکی نداشته باشد، برقرار است. برای مثال عملگر اسپین در تصویر هایزنبرگ در رابطه‌ی

$$\frac{dS_i^{(H)}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [S_i^{(H)}, H] \quad (21-2-2)$$

صدق می‌کند که می‌توان از آن در جهت حرکت تقدیمی اسپین استفاده کرد. اما این رابطه مشابه کلاسیکی ندارد. چون S_i را نمی‌توان به صورت تابعی بر حسب q ها و p ها نوشت. به همین خاطر به جای قانون دیراک، $(1-6-47)$ ، می‌توانیم برای کمیت‌هایی که مشابه کلاسیکی دارند، معادله‌ی صحیحی در مکانیک کوانتومی با توجه به دستور زیر به دست آوریم:

$$\frac{[\quad]}{i\hbar} \rightarrow [\quad]_{\text{کلاسیکی}} \quad (22-2-2)$$

مکانیک کلاسیکی را می‌توان از مکانیک کوانتومی به دست آورد. اما عکس این گفته درست نیست.*

* در این کتاب از این ترتیب پیروی می‌کنیم: تصویر شرودینگر ← تصویر هایزنبرگ ← کلاسیک. برای شرح واضح همین مسأله منتها با ترتیب برعکس: کلاسیک ← تصویر هایزنبرگ ← تصویر شرودینگر کتاب فینکن اشتاین (۱۹۷۳) ۶۸-۷۰ و ۱۰۹ را ببینید.

ذرات آزاد؛ قضیه‌ی اهرنفت

چه در تصویر شرودینگر کار کنیم، چه در تصویر هایزنبرگ، برای آنکه بتوانیم از معادله‌ی حرکت استفاده کنیم، ابتدا می‌بایست هامیلتونی مناسب را تشکیل دهیم. برای یک سیستم فیزیکی با همتای کلاسیکی، فرض می‌کنیم که هامیلتونی شبیه به شکل کلاسیکی آن است. ما فقط x_i ها و p_i ها را با عملگرهای متناظر در مکانیک کوانتومی جایگزین می‌کنیم. با این فرض می‌توانیم در حد کلاسیکی معادلات صحیح کلاسیکی را داشته باشیم. هرگاه به خاطر وجود مشاهده‌پذیرهای جابه‌جا نشدنی ابهامی رخ دهد سعی می‌کنیم با استفاده از هرمیتی بودن H این مشکل را حل کنیم. برای نمونه نظیر ضرب کلاسیکی xp ، در کوانتوم به صورت $\frac{1}{2}(xp + px)$ است. وقتی که سیستم‌های فیزیکی مورد سؤال همتای کلاسیکی نداشته باشند می‌توانیم شکل هامیلتونی را، تنها حدس بزنیم. تا وقتی که نتایج هامیلتونی به دست آمده با نتایج تجربی تطابق پیدا کند، حدس‌های مختلفی را درباره‌ی هامیلتونی می‌آزماییم.

در کاربردهای عملی اغلب لازم است که جا به‌جایی x_i (یا p_i) را با توابعی از x_j و p_j محاسبه کنیم. برای این منظور استفاده از فرمول‌های زیر سودمند است:

$$[x_i, F(\mathbf{p})] = i\hbar \frac{\partial F}{\partial p_i} \quad (2-23 \text{ الف})$$

و

$$[p_i, G(\mathbf{x})] = -i\hbar \frac{\partial G}{\partial x_i} \quad (2-23 \text{ ب})$$

که در آن‌ها F و G توابعی هستند که می‌توان به ترتیب آن‌ها را به شکل توان‌هایی از x_j ها و p_j ها بسط داد. این دو رابطه را می‌توان با به کار بردن پی در پی (۱-۶-۵۰) اثبات کرد.

اکنون در وضعیتی هستیم که می‌توانیم معادله‌ی حرکت هایزنبرگ را بر روی یک ذره آزاد به جرم m اعمال کنیم. هامیلتونی شکل یکسانی با فرم کلاسیکی خود دارد:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} = \frac{(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)}{2m} \quad (2-24)$$

توجه خود را به مشاهده‌پذیرهای p_i و x_i ، که آن‌ها را به عنوان عملگرهای تکانه و مکان شناختیم، معطوف می‌داریم. در تصویر هایزنبرگ شاخص (H) این عملگرها را حذف می‌کنیم. از آن‌جا که p_i با هر تابعی از p_j ها جا به‌جا می‌شود، داریم:

$$\frac{dp_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [p_i, H] = 0 \quad (2-25)$$

بنابراین برای یک ذره‌ی آزاد، تکانه، یک ثابت حرکت است. این بدان معنی است که در تمام زمان‌ها $p_i(t)$ شبیه به $p_i(0)$ باقی خواهد ماند. به‌طور عام می‌توان گفت که در تصویر هایزنبرگ هرگاه عملگر $A^{(H)}$ با هامیلتونی جا به جا شود، آنگاه عملگر $A^{(H)}$ یک ثابت حرکت خواهد بود. سپس

$$\begin{aligned} \frac{dx_i}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} [x_i, H] = \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{2m} i\hbar \frac{\partial}{\partial p_i} \left(\sum_{j=1}^3 p_j^2 \right) \\ &= \frac{p_i}{m} = \frac{p_i(0)}{m} \end{aligned} \quad (26-2-2)$$

در این رابطه از (۲۳-۲-۲) استفاده کردیم. بنابراین جواب برابر است با:

$$x_i(t) = x_i(0) + \left(\frac{p_i(0)}{m} \right) t \quad (27-2-2)$$

این رابطه یادآور معادله‌ی کلاسیکی مسیر، در یک حرکت یکنواخت راست خط است. اگرچه در زمان‌های مساوی داریم:

$$[x_i(0), x_j(0)] = 0 \quad (28-2-2)$$

اما جابه‌جایی x_i ها در زمان‌های مختلف صفر نمی‌شود. داریم:

$$[x_i(t), x_i(0)] = \left[\frac{p_i(0)t}{m}, x_i(0) \right] = \frac{-i\hbar t}{m} \quad (29-2-2)$$

با اعمال رابطه‌ی عدم قطعیت (۱-۴-۵۳) در این جابه‌جایی به دست می‌آوریم:

$$\langle (\Delta x_i)^2 \rangle_i \langle (\Delta x_i)^2 \rangle_{i=0} \geq \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2} \quad (30-2-2)$$

علاوه بر نکات دیگر، این رابطه نشان دهنده‌ی این است که حتی اگر ذره در زمان $t = 0$ کاملاً جایگزیده باشد، با گذر زمان، مکان این ذره بیشتر و بیشتر دچار عدم قطعیت می‌شود. این همان نتیجه‌ای است که در مکانیک موجی، با مطالعه‌ی تحول زمانی رفتار بسته موج ذره‌ای آزاد به دست می‌آید.

اینک یک پتانسیل $V(x)$ به هامیلتونی پیشین خود اضافه می‌کنیم:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(x) \quad (31-2-2)$$

در این جا $V(x)$ به‌عنوان تابعی از عملگرهای x ، y و z مطرح است. این بار با استفاده از (۲۳-۲-۲) خواهیم داشت:

$$\frac{dp_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [p_i, V(\mathbf{x})] = -\frac{\partial}{\partial x_i} V(\mathbf{x}) \quad (۳۲-۲-۲)$$

از طرف دیگر می‌بینیم که رابطه‌ی زیر هنوز برقرار است:

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{p_i}{m} \quad (۳۳-۲-۲)$$

چون x_i با جمله‌ی جدید پتانسیل $V(x)$ جابه‌جا پذیر است. می‌توانیم یک بار دیگر از معادله‌ی حرکت هایزنبرگ استفاده کنیم و به دست آوریم:

$$\begin{aligned} \frac{d^2x_i}{dt^2} &= \frac{1}{i\hbar} \left[\frac{dx_i}{dt}, H \right] = \frac{1}{i\hbar} \left[\frac{p_i}{m}, H \right] \\ &= \frac{1}{m} \frac{dp_i}{dt} \end{aligned} \quad (۳۴-۲-۲)$$

برای این محاسبه از (۳۲-۲-۲) بهره بردیم. در نهایت به شکل برداری خواهیم داشت:

$$m \frac{d^2\mathbf{x}}{dt^2} = -\nabla V(\mathbf{x}) \quad (۳۵-۲-۲)$$

این همتایی برای قانون دوم نیوتون در مکانیک کوانتومی است. با گرفتن مقدار انتظاری از دو طرف و با توجه به این که در تصویر هایزنبرگ، کت حالت با زمان تغییر نمی‌کند، داریم:

$$m \frac{d^2\langle \mathbf{x} \rangle}{dt^2} = \frac{d\langle \mathbf{p} \rangle}{dt} = -\langle \nabla V(\mathbf{x}) \rangle \quad (۳۶-۲-۲)$$

پس از آنکه پی. اهرنفتست در سال ۱۹۲۷ با استفاده از مکانیک موجی این رابطه را نوشت، این معادله به قضیه‌ی اهرنفتست مشهور شد. از آن‌جا که این رابطه به شکل مقادیر چشمداشتی نوشته شده، اعتبار آن مستقل از آن است که در تصویر هایزنبرگ باشیم، یا تصویر شرودینگر. به هر حال، مقدار چشم‌داشتی در هر دو تصویر یکسان است. در مقابل شکل عملگری (۳۵-۲-۲) تنها وقتی با معنی است که \mathbf{x} و \mathbf{p} را به‌عنوان عملگرهایی در تصویر هایزنبرگ معرفی کنیم. توجه می‌کنیم که در (۳۶-۲-۲) \hbar ها با یکدیگر حذف شده‌اند. بنابراین این که مرکز بسته موج نظیر یک ذره‌ی کلاسیکی تحت تأثیر $V(x)$ حرکت کند، تعجب‌برانگیز نیست.

کت‌های پایه و دامنه‌های گذار

تا این‌جا به این سؤال که کت‌های پایه چگونه با زمان تحول می‌یابند، پرداختیم. یک اشتباه عام در این بحث آن است که تصور می‌شود، همه‌ی کت‌ها در تصویر شرودینگر متحرک‌اند و در تصویر

هایزنبرگ ثابت هستند. همان طور که به زودی خواهیم دید، این تصور غلط است. نکته‌ی اصلی، تمایز قائل شدن بین رفتار کت‌های حالت با کت‌های پایه است.

در بخش ۱-۲ بحث خود را درباره‌ی فضای کت با یادآوری این که ویژه توابع مشاهده‌پذیر، به‌عنوان کت‌های پایه استفاده می‌شوند، شروع کردیم. با گذر زمان چه اتفاقی برای معادله‌ی ویژه مقدراری:

$$A|a'\rangle = a'|a'\rangle \quad (۳۷-۲-۲)$$

می‌افتد؟ در تصویر شرودینگر، A تغییر نمی‌کند، بنابراین در $t = 0$ کت‌های پایه به‌عنوان جوابی برای این معادله‌ی ویژه مقدراری، بدون تغییر می‌مانند. بر خلاف کت‌های حالت، کت‌های پایه در تصویر شرودینگر بی‌تغییراند.

همه چیز در تصویر هایزنبرگ کاملاً متفاوت است. زیرا معادله‌ی ویژه مقدراری که باید مورد مطالعه قرار گیرد مربوط به عملگر وابسته به زمان زیر است:

$$A^{(H)}(t) = \mathcal{U}^\dagger A(0) \mathcal{U} \quad (۳۸-۲-۲)$$

از (۳۷-۲-۲) در $t = 0$ ، وقتی که دو تصویر بر هم منطبق‌اند، داریم:

$$\mathcal{U}^\dagger A(0) \mathcal{U} \mathcal{U}^\dagger |a'\rangle = a' \mathcal{U}^\dagger |a'\rangle \quad (۳۹-۲-۲)$$

که به یک معادله‌ی ویژه مقدراری برای $A^{(H)}$ منجر می‌شود:

$$A^{(H)}(\mathcal{U}^\dagger |a'\rangle) = a'(\mathcal{U}^\dagger |a'\rangle) \quad (۴۰-۲-۲)$$

اگر هنوز معتقد باشیم که ویژه کت‌های مشاهده‌پذیرها، کت‌های پایه را می‌سازند، آنگاه $\{\mathcal{U}^\dagger |a'\rangle\}$ می‌باید به‌عنوان کت‌های پایه در تصویر هایزنبرگ شناخته شوند. همین طور که زمان پیش می‌رود، کت‌های پایه‌ی تصویر هایزنبرگ که با $|a', t\rangle_H$ نشان داده می‌شود از رابطه‌ی زیر پیروی می‌کنند:

$$|a', t\rangle_H = \mathcal{U}^\dagger |a'\rangle \quad (۴۱-۲-۲)$$

از آن جا که به جای \mathcal{U} در (۴۱-۲-۲) در این رابطه \mathcal{U}^\dagger ظاهر می‌شود، می‌توان فهمید که کت‌های پایه در تصویر هایزنبرگ در مقایسه با کت‌های حالت تصویر شرودینگر در جهت مخالف می‌چرخند. $|a', t\rangle_H$ در معادله‌ی شرودینگر با علامت غلط صدق می‌کنند:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |a', t\rangle_H = -H |a', t\rangle_H \quad (۴۲-۲-۲)$$

همان طور که در (۲-۲-۴۰) مشاهده کردیم ویژه مقادیر با گذر زمان تغییر نمی کنند. این مسأله با بحث نظریه‌ی مشاهده پذیرهای یکانی که در بخش ۱-۵ مورد بررسی قرار گرفت در توافق است. همچنین توجه کنید که بسط $A^{(H)}(t)$ بر حسب کتهای پایه و براها در تصویر هایزنبرگ به صورت زیر است:

$$\begin{aligned} A^{(H)}(t) &= \sum_{a'} |a', t\rangle_H \langle a', t| \\ &= \sum_{a'} \mathcal{U}^\dagger |a'\rangle a' \langle a'| \mathcal{U} \\ &= \mathcal{U}^\dagger A^{(S)} \mathcal{U} \end{aligned} \quad (۲-۲-۴۳)$$

این رابطه نشان می دهد که همه چیز با این مطلب که کتهای پایه‌ی تصویر هایزنبرگ در (۲-۲-۴۱) تغییر می یابند، کاملاً در توافق است.

می بینیم که ضرایب بسط کت حالت بر حسب کتهای پایه در هر دو تصویر یکسان است:

$$c_{a'}(t) = \underbrace{\langle a'|}_{\text{پرای پایه}} \cdot \underbrace{(\mathcal{U}|\alpha, t_0=0\rangle)}_{\text{کت حالت}} \quad (\text{تصویر شرودینگر}) \quad (۲-۲-۴۲ \text{ الف})$$

$$c_{a'}(t) = \underbrace{(\langle a'| \mathcal{U})}_{\text{پرای پایه}} \cdot \underbrace{|\alpha, t_0=0\rangle}_{\text{کت حالت}} \quad (\text{تصویر هایزنبرگ}) \quad (۲-۲-۴۲ \text{ ب})$$

به طور شهودی، می توانیم بگوییم فرقی نمی کند که ما، کت حالت را در خلاف جهت عقربه‌های ساعت بچرخانیم و یا این که کت پایه را در جهت عقربه‌های ساعت بچرخانیم. در هر حال کسینوس زاویه‌ی بین کت حالت و کت پایه یکسان خواهد بود. وقتی که کتهای پایه یک طیف پیوسته را تشکیل دهند نیز این ملاحظات به خوبی برقرار است. در حالت خاص، تابع موج $|a', t\rangle_H$ را می توان به دو صورت در نظر گرفت: (۱) ضرب داخلی ویژه برای بدون تغییر مکان، در کت حالت متحرک (تصویر شرودینگر) و یا (۲) ضرب داخلی ویژه برای متحرک مکان، در کت حالت بدون تغییر (تصویر هایزنبرگ). در بخش ۲-۴ در مورد تابع موج وابسته به زمان بحث خواهیم کرد. در این بخش معادله‌ی معروف شرودینگر را نیز استخراج می کنیم.

برای روشن شدن بیشتر برابری دو تصویر، به مطالعه‌ی دامنه‌ی گذار می پردازیم. دامنه‌ی گذار نقش بنیادینی در بخش ۲-۵ بازی می کند. فرض کنید سیستمی در $t=0$ در یکی از ویژه حالت‌های مشاهده پذیر A با ویژه مقدار a' می باشد. در زمان بعدی t ممکن است این سؤال پیش آید که دامنه‌ی احتمال (که آن را به نام دامنه‌ی گذار می شناسیم) اینکه سیستم، در یکی از ویژه حالت‌های مشاهده پذیر B با

ویژه مقدار b' پیدا شود، چقدر است؟ در این جا A و B می توانند یکسان و یا متفاوت باشند. از آن جا که $\langle a' | a' \rangle$ و $\langle b' | b' \rangle$ با زمان تغییر نمی کنند، بنابراین دامنه‌ی گذار برابر است با:

$$\underbrace{\langle b' |}_{\text{برای پایه}} \cdot \underbrace{\langle \mathcal{U} | a' \rangle}_{\text{کت حالت}} \quad (۴۵-۲-۲)$$

در عوض در تصویر هایزنبرگ کت حالت پایا است. یعنی در تمام زمان‌ها در $\langle a' | a' \rangle$ باقی می ماند، اما در عوض کت‌های پایه متحول می شوند. بنابراین دامنه‌ی گذار برابر است با:

$$\underbrace{\langle b' | \mathcal{U} \rangle}_{\text{برای پایه}} \cdot \underbrace{| a' \rangle}_{\text{کت حالت}} \quad (۴۶-۲-۲)$$

واضح است که $(۴۵-۲-۲)$ و $(۴۶-۲-۲)$ برابرند. هر دو را می توان به صورت زیر نوشت:

$$\langle b' | \mathcal{U}(t, 0) | a' \rangle \quad (۴۷-۲-۲)$$

به عبارت غیر دقیق، این عبارت، دامنه‌ی گذار برای "رفتن" از حالت $| a' \rangle$ به حالت $| b' \rangle$ است.

برای جمع بندی این بخش بگذارید تا تفاوت‌های موجود بین تصویر شرودینگر و تصویر هایزنبرگ را خلاصه کنیم. جدول ۱-۲ را ببینید:

جدول ۱-۲: تصویر شرودینگر در مقابل تصویر هایزنبرگ

تصویر شرودینگر	تصویر هایزنبرگ
کت حالت	متحرک: $(۵-۱-۲)$ و $(۲۷-۱-۲)$
مشاهده پذیرها	پایا
کت پایه	متحرک در خلاف جهت: $(۴۱-۲-۲)$ و $(۴۲-۲-۲)$

۳.۲ نوسان گر هماهنگ ساده

نوسان گر هماهنگ ساده یکی از مهم ترین مسائل در مکانیک کوانتومی است. از نظر آموزشی این مسأله می تواند برای روشن ساختن مفاهیم و روش های اصلی در مکانیک کوانتومی مورد استفاده قرار گیرد. از نقطه نظر فیزیکی این مسأله دارای کاربردهایی در شاخه های مختلف فیزیک مدرن مانند طیف سنجی مولکولی، فیزیک حالت جامد، ساختار هسته ای، نظریه ی میدان کوانتومی، اپتیک کوانتومی، مکانیک آماری کوانتومی و غیره است. از نقطه نظر تاریخی ام. پلانک وابستگی واحدهای گسسته ی انرژی را به نوسان گرهای تابشی، پیشنهاد داد که این مسأله منجر به تولد مکانیک کوانتومی شد. به همین خاطر، فهمیدن خواص نوسان گرهای کوانتومی برای هر دانشجوی سخت کوش فیزیک مدرن ضروری است.

ویژه‌کتهای انرژی و ویژه مقادیر انرژی

بحث خود را با روش عملگری جالب دیراک آغاز می‌کنیم. این روش برای به دست آوردن ویژه‌کتهای و ویژه مقادیر انرژی، نوسانگر هماهنگ ساده به کار رفت و بر اساس کارهایی که پیش‌تر توسط ام. بورن و ان. وینر انجام شده بود، بنیان گرفت. هامیلتونی اصلی عبارت است از:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad (۱-۳-۲)$$

که در آن ω فرکانس زاویه ای نوسانگر کلاسیک است و از طریق رابطه‌ی $\omega = \sqrt{k/m}$ به ثابت فنر k در قانون هوک وابسته است. البته عملگرهای x و p هریتی هستند.

بنابر قرارداد دو عملگر غیرهریتی زیر را تعریف می‌کنیم:

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{ip}{m\omega} \right), \quad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{ip}{m\omega} \right) \quad (۲-۳-۲)$$

که به ترتیب به آنها عملگرهای فنا و خلق می‌گویند. به زودی دلیل این نام‌گذاری مشخص خواهد شد. با استفاده از روابط جابه‌جایی کانونیک داریم:

$$[a, a^\dagger] = \left(\frac{1}{2\hbar} \right) (-i[x, p] + i[p, x]) = 1 \quad (۳-۳-۲)$$

معمولاً عملگر تعداد را با

$$N = a^\dagger a \quad (۴-۳-۲)$$

نشان می‌دهند که هریتی بودن آن آشکار است. به راحتی می‌توان نشان داد:

$$\begin{aligned} a^\dagger a &= \left(\frac{m\omega}{2\hbar} \right) \left(x^2 + \frac{p^2}{m^2\omega^2} \right) + \left(\frac{i}{2\hbar} \right) [x, p] \\ &= \frac{H}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (۵-۳-۲)$$

بنابراین یک رابطه‌ی مهم بین عملگر تعداد و عملگر هامیلتونی وجود دارد:

$$H = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right) \quad (۶-۳-۲)$$

از آن جا که H یک تابع خطی ۱ و N است، همزمان با H قطری می‌شود. ویژه‌کتهای انرژی N را با ویژه مقدار آن، n ، مشخص می‌کنیم. بنابراین:

$$N|n\rangle = n|n\rangle \quad (۷-۳-۲)$$

پیش تر نشان دادیم که n باید یک عدد غیر منفی باشد. با توجه به (۲-۳-۶) داریم:

$$H|n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega|n\rangle \quad (۲-۳-۸)$$

این عبارت منجر می‌شود به این که ویژه مقادیر انرژی برابرند با:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (۲-۳-۹)$$

برای مشخص کردن نقش فیزیکی a ، a^\dagger و N بگذارید ابتدا به رابطه‌ی زیر توجه کنیم:

$$[N, a] = [a^\dagger a, a] = a^\dagger [a, a] + [a^\dagger, a]a = -a \quad (۲-۳-۱۰)$$

که در به دست آوردن این رابطه از (۲-۳-۳) استفاده کردیم. با عملیات مشابه داریم:

$$[N, a^\dagger] = a^\dagger \quad (۲-۳-۱۱)$$

به عنوان یک نتیجه داریم:

$$\begin{aligned} Na^\dagger|n\rangle &= ([N, a^\dagger] + a^\dagger N)|n\rangle \\ &= (n+1)a^\dagger|n\rangle \end{aligned} \quad (۲-۳-۱۲ \text{ الف})$$

و

$$\begin{aligned} Na|n\rangle &= ([N, a] + aN)|n\rangle \\ &= (n-1)a|n\rangle \end{aligned} \quad (۲-۳-۱۲ \text{ ب})$$

این رابطه نشان می‌دهد که $a^\dagger(a)$ یا $a|n\rangle$ همواره یک ویژه کت N با ویژه مقدار یک واحد افزوده شده (یا یک واحد کاهیده شده) است. از آنجا که افزایش (یا کاهش) n به اندازه‌ی یک واحد منجر به خلق (یا فنا)ی یک واحد کوانتومی انرژی $\hbar\omega$ می‌شود، به نام عملگر خلق (یا عملگر فنا) برای a^\dagger (یا a) مفهوم پیدا می‌کند.

معادله‌ی (۲-۳-۱۲) به این منجر می‌شود که $a|n\rangle$ و $|n-1\rangle$ با ضرب یک ثابت بین آن‌ها یکسان هستند. می‌نویسیم:

$$a|n\rangle = c|n-1\rangle \quad (۲-۳-۱۳)$$

که c یک ثابت عددی است و از شرط بهنجارش $|n\rangle$ و $|n-1\rangle$ به دست می‌آید. ابتدا توجه کنید:

$$\langle n|a^\dagger a|n\rangle = |c|^2 \quad (۲-۳-۱۴)$$

با توجه به اینکه در سمت چپ (۲-۳-۱۴) تنها یک عدد است، داریم:

$$n = |c|^2 \quad (۲-۳-۱۵)$$

C را بنابر قرارداد یک عدد مثبت و حقیقی در نظر می‌گیریم. در نهایت داریم:

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (۱۶-۳-۲)$$

به همین ترتیب، به سادگی می‌توان نشان داد که:

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (۱۷-۳-۲)$$

فرض کنید که عملگر فضای a را به دو طرف (۱۶-۳-۱) اعمال کنیم:

$$a^2|n\rangle = \sqrt{n(n-1)}|n-2\rangle,$$

$$a^3|n\rangle = \sqrt{n(n-1)(n-2)}|n-3\rangle$$

⋮

$$(۱۸-۳-۲)$$

به این صورت می‌توانیم ویژه‌کتهای n های کوچک و کوچک‌تر را تا زمانی که این توالی به پایان برسد به دست آوریم. تمام این توالی در صورتی رخ می‌دهد که با یک n صحیح مثبت کار را آغاز کرده باشیم. ممکن است کسی بخواهد با یک عدد غیر صحیح کار را شروع کند، در این صورت توالی هیچ‌گاه به پایان نمی‌رسد و ادامه‌ی کار منجر به بروز ویژه‌کتهایی با مقدار n منفی می‌شود. اما همواره لازم است که اندازه‌ی $|n\rangle$ مثبت باشد:

$$n = \langle n|N|n\rangle = (\langle n|a^\dagger) \cdot (a|n\rangle) \geq 0 \quad (۱۹-۳-۲)$$

این عبارت نشان می‌دهد که n هرگز نمی‌تواند منفی باشد! بنابراین نتیجه می‌شود که توالی باید در $t = 0$ خاتمه یابد و مقادیر مجاز n ، اعداد غیرمنفی هستند.

از آن‌جا که کوچک‌ترین مقدار n ، صفر است، حالت پایه‌ی نوسان‌گر هماهنگ دارای انرژی

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \quad (۲۰-۳-۲)$$

است. اکنون می‌توانیم به‌طور پی‌درپی عملگر a^\dagger را به حالت پایه‌ی $|0\rangle$ اعمال کنیم. به دست می‌آوریم:

$$|1\rangle = a^\dagger|0\rangle$$

$$|2\rangle = \left(\frac{a^\dagger}{\sqrt{2}}\right)|1\rangle = \left[\frac{(a^\dagger)^2}{\sqrt{2}}\right]|0\rangle$$

$$|3\rangle = \left(\frac{a^\dagger}{\sqrt{3}}\right)|2\rangle = \left[\frac{(a^\dagger)^3}{\sqrt{3!}}\right]|0\rangle$$

⋮

$$|n\rangle = \left[\frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}\right]|0\rangle$$

$$(۲۱-۳-۲)$$

در این روش موفق به ایجاد ویژه کت‌های همزمان N و H با ویژه مقادیر انرژی شدیم:

$$N|n\rangle = n|n\rangle \quad (۲۲-۳-۲)$$

از (۱۶-۳-۲)، (۱۷-۳-۲) و شرط تعامد برای مجموعه‌ی $\{|n\rangle\}$ ، آرایه‌های ماتریس را به دست می‌آوریم:

$$\langle n'|a|n\rangle = \sqrt{n} \delta_{n',n-1}, \quad \langle n'|a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1} \delta_{n',n+1} \quad (۲۳-۳-۲)$$

با استفاده از روابط بالا و روابط زیر:

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger), \quad p = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (-a + a^\dagger) \quad (۲۴-۳-۲)$$

$$\langle n'|x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n} \delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{n',n+1}) \quad (۲۵-۳-۲ \text{ الف})$$

$$\langle n'|p|n\rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (-\sqrt{n} \delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{n',n+1}) \quad (۲۵-۳-۲ \text{ ب})$$

می‌بینیم که آرایه‌های ماتریسی عملگرهای x و p ، در نمایش N که ما به کار بردیم، قطری نیستند. این مسأله تعجب برانگیز نیست چون x و p ، همانند a و a^\dagger با N جابه‌جا نمی‌شوند.

روش عملگری برای به دست آوردن ویژه توابع انرژی در فضای مکان نیز می‌تواند مورد استفاده قرار گیرد. حال بگذارید با تعریف حالت پایه به شکل زیر شروع کنیم:

$$a|0\rangle = 0 \quad (۲۶-۳-۲)$$

که در نمایش x به صورت زیر درمی‌آید:

$$\langle x'|a|0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \langle x' | \left(x + \frac{ip}{m\omega} \right) |0\rangle = 0 \quad (۲۷-۳-۲)$$

با دوباره به کار بستن (۱۷-۷-۱)، می‌توانیم این معادله را به عنوان یک رابطه‌ی متفاوت برای حالت پایه‌ی تابع موج $\langle x'|0\rangle$ به حساب آوریم:

$$\left(x' + x_0^2 \frac{d}{dx'} \right) \langle x'|0\rangle = 0 \quad (۲۸-۳-۲)$$

که در آن

$$x_0 \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (۲۹-۳-۲)$$

که این، همان مقیاس طول نوسان گر است. جواب بهنجار شده‌ی (۲-۳-۲۸) برابر است با:

$$\langle x' | 0 \rangle = \left(\frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{x_0}} \right) \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x'}{x_0} \right)^2 \right] \quad (30-3-2)$$

به همین صورت می‌توانیم ویژه توابع انرژی را برای حالت‌های برانگیخته بدست آوریم:

$$\langle x' | 1 \rangle = \langle x' | a^\dagger | 0 \rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2} x_0} \right) \left(x' - x_0^2 \frac{d}{dx'} \right) \langle x' | 0 \rangle,$$

$$\langle x' | 2 \rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right) \langle x' | (a^\dagger)^2 | 0 \rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}!} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2} x_0} \right)^2 \left(x' - x_0^2 \frac{d}{dx'} \right)^2 \langle x' | 0 \rangle, \dots$$

(۳۱-۳-۲)

در حالت کلی داریم:

$$\langle x' | n \rangle = \left(\frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{2^n n!}} \right) \left(\frac{1}{x_0^{n+1/2}} \right) \left(x' - x_0^2 \frac{d}{dx'} \right)^n \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x'}{x_0} \right)^2 \right] \quad (32-3-2)$$

آموخته است که مقادیر انتظاری x^2 و p^2 را برای حالت پایه به دست آوریم. ابتدا توجه می‌کنیم که:

$$x^2 = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right) (a^2 + a^{\dagger 2} + a^\dagger a + a a^\dagger) \quad (33-3-2)$$

وقتی که به محاسبه‌ی مقدار انتظاری x^2 می‌پردازیم، تنها آخرین جمله (۲-۳-۳۳) سهم غیر صفر دارد:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} = \frac{x_0^2}{2} \quad (34-3-2)$$

به همین صورت:

$$\langle p^2 \rangle = \frac{\hbar m\omega}{2} \quad (35-3-2)$$

در ادامه مقادیر انتظاری انرژی جنبشی و پتانسیل را به دست می‌آوریم:

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{\langle H \rangle}{2} \quad \text{and} \quad \left\langle \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right\rangle = \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{\langle H \rangle}{2} \quad (36-3-2)$$

این رابطه درست مطابق با قضیه ویریال است. از (۲-۳-۲۵الف) و (۲-۳-۲۵ب) داریم:

$$\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0 \quad (37-3-2)$$

که حتی برای حالت‌های برانگیخته هم این امر صادق است. بنابراین داریم:

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \quad \text{and} \quad \langle (\Delta p)^2 \rangle = \langle p^2 \rangle = \frac{\hbar m\omega}{2} \quad (38-3-2)$$

و می‌بینیم که رابطه‌ی عدم قطعیت در کمینه‌ی ضرب عدم قطعیت برقرار است:

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4} \quad (39-3-2)$$

این، چیز عجیبی نیست. چون تابع موج حالت پایه، شکل گاوسی دارد. در عوض، حاصل ضرب عدم قطعیت برای حالت‌های برانگیخته بزرگ‌تر می‌شود:

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \hbar^2 \quad (40-3-2)$$

خواننده می‌تواند این رابطه را به راحتی نشان دهد.

تحول زمانی نوسان‌گر

تا این جا درباره‌ی تحول زمانی کت‌های حالت و یا مشاهده‌پذیرهایی نظیر x و p بحث نکرده‌ایم. فرض شده است که آنچه تاکنون انجام داده‌ایم در یک لحظه از زمان مثلاً $t=0$ برقرار بوده است و عملگرهای x و p و a و a^\dagger نظیر عملگرهای تصویر شرودینگر (در تمام زمان‌ها) و یا نظیر عملگرهای تصویر هایزنبرگ در $t=0$ بررسی شده‌اند. در قسمت‌های مانده از این بخش، ما منحصراً در تصویر هایزنبرگ کار می‌کنیم. به این معنی که x و p و a و a^\dagger همگی وابسته به زمان هستند، اگرچه هیچ کدام از آن‌ها را مثلاً به صورت $x^{(H)}(t)$ نمی‌نویسیم.

معادلات حرکت هایزنبرگ برای p و x با استفاده از (۲-۲-۳۲) و (۲-۲-۳۳) به دست می‌آیند:

$$\frac{dp}{dt} = -m\omega^2 x \quad (41-3-2) \text{ الف}$$

و

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p}{m} \quad (41-3-2) \text{ ب}$$

این دو معادله دیفرانسیل جفت شده، معادل با دو معادله دیفرانسیل جفت نشده برای a و a^\dagger هستند که به صورت زیر درمی‌آیند:

$$\frac{da}{dt} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\frac{p}{m} - i\omega x \right) = -i\omega a \quad (42-3-2) \text{ الف}$$

و

$$\frac{da^\dagger}{dt} = i\omega a^\dagger \quad (۲-۳-۴۲)$$

که جواب آن‌ها به صورت زیر است:

$$a(t) = a(0)\exp(-i\omega t) \quad \text{and} \quad a^\dagger(t) = a^\dagger(0)\exp(i\omega t) \quad (۲-۳-۴۳)$$

این معادلات نشان می‌دهند، همان طور که انتظار می‌رود، حتی در تصویر هایزنبرگ هم N و H مستقل از زمان هستند. می‌توانیم (۲-۳-۴۳) را بر حسب x و p بازنویسی کنیم:

$$\begin{aligned} x(t) + \frac{ip(t)}{m\omega} &= x(0)\exp(-i\omega t) + i \left[\frac{p(0)}{m\omega} \right] \exp(-i\omega t) \\ x(t) - \frac{ip(t)}{m\omega} &= x(0)\exp(i\omega t) - i \left[\frac{p(0)}{m\omega} \right] \exp(i\omega t) \end{aligned} \quad (۲-۳-۴۴)$$

با مساوی قرار دادن قسمت‌های هرمیتی و پادهرمیتی هر دو طرف، به طور جداگانه داریم:

$$x(t) = x(0)\cos\omega t + \left[\frac{p(0)}{m\omega} \right] \sin\omega t \quad (۲-۳-۴۵ \text{ الف})$$

و

$$p(t) = -m\omega x(0)\sin\omega t + p(0)\cos\omega t \quad (۲-۳-۴۵ \text{ ب})$$

این روابط نظیر معادلات کلاسیک حرکت است. مشاهده می‌کنیم که x و p درست نظیر همتهای کلاسیکی خود "نوسان می‌کنند".

برای یادگیری بیشتر، راه متفاوتی برای استخراج (۲-۳-۴۵ الف) را نیز می‌آزماییم. به جای حل معادله‌ی حرکت هایزنبرگ سعی می‌کنیم که معادله‌ی زیر را حل کنیم:

$$x(t) = \exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right) x(0) \exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right) \quad (۲-۳-۴۶)$$

برای رسیدن به این هدف فرمول بسیار مفیدی را ارائه می‌کنیم:

$$\begin{aligned} \exp(iG\lambda) A \exp(-iG\lambda) &= A + i\lambda[G, A] + \left(\frac{i^2\lambda^2}{2!}\right) [G, [G, A]] + \\ &\dots + \left(\frac{i^n\lambda^n}{n!}\right) [G, [G, [G, \dots [G, A]]] \dots] + \dots \end{aligned} \quad (۲-۳-۴۷)$$

که در آن G یک عملگر هرمیتی و λ یک عدد حقیقی است. اثبات این فرمول را که به عنوان **پکر-هاسدورف** معروف است به عنوان یک تمرین به عهده‌ی خواننده می‌گذاریم. با اعمال این فرمول به (۲-۳-۴۶) به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right)x(0)\exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right) \\ = x(0) + \left(\frac{it}{\hbar}\right)[H, x(0)] + \left(\frac{i^2t^2}{2!\hbar^2}\right)[H, [H, x(0)]] + \dots \end{aligned} \quad (۴۸-۳-۲)$$

هر کدام از جملات سمت راست با به کار بردن رابطه‌ی زیر به x یا p کاهش می‌یابد:

$$[H, x(0)] = \frac{-i\hbar p(0)}{m} \quad (۴۹-۳-۲) \text{ الف}$$

و

$$[H, p(0)] = i\hbar m\omega^2 x(0) \quad (۴۹-۳-۲) \text{ ب}$$

بنابراین:

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right)x(0)\exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right) &= x(0) + \left[\frac{p(0)}{m}\right]t - \left(\frac{1}{2!}\right)t^2\omega^2x(0) \\ &\quad - \left(\frac{1}{3!}\right)\frac{t^3\omega^2p(0)}{m} + \dots \\ &= x(0)\cos\omega t + \left[\frac{p(0)}{m\omega}\right]\sin\omega t \end{aligned} \quad (۵۰-۳-۲)$$

که با (۲-۳-۴۵) الف) در توافق است.

ممکن است از (۲-۳-۴۵) الف) و (۲-۳-۴۵) ب) نتیجه گرفته شود که $\langle x \rangle$ و $\langle p \rangle$ همواره با فرکانس زاویه‌ای ω نوسان می‌کنند، اما این نتیجه‌گیری درست نیست. یکی از ویژه حالت‌های انرژی که با یک مقدار معلوم n مشخص می‌شود را در نظر بگیریم. مقدار انتظاری $\langle n|x(t)|n \rangle$ صفر می‌شود چون عملگرهای $x(0)$ و $p(0)$ مقدار n را به اندازه‌ی $+1$ یا -1 تغییر می‌دهند و $|n\rangle$ و $|n \pm 1\rangle$ نیز بر یکدیگر عمودند. این نکته از نتایج قبلی ما نیز آشکار می‌شود (بخش ۲-۱ را ببینید) که در آن مقدار انتظاری یک مشاهده‌پذیر که نسبت به یک حالت پایا به دست می‌آید با زمان تغییر نمی‌کند. برای آنکه نوسان یک

نوسان گر کلاسیکی را داشته باشیم، می‌بایست یک برهم نهی از ویژه حالت‌های انرژی نظیر تابع زیر را تشکیل دهیم:

$$|\alpha\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle \quad (۵۱-۳-۲)$$

مقدار انتظاری $x(t)$ نسبت به $(۵۱-۳-۲)$ نوسان می‌کند. این نتیجه را خواننده می‌تواند نشان دهد. دیدیم که بدون توجه به میزان بزرگی n ، یک ویژه حالت انرژی، همانند یک نوسان گر کلاسیکی رفتار نمی‌کند (به خاطر نوسانی بودن مقدار انتظاری x و p). منطقی است که بپرسیم، چطور می‌توان یک برهم نهی از ویژه حالت‌های انرژی تشکیل دهیم که بیشترین شباهت را به نوسان گر کلاسیک داشته باشد؟ به زبان تابع موج، بسته موجی می‌خواهیم که بدون پخش شدن در فضا به جلو و عقب حرکت کند. یک حالت همدوس که با معادله‌ی ویژه مقدراری برای عملگر غیرهرمیتی فنا a تعریف می‌شود و در حالت کلی دارای ویژه مقدار مختلط λ است:

$$a|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle \quad (۵۲-۳-۲)$$

چنین کاری انجام می‌دهد. حالت همدوس چند مختصه‌ی مشخصه دارد:

۱- وقتی حالت همدوس، به صورت برهم نهی ویژه حالت‌های انرژی (یا N) بیان شود:

$$|\lambda\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} f(n)|n\rangle \quad (۵۳-۳-۲)$$

توزیع $|f(n)|^2$ نسبت n ، حول مقدار میانگین به شکل پواسونی است:

$$|f(n)|^2 = \left(\frac{\bar{n}^n}{n!}\right) \exp(-\bar{n}) \quad (۵۴-۳-۲)$$

۲- این حالت را می‌توان با انتقال حالت پایه‌ی نوسان گر با یک فاصله‌ی محدود به دست آورد.

۳- این حالت، همواره در رابطه‌ی کمینه‌ی ضرب عدم قطعیت صدق می‌کند.

مطالعه‌ی دقیق حالت‌های همدوس، که بوسیله‌ی آر. گلابر مطرح شد، بسیار ارزشمند است. به خواننده توصیه می‌شود که روی تمرینی در انتهای فصل درباره‌ی این مفهوم طرح شده است، کار کند.*

* برای دیدن کاربردهای حالت همدوس در فیزیک لیزر به مقاله‌ی Scully, Sargent, و Lamb (1974) مراجعه کنید.

۴.۲ معادله‌ی موج شرودینگر

معادله‌ی موج وابسته به زمان

اکنون در تصویر شرودینگر کار می‌کنیم و به مطالعه‌ی تحول زمانی $\langle \alpha, t_0; t |$ در نمایش x می‌پردازیم. به عبارت دیگر کار ما مطالعه‌ی رفتار تابع موج

$$\psi(\mathbf{x}', t) = \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle \quad (1-4-2)$$

به عنوان تابعی از زمان است که در آن $\langle \alpha, t_0; t |$ کت حالت در تصویر شرودینگر، در زمان t است و $\langle \mathbf{x}' |$ در آن، ویژه برای مستقل از زمان مکان با ویژه مقدار \mathbf{x}' است. عملگر هامیلتونی با عبارت:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \quad (2-4-2)$$

داده می‌شود. پتانسیل $V(\mathbf{x}')$ یک عملگر هرمیتی است. این عملگر همواره موضعی است. یعنی در نمایش x داریم:

$$\langle \mathbf{x}'' | V(\mathbf{x}) | \mathbf{x}' \rangle = V(\mathbf{x}') \delta^3(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') \quad (3-4-2)$$

که در آن $V(\mathbf{x}')$ یک تابع حقیقی از $V(\mathbf{x}, t)$ است. بعداً در این کتاب با هامیلتونی‌های پیچیده‌تری که پتانسیل وابسته به زمان دارند مواجه خواهیم شد. یکی از پتانسیل‌ها می‌تواند یک پتانسیل غیر موضعی اما جداشدنی باشد که می‌توان آن را در سمت راست $(2-4-3)$ به صورت $v_1(\mathbf{x}'')v_2(\mathbf{x}')$ جایگزین کرد. مورد دیگر، بر هم کنش وابسته به تکانه‌ای به شکل $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ است، که در آن \mathbf{A} پتانسیل برداری در الکترو دینامیک است و به همین ترتیب اکنون معادله‌ی وابسته به زمان شرودینگر را استخراج می‌کنیم. ابتدا معادله‌ی شرودینگر را برای کت حالت $(2-1-27)$ می‌نویسیم:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle = \langle \mathbf{x}' | H | \alpha, t_0; t \rangle \quad (4-4-2)$$

که در آن از این واقعیت استفاده کردیم که در تصویر شرودینگر ویژه پراهای مکان با زمان تغییر نمی‌کنند. با استفاده از $(1-7-20)$ می‌توانیم سهم انرژی جنبشی را در طرف راست $(2-4-4)$ به صورت زیر بنویسیم:

$$\left\langle \mathbf{x}' \left| \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right| \alpha, t_0; t \right\rangle = - \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla'^2 \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle \quad (5-4-2)$$

برای $V(\mathbf{x})$ به سادگی داریم:

$$\langle \mathbf{x}' | V(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}' | V(\mathbf{x}') \quad (6-4-2)$$

که در آن $V(\mathbf{x}')$ دیگر یک عملگر نیست. در مجموع به دست می آوریم:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle = - \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla'^2 \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle + V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle \quad (7-4-2)$$

به این ترتیب می توانیم معادله‌ی موج وابسته به زمان ای. شرودینگر را که معمولاً به صورت زیر نوشته می شود، تشخیص دهیم:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}', t) = - \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla'^2 \psi(\mathbf{x}', t) + V(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}', t) \quad (8-4-2)$$

مکانیک کوانتومی که بر پایه‌ی معادله‌ی موج (۸-۴-۲) استوار است به مکانیک موجی معروف است. در واقع این معادله در بسیاری از کتاب‌های مکانیک کوانتومی نقطه‌ی آغاز است. اما در فرمول‌بندی ما، این معادله تنها، معادله‌ی شرودینگر با هامیلتونی (۲-۴-۲)، برای کت حالتی است که در پایه‌ی x نوشته شده است.

معادله‌ی موج مستقل از زمان

اکنون به استخراج یک معادله‌ی دیفرانسیل جزئی که ویژه توابع انرژی در آن صدق کنند می پردازیم. در بخش ۱-۲ نشان دادیم که وابستگی زمانی یک حالت پایا با $\exp(-iE_a t/\hbar)$ نشان داده می شود. این مسأله ما را قادر می سازد تا تابع موج را به صورت زیر بنویسیم:

$$\langle \mathbf{x}' | a', t_0; t \rangle = \langle \mathbf{x}' | a' \rangle \exp\left(\frac{-iE_{a'} t}{\hbar} \right) \quad (9-4-2)$$

در این معادله می دانیم که سیستم در ابتدا ویژه حالت همزمان A و H با ویژه مقادیر a' و $E_{a'}$ بوده است. حال اجازه دهید معادله‌ی (۹-۴-۲) را در معادله‌ی شرودینگر وابسته به زمان (۷-۴-۲) وارد کنیم. به دست می آوریم:

$$- \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla'^2 \langle \mathbf{x}' | a' \rangle + V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | a' \rangle = E_{a'} \langle \mathbf{x}' | a' \rangle \quad (10-4-2)$$

ویژه تابع انرژی $\langle \mathbf{x}' | a' \rangle$ با ویژه مقدار $E_{a'}$ در این معادله دیفرانسیل جزئی صدق می کند. در حقیقت، در مکانیک موجی که عملگر هامیلتونی همانند (۲-۴-۲)، به عنوان تابعی از x و p داده شده است، نیازی به ارجاع به مشاهده پذیر A که با H جابه جا شود نیست، چون می توان A را تابعی از x و p فرض کرد که با

خود H یکی باشد. بنابراین می‌توانیم a' را حذف کرده و (۲-۴-۱۰) را به شکل ساده، طوری بنویسیم که ویژه تابع انرژی $u_E(\mathbf{x}')$ در معادله دیفرانسیل جزئی صدق کند:

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\nabla'^2 u_E(\mathbf{x}') + V(\mathbf{x}')u_E(\mathbf{x}') = Eu_E(\mathbf{x}') \quad (۱۱-۴-۲)$$

این معادله‌ی موج مستقل از زمان ای. شرودینگر است (این در اولین مقاله از چهار مقاله‌ی ماندگار او که همه را در نیمه‌ی اول ۱۹۲۶ نوشت، آمده است)، که اساس مکانیک موجی است. او در مقاله‌ی مشابه، (۲-۴-۱۱) را برای به دست آوردن طیف انرژی اتم هیدروژن به کار بست.

برای حل (۲-۴-۱۱) می‌بایست چند شرط مرزی را لحاظ کرد. فرض کنید که ما از (۲-۴-۱۱) جوابی را می‌خواهیم که

$$E < \lim_{|\mathbf{x}'| \rightarrow \infty} V(\mathbf{x}') \quad (۱۲-۴-۲)$$

در آن رابطه‌ی نامساوی برای $|\mathbf{x}'| \rightarrow \infty$ در تمام جهات برقرار باشد. شرط مرزی مناسب در این مورد عبارت است از:

$$u_E(\mathbf{x}') \rightarrow 0 \text{ به ازای } |\mathbf{x}'| \rightarrow \infty \quad (۱۳-۴-۲)$$

از نظر فیزیکی این بدان معنا است که ذره در یک مرز درون یک فضا یا منطقه‌ای محدود، قرار گرفته است. از قضایای معادلات دیفرانسیل جزئی می‌دانیم که با اعمال شرایط مرزی (۲-۴-۱۳) بر معادله‌ی (۲-۴-۱۱)، فقط برای مقادیر گسسته‌ی E جواب غیربدیهی به دست می‌آوریم. این بدان معنی است که معادله‌ی شرودینگر مستقل از زمان (۲-۴-۱۱)، کوانتش ترازهای انرژی را نتیجه می‌دهد.* اکنون که معادله‌ی دیفرانسیل جزئی (۲-۴-۱۱) نوشته شد مسأله، یافتن ترازهای انرژی سیستم‌های فیزیکی ماکروسکوپی است. این مسأله، به‌سراستی پیدا کردن فرکانس‌های مشخصه‌ی طناب یا پوسته‌های مرتعش است. در هر دو مورد می‌بایست با استفاده از فیزیک محاسباتی، مسائل ویژه مقداری را حل کنیم.

در این جا به بحث کوتاهی درباره‌ی یک قضیه‌ی مکانیک کوانتومی می‌پردازیم. این واقعیت که مسائل ویژه مقداری قابل حل در معادلات دیفرانسیل جزئی را می‌توان با استفاده از روش‌های ماتریسی حل کرد، برای ریاضیدانان در ربع اول قرن بیستم کاملاً شناخته شده بود. به‌علاوه فیزیکدانان نظری مانند ام. بورن با ریاضی‌دانان بزرگ آن زمان، به‌خصوص دی. هیلبرت و اچ. ویلی، به‌طور متناوب تبادل نظر می‌کردند. اما وقتی مکانیک ماتریسی در تابستان ۱۹۲۵ متولد شد، سریعاً به ذهن ریاضی‌دانان یا

* عنوان مقاله‌ی شرودینگر که در (۲-۴-۱۱) به آن اشاره شد *Quantisierung als Eigenwertproblem* (کوانتش به‌عنوان مسئله‌ی ویژه مقداری) بود.

فیزیک دانان خطور نکرد که از این زبان برای فرمول‌بندی معادلات دیفرانسیل پاره‌ای استفاده کنند. شش ماه پس از انتشار مقاله‌ی نوی هاینبرگ، مکانیک موجی توسط شرودینگر پیشنهاد شد. اما مطالعه‌ی دقیق این مقاله نشان می‌داد که او تحت تأثیر کارهای پیشینی که توسط هاینبرگ، بورن و جوردن انجام شده بود، قرار نداشته است. در عوض، دلایلی که شرودینگر را به مکانیک موجی رسانده است در کار دبلو. آر. هامیلتون که بر قراری تشابه بین اپتیک و مکانیک است (که بعداً به آن خواهیم پرداخت) و همچنین فرضیه‌ی ذره - موج ال دوبروی ریشه داشته است. وقتی که مکانیک موجی فرمول‌بندی شد، اشخاص زیادی، از جمله خود شرودینگر، برابری مکانیک موجی و مکانیک ماتریسی را نشان دادند.

فرض شده است که خواننده‌ی این کتاب، تجربیاتی در حل معادلات موج وابسته به زمان و مستقل از زمان دارد. خواننده باید با تحول زمانی بسته موج گاوسی در یک ناحیه خالی از نیرو آشنا باشد. باید بتواند مسائل یک بعدی گذار و بازتاب از سر پتانسیل مستطیلی و نظایر آن را حل کند. باید برخی از جواب‌های ساده‌ی معادله‌ی موج مستقل از زمان (مانند ذره در جعبه، ذره در چاه مرجعی، نوسان‌گر هماهنگ ساده، اتم هیدروژن و نظایر آن) را بداند و همچنین می‌بایست با برخی از مشخصات کلی ویژه توابع و ویژه مقادیر انرژی آشنا باشد. به طوری که (۱) این واقعیت را که ترازهای انرژی بسته به این که (۲-۴-۱۲) برقرار باشد یا نه، طیف گسسته یا پیوسته دارند (۲) ویژه توابع انرژی در یک بعد، بسته به این که $E - V(\mathbf{x}')$ مثبت یا منفی باشند به شکل سینوسی و یا میرا رفتار می‌کنند. در این کتاب ما به این مباحث نمی‌پردازیم. یک خلاصه‌ی کوتاه از جواب‌های مقدماتی معادله‌ی شرودینگر در پیوست الف ارائه شده است.

تفسیرهای تابع موج

اکنون به تعبیرهای فیزیکی تابع موج می‌پردازیم. در بخش ۷-۱ خاطر نشان کردیم که تعبیر احتمالاتی $|\psi|^2$ ناشی از این حقیقت است که $\langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle$ را می‌توان ضریب بسط $|\alpha, t_0; t\rangle$ بر حسب ویژه کت مکان $\{|\mathbf{x}'\rangle\}$ در نظر گرفت. کمیت $\rho(\mathbf{x}', t)$ با عبارت زیر تعریف می‌شود:

$$\rho(\mathbf{x}', t) = |\psi(\mathbf{x}', t)|^2 = |\langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle|^2 \quad (۲-۴-۱۴)$$

که به عنوان چگالی احتمال در مکانیک موجی تعریف می‌شود. وقتی که از آشکارسازی استفاده می‌کنیم، که حضور ذره در یک آرایه‌ی حجم کوچک d^3x' در حوالی \mathbf{x}' را نشان می‌دهد، احتمال ثبت نتیجه‌ی مثبت در زمان t برابر با $\rho(\mathbf{x}', t) d^3x'$ است.

در ادامه‌ی فصل چون دیگر عملگر مکان ظاهر نمی‌شود، از \mathbf{x} به جای \mathbf{x}' استفاده می‌کنیم. با استفاده از معادله‌ی مستقل از زمان شرودینگر، به راحتی می‌توانیم معادله‌ی پیوستگی را به دست آوریم:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (۱۵-۴-۲)$$

که در آن $\rho(\mathbf{x}, t)$ همانند قبل، نشان دهنده $|\psi|^2$ است و $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$ را به عنوان شار احتمال معرفی می کنیم که از عبارت زیر به دست می آید:

$$\begin{aligned} \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) &= -\left(\frac{i\hbar}{2m}\right) [\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi] \\ &= \left(\frac{\hbar}{m}\right) \text{Im}(\psi^* \nabla \psi) \end{aligned} \quad (۱۶-۴-۲)$$

حقیقی بودن پتانسیل V (یا هرمیتی بودن عملگر V) نقش اساسی در به دست آمدن این نتیجه دارد. به عکس، پتانسیل مختلط می تواند منجر به ناپدید شدن یک ذره گردد. از چنین پتانسیلی، اغلب در واکنش های هسته ای که در طی آن ها ذرات منزوی توسط هسته جذب می شود استفاده می کنند.

به طور شهودی می توان انتظار داشت که شار احتمال \mathbf{j} وابسته به تکانه باشد. این مطلب وقتی تحقق می یابد که از \mathbf{j} روی تمام فضا انتگرال بگیریم. از (۱۶-۴-۲) به دست می آوریم:

$$\int d^3x \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \frac{\langle \mathbf{p} \rangle_t}{m} \quad (۱۷-۴-۲)$$

که در آن $\langle \mathbf{p} \rangle_t$ مقدار انتظاری عملگر تکانه در زمان t است.

معادله (۱۵-۴-۲) یادآور معادله ی پیوستگی در دینامیک سیالات است که معروف به شار هیدرودینامیکی مایع در یک محیط خالی از چشمه و چاه است. از نظر تاریخی، شرودینگر، ابتدا $|\psi|^2$ را به عنوان چگالی واقعی ساده یا $e|\psi|^2$ را به عنوان چگالی واقعی بار الکتریکی تعبیر کرد. اگر چنین دیدگاهی را بپذیریم، با نتایج عجیبی رو به رو خواهیم شد.

چنین دیدگاهی برای اندازه گیری مکان به نتیجه ی زیر می انجامد: الکترون اتم به عنوان توزیع پیوسته ای از ماده در نظر گرفته می شود که فضای اطراف هسته را پر کرده است، اما وقتی اندازه گیری انجام می شود، اطمینان داریم که الکترون در یک نقطه ی خاص است. توزیع پیوسته ی ماده بدون هیچ گسترشی ناگهان به شکل ذره شبیه به نقطه جمع و بسته می شود. توضیح موفق تر، تعبیر آماری $|\psi|^2$ به عنوان چگالی احتمال ابتدا توسط ام. بورن مطرح شد.

برای فهمیدن اهمیت فیزیکی تابع موج، اجازه دهید که آن را به شکل زیر بنویسیم:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \sqrt{\rho(\mathbf{x}, t)} \exp\left[\frac{iS(\mathbf{x}, t)}{\hbar}\right] \quad (۱۸-۴-۲)$$

که در آن S حقیقی و $\rho > 0$ است. این تابع همواره می تواند برای نشان دادن هر تابع مختلطی از x و t مورد استفاده قرار گیرد. معنی ρ قبلاً گفته شده است. تعبیر فیزیکی S چیست؟ داریم:

$$\psi^* \nabla \psi = \sqrt{\rho} \nabla(\sqrt{\rho}) + \left(\frac{i}{\hbar}\right) \rho \nabla S \quad (19-4-2)$$

می توانیم شار احتمال را به صورت زیر بنویسیم:

$$\mathbf{j} = \frac{\rho \nabla S}{m} \quad (20-4-2)$$

اکنون می بینیم که تابع موج بیش از آن حائز اهمیت است که تنها $|\psi|^2$ چگالی احتمال باشد. گرایان فاز S حاوی اطلاعات ارزشمندی است. از (20-4-2) می بینیم که تغییرات فضایی فاز تابع موج نشان دهنده شار احتمال است. تغییرات بیشتر فاز معادل با افزایش شار است. جهت \mathbf{j} در نقطه‌ی عمود بر سطح فاز ثابتی است که از آن نقطه می گذرد. در مثال ساده‌ی موج تخت (یک ویژه تابع تکانه) این مطلب به چشم می آید:

$$\psi(\mathbf{x}, t) \propto \exp\left(\frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}{\hbar} - \frac{iEt}{\hbar}\right) \quad (21-4-2)$$

که در آن \mathbf{p} نشان دهنده‌ی ویژه مقادیر عملگر تکانه است. همه‌ی مطالب بالا برقرار است چون:

$$\nabla S = \mathbf{p} \quad (22-4-2)$$

به طور کلی می توان $\nabla S/m$ را نوعی "سرعت" در نظر گرفت:

$$\mathbf{v} = \frac{\nabla S}{m} \quad (23-4-2)$$

معادله‌ی پیوستگی (2-4-15) را درست همانند دینامیک سیالات به شکل زیر می نویسیم:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (24-4-2)$$

اما باید درباره تفسیر تحت الفظی \mathbf{j} که در تمام نقاط فضا به شکل ρ برابر سرعت تعبیر شد، هشدار دهیم. چون اندازه گیری همزمان مکان و سرعت الزاماً اصل عدم قطعیت را نقض می کند.

حد کلاسیکی

اکنون به بحث درباره‌ی حد کلاسیکی و مکانیک موجی می‌رسیم. ابتدا شکل (۲-۴-۱۸) ψ را در دو سمت معادله‌ی موج وابسته به زمان جایگذاری می‌کنیم:

$$\begin{aligned}
 & -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \\
 & \times \left[\nabla^2 \sqrt{\rho} + \left(\frac{2i}{\hbar}\right) (\nabla \sqrt{\rho}) \cdot (\nabla S) - \left(\frac{1}{\hbar^2}\right) \sqrt{\rho} |\nabla S|^2 + \left(\frac{i}{\hbar}\right) \sqrt{\rho} \nabla^2 S \right] + \sqrt{\rho} V \\
 & = i\hbar \left[\frac{\partial \sqrt{\rho}}{\partial t} + \left(\frac{i}{\hbar}\right) \sqrt{\rho} \frac{\partial S}{\partial t} \right].
 \end{aligned} \tag{۲-۴-۲۵}$$

تا به این جا همه چیز دقیق است. حال فرض می‌کنیم که \hbar را می‌توان کمیت کوچکی فرض کرد. اکنون معنای فیزیکی این تقریب، مشخص نیست (بعدها به آن خواهیم پرداخت). اما بگذارید فرض کنیم:

$$\hbar |\nabla^2 S| \ll |\nabla S|^2 \tag{۲-۴-۲۶}$$

و به این ترتیب برای دست یافتن به یک معادله دیفرانسیل جزئی غیرخطی برحسب S ، در عبارت (۲-۴-۲۵) جملاتی را در نظر می‌گیریم که وابستگی صریح به \hbar نداشته باشند:

$$\frac{1}{2m} |\nabla S(\mathbf{x}, t)|^2 + V(\mathbf{x}) + \frac{\partial S(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = 0 \tag{۲-۴-۲۷}$$

در مکانیک کلاسیکی، این معادله را به‌عنوان **معادله‌ی هامیلتون ژاکوبی** می‌شناسیم. این معادله در سال ۱۸۳۶ به‌دست آمد و $S(\mathbf{x}, t)$ در آن به‌جای تابع اصلی هامیلتونی است. بنابراین، تعجب‌آور نیست که در حد $\hbar \rightarrow 0$ مکانیک کلاسیک به مکانیک موجی شرودینگر پیوندد. اکنون یک تفسیر نیمه کلاسیک از فاز تابع موج ارائه می‌کنیم: \hbar برابر فاز، با تابع اصلی هامیلتون معادل است به‌شرطی که t یک کمیت کوچک در نظر گرفته شود.

حال بگذارید به یک حالت پایا با وابستگی زمانی $\exp(-iEt/\hbar)$ توجه کنیم. این بار همان‌طور که از سیستم‌های کلاسیکی با هامیلتونی ثابت بر می‌آید، انتظار می‌رود که این وابستگی در تابع اصلی هامیلتونی S ، جداشدنی باشد:

$$S(x, t) = W(x) - Et \tag{۲-۴-۲۸}$$

که در آن $W(x)$ به تابع مشخصه‌ی هامیلتون معروف است (گلدشتاین ۱۹۸۰ و ۴۶-۴۴۵). با گذر زمان همان‌طور که در اپتیک موجی یک سطح با فاز ثابت - "پیشانی موج" - جلو می‌رود، سطح با k ثابت نیز جلو می‌رود. تکانه در نظریه‌ی کلاسیکی هامیلتون ژاکوبی از رابطه‌ی زیر به‌دست می‌آید:

$$P_{\text{class}} = \nabla S = \nabla W \quad (2-4-29)$$

که با تعبیر پیشین ما مبنی بر اینکه $\nabla S/m$ نوعی سرعت است، در تطابق است. در مکانیک کلاسیک بردار سرعت، مماس بر مسیر حرکت ذره است و به‌عنوان یک نتیجه می‌توانیم رد مسیر یک ذره را با پیگیری پیوستار جهت سرعت به‌دست آوریم. مسیر ذره شبیه به یک پرتو در اپتیک هندسی است، چون ∇S که رد مسیر را به‌دست می‌دهد بر پیشانی موجی که از k ثابت به‌دست می‌آید، عمود است. به این ترتیب، آنچنان که اپتیک هندسی با اپتیک موجی در ارتباط است مکانیک کلاسیک نیز به مکانیک موجی مربوط است.

شاید تعجب‌آور باشد که چرا این همانندی مکانیکی، اپتیکی یک قرن کامل درک نشده بود. دلیل این است که هیچ انگیزه‌ای برای اینکه تابع اصلی هامیلتون به‌عنوان فاز یک موج متحرک در نظر گرفته شود، وجود نداشت. طبیعت موجی ذرات مادی تا سال ۱۹۲۰ شناخته نشده بود. به‌علاوه، واحد اصلی کنش \hbar ، که به‌خاطر دلایل ابعادی در (2-4-18) وارد شد، در فیزیک قرن نوزدهم وجود نداشت.

تقریب نیمه‌کلاسیکی (WKB)

حال بگذارید خودمان را به یک بعد محدود کنیم و یک تقریب بر جواب حالت پایا، برای معادله موج شرودینگر به‌دست آوریم. با توجه به جواب‌های متناظر با معادله‌ی هامیلتون-ژاکوبی کلاسیکی که در زیر آمده‌اند به‌راحتی می‌توان به این امر دست یافت:

$$S(x, t) = W(x) - Et \\ = \pm \int^x dx' \sqrt{2m[E - V(x')]} - Et \quad (2-4-30)$$

برای یک حالت پایا می‌بایست داشته باشیم:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0, \quad (\text{all } x) \quad (2-4-31)$$

که در آن به‌خاطر معادله‌ی پیوستگی [(2-4-24) را ببینید]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho \frac{\partial S}{\partial x} \right) = 0 \quad (2-4-32)$$

داریم:

$$\rho \frac{dW}{dx} = \pm \rho \sqrt{2m[E - V(x)]} = \text{ثابت} \quad (۳۳-۴-۲)$$

بنابراین

$$\sqrt{\rho} = \frac{\text{ثابت}}{[E - V(x)]^{1/4}} \propto \frac{1}{\sqrt{v_{\text{کلاسیکی}}}} \quad (۳۴-۴-۲)$$

از آن جا که از نقطه نظر کلاسیک احتمال یافتن ذره در یک نقطه با سرعت رابطه‌ی عکس دارد، این جواب خوب و قابل قبولی است. با در نظر گرفتن موارد بالا، یک جواب تقریبی به دست می‌آوریم:

$$\psi(x, t) = \left\{ \frac{\text{ثابت}}{[E - V(x)]^{1/4}} \right\} \times \exp \left[\pm \left(\frac{i}{\hbar} \right) \int^x dx' \sqrt{2m[E - V(x')] - \frac{iEt}{\hbar}} \right] \quad (۳۵-۴-۲)$$

پس از کارهای جی. ونزل، آ. کرامر و ال. بریلوئن، این معادله به حل WKB معروف شد.*

بعد از به دست آوردن (۳۵-۴-۲) بگذارید به این سؤال بازگردیم که معنی اینکه می‌گوییم \hbar کوچک است، چیست؟ دست‌یابی به معادله‌ی هامیلتون-ژاکوبی از معادله‌ی شرودینگر بر پایه‌ی (۲۶-۴-۲) بود که در مسائل یک‌بعدی برابر است با:

$$\hbar \left| \frac{d^2W}{dx^2} \right| \ll \left| \frac{dW}{dx} \right|^2 \quad (۳۶-۴-۲)$$

این شرط، برحسب طول موج دوبروی تقسیم بر 2π ، برابر است با:

$$\lambda = \frac{\hbar}{\sqrt{2m[E - V(x)]}} \ll \frac{2[E - V(x)]}{|dV/dx|} \quad (۳۷-۴-۲)$$

به عبارت دیگر، λ باید آنقدر کوچک باشد که با طول مشخصه‌ای که در آن پتانسیل تغییر چشم گیر دارد، قابل مقایسه شود. به زبان غیردقیق، پتانسیل باید در طی چندین طول موج نسبتاً ثابت بماند. بنابراین می‌بینیم که تصویر نیمه کلاسیک در حد طول موج‌های کوتاه، اعتبار دارد.

حل (۳۵-۴-۲) برای مناطق کلاسیکی که در آن جا $E - V(x)$ مثبت است ارائه شده است. اینک به ناحیه ممنوع کلاسیکی یعنی جایی که $E - V(x)$ منفی است، می‌پردازیم. نظریه‌ی کلاسیکی هامیلتون

* پیش‌تر یک روش مشابه توسط آچ. جفری به کار برده شده بود. به همین خاطر در برخی از کتاب‌های انگلیسی به این حل، JWKB گفته می‌شود.

ژاکوبی در این مورد اعتبار ندارد، بنابراین تقریب در حل (۲-۴-۳۵)، که برای $E > V$ معتبر بود، باید اصلاح شود. خوشبختانه جواب همسانی در $E < V$ وجود دارد. با جایگذاری مستقیم می توان آزمود که:

$$\psi(x, t) \approx \left\{ \frac{\text{ثابت}}{[V(x) - E]^{1/4}} \right\} \exp \left[\pm \left(\frac{1}{\hbar} \right) \int^x dx' \sqrt{2m[V(x') - E]} - \frac{iEt}{\hbar} \right] \quad (2-4-38)$$

در معادله‌ی موج صدق می کند، به شرطی که $\hbar/\sqrt{2m(V-E)}$ آنقدر کوچک باشد که با طول مشخصه‌ای که در آن پتانسیل بی تغییر می ماند، قابل مقایسه باشد.

(۲-۴-۳۵) و (۲-۴-۳۸) نمی توانند جواب‌هایی بسازند که در نزدیکی نقاط بازگشت با مقادیر x در رابطه‌ی زیر صدق کند:

$$V(x) = E \quad (2-4-39)$$

چون λ (یا مشابه موهومی محض آن‌ها) در آن نقاط بی نهایت می شود که این خود منجر به نقض شرط (۲-۴-۳۷) خواهد شد. در واقع، به هم مربوط ساختن دو جواب که از نقاط بازگشت کلاسیکی عبور می کنند عملی غیربديهی است. در روش استاندارد این کار از مراحل زیر پیروی می کند:

۱- پتانسیل $V(x)$ ، در نزدیکی نقاط بازگشت x_0 ، که با ریشه‌های (۲-۴-۳۹) معلوم می شود، به طور تقریبی خطی می شود.

۲- معادله دیفرانسیل

$$\frac{d^2 u_E}{dx^2} - \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) \left(\frac{dV}{dx} \right)_{x=x_0} (x - x_0) u_E = 0 \quad (2-4-40)$$

به طور دقیق حل می شود و سومین جواب که شامل تابع بسط از مرتبه‌ی $\pm \frac{1}{3}$ است، در نزدیکی x_0 به دست می آید.

۳- با انتخاب ثابت‌های دلخواه این دو جواب، بر هم منطبق می شود.

درباره‌ی جزئیات این مراحل به طوری که در بسیاری جاها بحث شده است (برای مثال شیف ۱۹۶۸، ۷۶-۲۶۸) بحث نمی کنیم. به جای آن، توجه خود را به ارائه‌ی نتایجی برای چاه پتانسیلی که در شکل ۱-۲، با دو نقطه‌ی بازگشت x_1 و x_2 ، نشان داده شده است، جلب می کنیم. تابع موج می‌بایست در ناحیه‌ی II مانند (۲-۴-۳۵) و در ناحیه‌ی I و III مانند (۲-۴-۳۸) رفتار کند. انطباق صحیح تابع موج از ناحیه‌ی I به ناحیه‌ی II با انتخاب ضرایب ثابت به طوری که رابطه‌ی زیر برقرار باشد، ممکن می شود:

$$\left\{ \frac{1}{[V(x) - E]^{1/4}} \right\} \exp \left[- \left(\frac{1}{\hbar} \right) \int_x^{x_1} dx' \sqrt{2m[V(x') - E]} \right]$$

$$\rightarrow \left\{ \frac{2}{[E - V(x)]^{1/4}} \right\} \cos \left[\left(\frac{1}{\hbar} \right) \int_{x_1}^x dx' \sqrt{2m[E - V(x')]} - \frac{\pi}{4} \right]$$

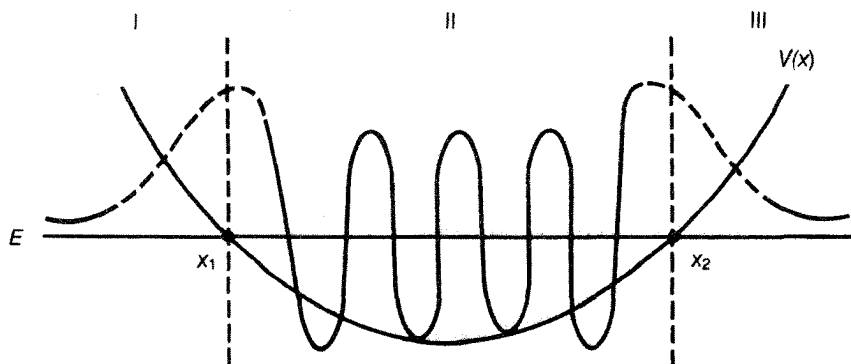
(۴۱-۴-۲)

به همین ترتیب برای انطباق II و III داریم:

$$\left\{ \frac{1}{[V(x) - E]^{1/4}} \right\} \exp \left[- \left(\frac{1}{\hbar} \right) \int_{x_2}^x dx' \sqrt{2m[V(x') - E]} \right]$$

$$\rightarrow \left\{ \frac{2}{[E - V(x)]^{1/4}} \right\} \cos \left[- \left(\frac{1}{\hbar} \right) \int_x^{x_2} dx' \sqrt{2m[E - V(x')]} + \frac{\pi}{4} \right]$$

(۴۲-۴-۲)

شکل ۱-۲: رفتار تابع موج $\psi_E(x)$ در چاه پتانسیل $V(x)$ با نقاط مرزی x_1 و x_2 .

یکتایی تابع موج در ناحیه II به این منجر می‌شود که آرگومان کسینوس در (۴۱-۴-۲) و (۴۲-۴-۲) تنها در یک عدد ضربدر π (و نه 2π)، چون علامت دو طرف (۴۲-۴-۲) می‌تواند معکوس شود. اختلاف داشته باشد. به این ترتیب شرط سازگاری بسیار جالبی را به دست می‌آوریم:

$$\int_{x_1}^{x_2} dx \sqrt{2m[E - V(x)]} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi \hbar \quad (n = 0, 1, 2, 3, \dots)$$

(۴۳-۴-۲)

صرف نظر از اختلاف بین n و $n + \frac{1}{2}$ ، این رابطه‌ی شرط کوانتاش در نظریه‌ی قدیمی کوانتوم است که ابتدا در سال ۱۹۱۵ توسط آر. سامرفلد و دبلیو. ویلسون به صورت زیر نوشته شد:

$$\oint p dq = nh$$

(۴۴-۴-۲)

که همان h پلانک است، نه \hbar دیراک و انتگرال روی کل دوره‌ی تناوب حرکت کلاسیکی از x_1 به x_2 و بازگشت محاسبه می‌شود.

معادله‌ی (۴۳-۴-۲) را می‌توان در به‌دست آوردن عبارات تقریبی برای ترازهای انرژی یک ذره‌ی متغیر به چاه پتانسیل به کار برد. به‌عنوان یک مثال، طیف انرژی یک توپ را که روی یک سطح سفت بالا و پایین می‌پرد، در نظر می‌گیریم:

$$V = \begin{cases} mgx, & \text{برای } x > 0 \\ \infty, & \text{برای } x < 0 \end{cases} \quad (۴۵-۴-۲)$$

که x بیان‌گر ارتفاع توپ از سطح سفت است. ممکن است مستقیماً از (۴۳-۴-۲) یا

$$x_1 = 0, \quad x_2 = \frac{E}{mg} \quad (۴۶-۴-۲)$$

استفاده شود که نقاط بازگشت این مسأله هستند. اما توجه می‌کنیم که، (۴۳-۴-۲) تحت این فرض به‌دست آمد که تابع موج WKB به $x < x_1$ "نشت" می‌کند. در حالی که در مسأله‌ی ما تابع موج در $x \leq x_1 = 0$ تماماً صفر می‌شود. راه حل بهتر برای این مسأله توجه به جواب‌های پارته‌ی فرد (که تضمین‌کننده‌ی صفر شدن در $x = 0$ هستند) در صورت اصلاح شده‌ی این مسأله است، که به‌صورت زیر می‌باشد:

$$V(x) = mg|x| \quad (-\infty < x < \infty) \quad (۴۷-۴-۲)$$

و نقاط برگشت برابرند با:

$$x_1 = -\frac{E}{mg}, \quad x_2 = \frac{E}{mg} \quad (۴۸-۴-۲)$$

طیف انرژی حالت‌های پارته‌ی فرد برای این صورت اصلاح شده‌ی مسأله می‌بایست دقیقاً نظیر مسأله‌ی اصلی باشد. شرط کوانتش تبدیل می‌شود به:

$$\int_{-E/mg}^{E/mg} dx \sqrt{2m(E - mg|x|)} = (n_{\text{odd}} + \frac{1}{2})\pi\hbar, \quad (n_{\text{odd}} = 1, 3, 5, \dots) \quad (۴۹-۴-۲)$$

یا

$$\int_0^{E/mg} dx \sqrt{2m(E - mgx)} = (n - \frac{1}{4})\pi\hbar, \quad (n = 1, 2, 3, 4, \dots) \quad (۵۰-۴-۲)$$

این انتگرال ابتدایی است و از حل آن به دست می آوریم:

$$E_n = \left\{ \frac{[3(n - \frac{1}{4})\pi]^{2/3}}{2} \right\} (mg^2 \hbar^2)^{1/3} \quad (۵۱-۴-۲)$$

که نشان دهنده‌ی ترازهای انرژی کوانتیده یک توپ جهنده است.

این مسأله از آن جهت معروف است که بدون هیچ گونه تقریبی و به طور تحلیلی قابل حل است. ویژه مقادیر انرژی بر حسب صفرهای تابع Airy بیان می شوند:

$$Ai(-\lambda_n) = 0 \quad (۵۲-۴-۲)$$

به طوری که:

$$E_n = \left(\frac{\lambda_n}{2^{1/3}} \right) (mg^2 \hbar^2)^{1/3} \quad (۵۳-۴-۲)$$

جدول ۲-۲: انرژی‌های کوانتیزه‌ی یک توپ جهنده بر واحد $(mg^2 \hbar^2)^{1/3}$

n	WKB	دقیق
1	2.320	2.338
2	4.082	4.088
3	5.517	5.521
4	6.784	6.787
5	7.942	7.944
6	9.021	9.023
7	10.039	10.040
8	11.008	11.009
9	11.935	11.936
10	12.828	12.829

در جدول ۲-۲، ده تراز اول انرژی که از دو طریق به دست آمده‌اند، به طور عددی مقایسه شده‌اند. می بینیم که حتی برای مقادیر کوچک n هم تقریب نسبتاً درست جواب می دهد. جواب برای $n=10$ ، به طور کاملاً قابل قبولی، دقیق است.

ممکن است به نظر رسد که بررسی کوانتومی توپ جهنده با دنیای واقعی تطابق زیادی ندارد. اما پتانسیلی از نوع (۴۵-۴-۲) در واقع پتانسیلی است که در مطالعه‌ی طیف انرژی یک سیستم مقید کوارک-پاد کوارک که به آن کوارکیوم گفته می شود، مورد توجه است. برای رفتن از مسأله‌ی توپ جهنده به مسأله‌ی کوارکیوم می باید x در (۴۵-۴-۲) را با فاصله‌ی مجزایی کوارک-پاد کوارک، r ، جایگزین کرد.

در مسأله کوارکیوم، نیروی همانند با نیروی گرانشی رو به پایین mg نیرویی ثابت (مستقل از r) است که بین یک کوارک و پادکوارک برقرار می‌شود. این نیرو به‌طور تجربی در همسایگی برابر با:

$$1 \text{ GeV/fm} \approx 1.6 \times 10^5 \text{ N} \quad (۵۴-۴-۲)$$

تخمین زده می‌شود که چیزی در حدود ۱۶ تن است. این نیرو در برابر نیروی گرانشی 0.98 N یک توپ 1 kg است.

۵.۲ انتشارگرها و انتگرال مسیر فاینمن

انتشارگرها در مکانیک موجی

در بخش ۲-۱ نشان دادیم که چطور بیشتر مسائل عمومی تحول زمانی که هامیلتونی مستقل از زمان دارند با کت‌های ابتدایی، برحسب ویژه‌کت‌های مشاهده‌پذیری که با H جابه‌جا پذیر باشد، قابل حل‌اند. اجازه دهید که این بیان را به زبان مکانیک موجی ترجمه کنیم. با عبارت زیر شروع می‌کنیم:

$$\begin{aligned} |\alpha, t_0; t\rangle &= \exp\left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right] |\alpha, t_0\rangle \\ &= \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|\alpha, t_0\rangle \exp\left[\frac{-iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\right] \end{aligned} \quad (۱-۵-۲)$$

$|x'\rangle$ را از چپ در دو طرف رابطه‌ی بالا ضرب می‌کنیم و به‌دست می‌آوریم:

$$\langle x'|\alpha, t_0; t\rangle = \sum_{a'} \langle x'|a'\rangle \langle a'|\alpha, t_0\rangle \exp\left[\frac{-iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\right] \quad (۲-۵-۲)$$

که به‌شکل زیر درمی‌آید:

$$\psi(x', t) = \sum_{a'} c_{a'}(t_0) u_{a'}(x') \exp\left[\frac{-iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\right] \quad (۳-۵-۲)$$

که:

$$u_{a'}(x') = \langle x'|a'\rangle \quad (۴-۵-۲)$$

بیان‌کننده‌ی ویژه تابع عملگر A با ویژه مقدار a' است. همچنین توجه کنید که رابطه‌ی:

$$\langle a'|\alpha, t_0\rangle = \int d^3x' \langle a'|x'\rangle \langle x'|\alpha, t_0\rangle \quad (۵-۵-۲)$$

با استفاده از قوانین معمول در مکانیک موجی، ضرایب بسط کت اولیه را به دست می‌دهد:

$$c_{a'}(t_0) = \int d^3x' u_{a'}^*(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}', t_0) \quad (6-5-2)$$

تمام چیزهایی که گفتیم سراسر است و آشنا بود. اکنون با توجه به (۲-۵-۲) به همراه (۵-۵-۲) می‌توان نوعی عملگر انتگرالی نشان داد که با عمل روی تابع موج اولیه، تابع موج نهایی را نتیجه می‌دهد:

$$\psi(\mathbf{x}'', t) = \int d^3x' K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) \psi(\mathbf{x}', t_0) \quad (7-5-2)$$

در این جا، قسمت اصلی عملگر انتگرالی، که در مکانیک موجی به انتشارگر معروف است، با رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) = \sum_{a'} \langle \mathbf{x}'' | a' \rangle \langle a' | \mathbf{x}' \rangle \exp \left[\frac{-iE_{a'}(t - t_0)}{\hbar} \right] \quad (8-5-2)$$

در تمام مسائل انتشارگر تنها به پتانسیل وابسته است و از تابع موج اولیه، مستقل است. می‌توان با داشتن توابع ویژه مقادیر آن‌ها، انتشارگرها را تشکیل داد.

واضح است که تحول زمانی تابع موج در صورتی که $K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0)$ معلوم و $\psi(\mathbf{x}', t_0)$ در ابتدا داده شده باشد، کاملاً قابل پیش‌بینی است. در این مورد مکانیک موجی شرودینگر یک نظریه‌ی کاملاً علی است. تحول زمانی یک تابع موج در بعضی از پتانسیل‌ها، همانند هر چیزی در مکانیک کلاسیک، تا زمانی که سیستم بدون اختلال باقی بماند "تعینی" است. تنها خصوصیت ویژه آن است که وقتی یک اندازه‌گیری رخ می‌دهد، تابع موج ناگهان به‌طور غیر قابل کنترلی به یکی از ویژه حالت‌های مشاهده‌پذیر تحت اندازه‌گیری، تغییر می‌کند.

بیان دو خصوصیت از انتشارگرها در این جا با اهمیت است: نخست، برای $t > t_0$ ، انتشارگر $K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0)$ در معادله‌ی موج وابسته به زمان شرودینگر با متغیرهای \mathbf{x}'' و t و با ثابت‌های \mathbf{x}' و t_0 ، صدق می‌کند. این نکته از (۸-۵-۲) به دست می‌آید. چون $\langle \mathbf{x}'' | a' \rangle \exp[-iE_{a'}(t - t_0)/\hbar]$ تابع موج متناظر با $\mathcal{U}(t, t_0) | a' \rangle$ است و در معادله‌ی موج صدق می‌کند. دوم

$$\lim_{t \rightarrow t_0} K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) = \delta^3(\mathbf{x}'' - \mathbf{x}') \quad (9-5-2)$$

که در آن به خاطر کامل بودن $\{|a'\rangle\}$ ، تقلیل یافتن جمع (۸-۵-۲) در $t \rightarrow t_0$ به $\langle \mathbf{x}'' | \mathbf{x}' \rangle$ واضح است.

با توجه به این دو خاصیت، انتشارگر (۲-۵-۸) تابعی از \mathbf{x}'' است که به بیان ساده، تابع موج ذره‌ای در زمان t است، که پیش‌تر، در زمان t_0 ، دقیقاً در \mathbf{x}' جایگزین بوده است. در کنار این تعبیر و شاید به شکل بهتر، با توجه به (۲-۵-۸) می‌توانیم عبارت زیر بنویسیم:

$$K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) = \langle \mathbf{x}'' | \exp\left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right] | \mathbf{x}' \rangle \quad (10-5-2)$$

که در آن با تأثیر عملگر تحول زمانی روی $|\mathbf{x}'\rangle$ برای سیستمی که پیش‌تر در t_0 ، دقیقاً در \mathbf{x}' جایگزیده بود، کت حالت در زمان t به دست می‌آید. اگر بخواهیم مسأله‌ی کلی تری را حل کنیم که در آن تابع موج در یک فضای محدود گسترده شده است، می‌بایست $\psi(\mathbf{x}', t_0)$ را در انتشارگر $K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0)$ ضرب کرده و روی کل فضا (یعنی روی \mathbf{x}') انتگرال بگیریم. در این حالت مهم موقعیت‌های مختلف (\mathbf{x}') را با هم جمع می‌کنیم. این وضعیت شبیه موقعیتی در الکتروپدینامیک است. اگر بخواهیم پتانسیل الکتریکی یک توزیع بار $\rho(\mathbf{x}')$ را اندازه بگیریم، ابتدا به حل مسأله‌ی بار نقطه‌ای می‌پردازیم، آنگاه جواب بار نقطه‌ای را در توزیع بار ضرب کرده و انتگرال می‌گیریم:

$$\phi(\mathbf{x}) = \int d^3x' \frac{\rho(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \quad (11-5-2)$$

خواننده‌ی آشنا به قضیه‌ی توابع گرین می‌تواند تشخیص دهد که انتشارگر، تابع گرین ساده‌ای برای معادله‌ی موج وابسته به زمان است که در رابطه‌ی زیر:

$$\left[-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \nabla''^2 + V(\mathbf{x}'') - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) = -i\hbar \delta^3(\mathbf{x}'' - \mathbf{x}') \delta(t - t_0) \quad (12-5-2)$$

با شرط مرزی:

$$K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) = 0, \quad \text{برای } t < t_0 \quad (13-5-2)$$

صدق می‌کند. از آنجا که K در $t = t_0$ ناپیوسته است، وجود تابع دلتای $\delta(t - t_0)$ در سمت راست (۲-۵-۱۲) ضروری است.

البته شکل خاص انتشارگر وابسته به شکل خاص پتانسیلی است که ذره با آن درگیر است. به عنوان یک مثال، ذره‌ای آزاد در یک بعد را فرض کنید. واضح است، مشاهده‌پذیری که با H جا به جا می‌شود تکانه است. $|p'\rangle$ ویژه کت همزمان عملگر p و H است:

$$p|p'\rangle = p'|p'\rangle \quad H|p'\rangle = \left(\frac{p'^2}{2m}\right)|p'\rangle \quad (14-5-2)$$

ویژه تابع تکانه همان تابع تبدیل در بخش ۷-۱ [۷-۱(۳۲-۷-۱)] را ببینید] است که به شکل موج تخت می باشد. با توجه به آنچه آموخته ایم داریم:

$$K(x'', t; x', t_0) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dp' \exp \left[\frac{ip'(x'' - x')}{\hbar} - \frac{ip'^2(t - t_0)}{2m\hbar} \right] \quad (15-5-2)$$

با ایجاد مربع کامل در تابع \exp می توان انتگرال را حل کرد. در این جا برای سادگی تنها نتیجه را آورده ایم:

$$K(x'', t; x', t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t - t_0)}} \exp \left[\frac{im(x'' - x')^2}{2\hbar(t - t_0)} \right] \quad (16-5-2)$$

این عبارت را می توان، به عنوان مثال، برای نشان دادن اینکه یک بسته موج گاوسی چطور با زمان منتشر می شود به کار برد.

برای نوسان گر هماهنگ ساده، که تابع موج یک ویژه حالت انرژی آن با عبارت زیر داده می شود:

$$u_n(x) \exp\left(\frac{-iE_n t}{\hbar}\right) = \left(\frac{1}{2^{n/2}\sqrt{n!}}\right) \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(\frac{-m\omega x^2}{2\hbar}\right) \\ \times H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) \exp\left[-i\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)t\right] \quad (17-5-2)$$

انتشارگر برابر است با:

$$K(x'', t; x', t_0) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin[\omega(t - t_0)]}} \exp \left\{ \frac{im\omega}{2\hbar \sin[\omega(t - t_0)]} \right\} \\ \times \left\{ (x''^2 + x'^2) \cos[\omega(t - t_0)] - 2x''x' \right\} \quad (18-5-2)$$

یکی از راه های اثبات این رابطه، استفاده از عبارت زیر است:

$$\left(\frac{1}{\sqrt{1 - \xi^2}} \right) \exp \left[\frac{-(\xi^2 + \eta^2 - 2\xi\eta\xi)}{(1 - \xi^2)} \right] \\ = \exp[-(\xi^2 + \eta^2)] \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\xi^n}{2^n n!} \right) H_n(\xi) H_n(\eta) \quad (19-5-2)$$

که در کتاب‌های توابع خاص آن را خواهید یافت (مورس و فیشاخ ۱۹۵۳، ۷۸۶). این عبارت با استفاده از روش عملگری a و a^\dagger نیز به دست می‌آید (ساکسون ۱۹۸۶، ۴۵-۱۴۴). همچنین می‌توان با استفاده از روش انتگرال مسیر که بعداً به آن خواهیم رسید این عبارت را به دست آورد. توجه کنید که (۲-۵-۱۸) تابع تناوبی از t با فرکانس زاویه‌ای ω ، همان فرکانس نوسان گر کلاسیکی، است. یعنی، یک ذره که در ابتدا در x' جایگزیده است، پس از طی زمان $2\pi/\omega$ و $4\pi/\omega$ و به همین صورت) به جای اصلی خود باز می‌گردد.

برخی از انتگرال‌های زمانی و یا فضایی که از $K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0)$ به دست می‌آید نیز قابل بررسی و جالب توجه‌اند. بدون از دست دادن کلیت مسأله در ادامه $t_0 = 0$ قرار داده می‌شود. اولین انتگرالی که بررسی می‌کنیم، با قرار دادن $\mathbf{x}'' = \mathbf{x}'$ و انتگرال گیری روی کل فضا به دست می‌آید. داریم:

$$\begin{aligned} G(t) &\equiv \int d^3x' K(\mathbf{x}', t; \mathbf{x}', 0) \\ &= \int d^3x' \sum_{a'} |\langle \mathbf{x}' | a' \rangle|^2 \exp\left(\frac{-iE_{a'} t}{\hbar}\right) \\ &= \sum_{a'} \exp\left(\frac{-iE_{a'} t}{\hbar}\right) \end{aligned} \quad (20-5-2)$$

این نتیجه قابل پیش‌بینی بود. با یادآوری (۲-۵-۱۰)، مشاهده می‌کنیم که وقتی $\mathbf{x}' = \mathbf{x}''$ قرار گیرد، انتگرال گیری معادل با رد عملگر تحول زمانی در نمایش \mathbf{x} خواهد بود. اما رد مستقل از نمایش است. سریعاً با استفاده از پایه‌های $\{|a'\rangle\}$ که در آن عملگر تحول زمانی قطری است، می‌توان به آخرین خط (۲-۵-۲۰) رسید. حال می‌بینیم که (۲-۵-۲۰) تنها "جمع روی حالت‌ها" است که یادآور تابع پارش در مکانیک آماری می‌باشد. در واقع، به طور تحلیلی مسأله را برای t ‌های کاملاً موهومی ادامه می‌دهیم و β را به عنوان کمیتی مثبت و حقیقی به صورت زیر تعریف کنیم:

$$\beta = \frac{it}{\hbar} \quad (21-5-2)$$

بین تابع پارش و رابطه‌ی (۲-۵-۲۰) همسانی برقرار می‌شود:

$$Z = \sum_{a'} \exp(-\beta E_{a'}) \quad (22-5-2)$$

به همین دلیل برخی از تکنیک‌هایی که در مطالعه‌ی انتشارگرها در مکانیک کوانتومی به کار می‌روند، معمولاً در مکانیک آماری نیز مفید واقع می‌شوند.

در ادامه اجازه دهید، تبدیل لاپلاس- فوریه‌ی $G(t)$ را در نظر بگیریم:

$$\begin{aligned}\tilde{G}(E) &\equiv -i \int_0^{\infty} dt G(t) \exp(iEt/\hbar) / \hbar \\ &= -i \int_0^{\infty} dt \sum_{a'} \exp(-iE_a t/\hbar) \exp(iEt/\hbar) / \hbar\end{aligned}\quad (23-5-2)$$

در این جا، انتگرال تابعی نهایت نوسانی است. اما می‌توانیم با افزودن یک قسمت موهومی کوچک به E انتگرال را با معنی کنیم:

$$E \rightarrow E + i\epsilon \quad (24-5-2)$$

در ادامه حد $\epsilon \rightarrow 0$ را به دست می‌آوریم:

$$\tilde{G}(E) = \sum_{a'} \frac{1}{E - E_{a'}} \quad (25-5-2)$$

اکنون می‌بینیم که طیف کامل انرژی، به صورت قطب‌های ساده‌ی $\tilde{G}(E)$ در صفحه‌ی مختلط E ظاهر شده است. اگر بخواهیم طیف انرژی سیستم فیزیکی را بدانیم، کافی است که مشخصات تحلیلی $\tilde{G}(E)$ را مورد مطالعه قرار دهیم.

انتشارگر به عنوان یک دامنه‌ی گذار

برای کسب نگرش بهتر از معنی فیزیکی انتشارگر، آن را به مفهوم دامنه‌ی گذار که در بخش ۲-۲ معرفی شد مربوط می‌کنیم. اما نخست، یادآوری می‌کنیم که می‌توان تابع موجی که حاصل از ضرب داخلی برای مکان ثابت $\langle \mathbf{x}' |$ در کت حالت متحرک $|\alpha, t_0; t\rangle$ است را به عنوان ضرب داخلی برای مکان $\langle \mathbf{x}', t |$ در تصویر هایزنبرگ که نسبت به زمان "معکوس" حرکت می‌کند، در کت حالت $|\alpha, t_0\rangle$ در تصویر هایزنبرگ که نسبت به زمان ثابت است، در نظر گرفت. به همین صورت انتشارگر را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\begin{aligned}K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) &= \sum_{a'} \langle \mathbf{x}'' | a' \rangle \langle a' | \mathbf{x}' \rangle \exp\left[\frac{-iE_{a'}(t - t_0)}{\hbar} \right] \\ &= \sum_{a'} \langle \mathbf{x}'' | \exp\left(\frac{-iHt}{\hbar} \right) | a' \rangle \langle a' | \exp\left(\frac{iHt_0}{\hbar} \right) | \mathbf{x}' \rangle \\ &= \langle \mathbf{x}'', t | \mathbf{x}', t_0 \rangle\end{aligned}\quad (26-5-2)$$

که در آن $\langle \mathbf{x}', t_0 |$ و $\langle \mathbf{x}'', t |$ را به عنوان یک ویژه کت و یک ویژه برا از عملگر مکان در تصویر هایزنبرگ می‌دانیم. در بخش ۲-۱ نشان دادیم که با نماد گذاری تصویر هایزنبرگ، عبارت $\langle b', t | a' \rangle$ ، دامنه‌ی

احتمال برای آن است که سیستمی که در اصل در یک ویژه حالت A با ویژه مقدار a' در $t_0 = 0$ قرار دارد، در لحظه‌ی بعد t در ویژه حالت B با ویژه مقدار b' یافت شود. به این مفهوم دامنه‌ی گذار از حالت $|a'\rangle$ به $|b'\rangle$ گفتیم. از آن جا که چیز خاصی در مورد انتخاب وجود ندارد (تنها اختلاف $t - t_0$ مطرح است)، می‌توانیم $\langle x'', t | x', t_0 \rangle$ را دامنه‌ی احتمال برای اینکه ذره‌ای که در ابتدا در t_0 دارای ویژه مقدار x' است در زمان بعدی در t در حالت x'' پیدا شود، در نظر بگیریم. به زبان غیر دقیق، $\langle x'', t | x', t_0 \rangle$ دامنه‌ی این است که ذره از منطقه‌ی فضا-زمانی (x', t_0) به منطقه‌ی فضا-زمانی (x'', t) برود. بنابراین عبارت دامنه‌ی گذار برای این عبارت کاملاً مناسب است. البته این تغییر با آنچه که قبلاً برای $K(x'', t; x', t_0)$ به دست آوردیم، مطابقت دارد.

هنوز راه دیگری برای تفسیر $\langle x'', t | x', t_0 \rangle$ وجود دارد که در ادامه بیان می‌شود. پیش‌تر $\langle x', t_0 |$ را به عنوان ویژه کت مکان در لحظه‌ی t_0 با ویژه مقدار x' در تصویر هایزنبرگ در نظر گرفتیم. از آن جا که در هر زمانی ویژه کت یک مشاهده‌پذیر در تصویر هایزنبرگ، می‌تواند به عنوان کت پایه در نظر گرفته شود، می‌توان $\langle x'', t | x', t_0 \rangle$ را به عنوان تابع تبدیلی که دو مجموعه از کت‌های پایه را در زمان‌های مختلف به هم متصل می‌کند، فرض کرد. بنابراین در تصویر هایزنبرگ، تحول زمانی، به شکل یک "تبدیل یکانی" است. چون می‌توان تحول زمانی را به عنوان پایه‌هایی در نظر گرفت که کت‌هایی به شکل $\{|x', t_0\rangle\}$ را به دسته‌ی دیگری از کت‌ها به شکل $\{|x'', t\rangle\}$ متصل می‌کند. این مسأله یادآور فیزیک کلاسیکی است. در آن جا، تحول زمانی یک متغیر دینامیکی کلاسیکی $x(t)$ به عنوان یک تبدیل بنیادی (یا ثابت) به وسیله‌ی هامیلتونی ایجاد می‌شد (گلدشتاین ۱۹۸۰ و ۴۰۷-۸).

به نظر می‌رسد، بهتر است از نمادگذاری استفاده کنیم که در آن مختصات فضا و زمان مقارن‌تر باشند. برای این منظور به جای $\langle x'', t | x', t_0 \rangle$ عبارت $\langle x'', t'' | x', t' \rangle$ را می‌نویسیم. از آن جا که در هر زمانی کت حالت در تصویر هایزنبرگ به شکل کامل است، می‌توانیم عملگر یکانی را به شکل زیر بنویسیم:

$$\int d^3x'' |x'', t''\rangle \langle x'', t''| = 1 \quad (27-5-2)$$

این رابطه در تمام مکان‌ها صادق است. برای مثال عملگر تحول زمانی را از t' تا t'' در نظر بگیرید و با تقسیم بازه‌ی (t', t'') به دو قسمت (t', t''') و (t''', t'') ، داریم:

$$\langle x''', t''' | x', t' \rangle = \int d^3x'' \langle x''', t''' | x'', t'' \rangle \langle x'', t'' | x', t' \rangle$$

$$(t''' > t'' > t') \quad (28-5-2)$$

به این رابطه، خاصیت توکیبی دامنه‌ی گذار می‌گوییم.* واضح است که می‌توانیم بازه‌ی زمانی را به تعداد زیادی از بازه‌های کوچک‌تری که می‌خواهیم، تقسیم کنیم. داریم:

$$\langle x''''', t'''' | x', t' \rangle = \int d^3 x''' \int d^3 x'' \langle x''''', t'''' | x''''', t'''' \rangle \langle x''''', t'''' | x'', t'' \rangle \langle x'', t'' | x', t' \rangle$$

$$\times \langle x'', t'' | x', t' \rangle, \quad (t'''' > t''' > t'' > t')$$

(۲۹-۵-۲)

و به همین صورت اگر بتوانیم شکل $\langle x'', t'' | x', t' \rangle$ را برای یک بازه‌ی زمانی بی‌نهایت کوچک (بین t' و $t'' = t' + dt$) حدس بزنیم، با روشی شبیه به (۲۹-۵-۲) می‌توانیم دامنه‌ی $\langle x'', t'' | x', t' \rangle$ را برای یک بازه‌ی زمانی محدود، با استفاده از ترکیب دامنه‌های گذار بازه‌های بی‌نهایت کوچک به دست آوریم. چنین روش استدلالی ما را به فرمول‌بندی مستقلی از مکتبک کوانتومی می‌رساند که در سال ۱۹۴۸ توسط آر.پی. فاینمن به انتشار رسید. در ادامه توجه خود را به آن معطوف می‌کنیم.

انتگرال مسیر به عنوان جمع روی مسیرها

بدون از دست دادن کلیت، خود را به مسائل یک بعدی محدود می‌کنیم. همچنین به جای استفاده از

$$x'''' \dots x''$$

N times

از نمادگذاری نظیر x_N استفاده می‌کنیم. با این نمادگذاری، دامنه گذار را برای ذره‌ای که از نقطه‌ی فضا-زمانی اولیه‌ی (x_1, t_1) به نقطه‌ی فضا-زمانی نهایی (x_N, t_N) می‌رود، در نظر می‌گیریم. بازه‌ای بین t_1 و t_N به $N-1$ قسمت مساوی، تقسیم می‌شود:

$$t_j - t_{j-1} = \Delta t = \frac{(t_N - t_1)}{(N-1)}$$

(۳۰-۵-۲)

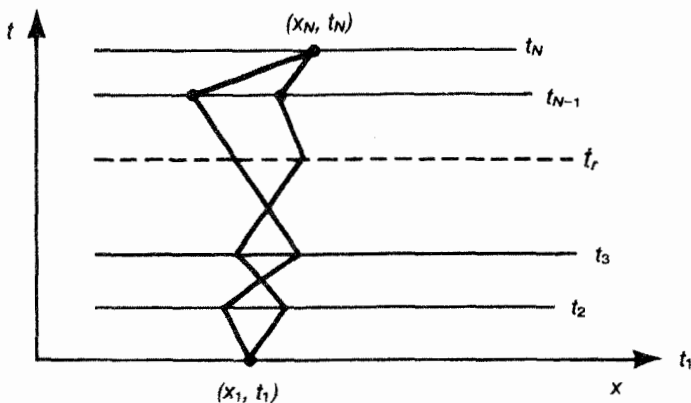
با در نظر گرفتن خاصیت ترکیب، داریم:

$$\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle = \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \dots \int dx_2 \langle x_N, t_N | x_{N-1}, t_{N-1} \rangle$$

$$\times \langle x_{N-1}, t_{N-1} | x_{N-2}, t_{N-2} \rangle \dots \langle x_2, t_2 | x_1, t_1 \rangle$$

(۳۱-۵-۲)

* نظیر (۲۸-۵-۲) در تئوری احتمالات به معادله‌ی چابین-کولموگوروف و در نظریه‌ی پخش به معادله‌ی اسمولوچوفسکی معروف است.

شکل ۲-۲: مسیر در صفحه‌ی xt

برای نشان دادن این رابطه یک صفحه‌ی فضا-زمان نظیر آنچه در شکل ۲-۲ آمده است در نظر می‌گیریم. نقاط فضا-زمانی ابتدایی و انتهایی در (x_1, t_1) و (x_N, t_N) قرار دارند. برای هر تکه‌ی زمانی، مثلاً بین t_{n-1} و t_n ، دامنه‌ی گذاری از (x_{n-1}, t_{n-1}) به (x_n, t_n) را در نظر می‌گیریم و سپس روی x_2, x_3, \dots, x_{N-1} انتگرال می‌گیریم. این بدان معنی است که باید روی تمام مسیرهای ممکن در صفحه‌ی فضا-زمان با نقاط شروع و پایان ثابت انتگرال بگیریم.

پیش از بررسی بیشتر، در این جا مروری بر چگونگی ایجاد مسیر در مکانیک کلاسیک سودمند است. فرض کنید، ذره‌ای داریم که با میدانی حاصل از پتانسیل $V(x)$ ، درگیر است. لاگرانژی کلاسیکی به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$L_{\text{classical}}(x, \dot{x}) = \frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x) \quad (32-5-2)$$

این لاگرانژین با نقاط شروع (x_1, t_1) و پایان (x_N, t_N) مشخص می‌شود. در مکانیک کلاسیکی، نمی‌توان هر مسیری را برای اتصال (x_1, t_1) و (x_N, t_N) در نظر گرفت. بلکه، تنها یک مسیر واحد وجود دارد که متناظر با حرکت ذره‌ی کلاسیکی می‌شود. برای مثال داریم:

$$V(x) = mgx, \quad (x_1, t_1) = (h, 0), \quad (x_N, t_N) = \left(0, \sqrt{\frac{2h}{g}}\right) \quad (33-5-2)$$

که در آن h می‌تواند ارتفاع برج پیزا باشد. مسیر کلاسیکی در صفحه‌ی xy تنها به شکل زیر است:

$$x = h - \frac{gt^2}{2} \quad (34-5-2)$$

به طور کلی تر، با توجه به مفهوم هامیلتونی، مسیر واحد، مسیری است که کنش را کمینه کند. کنش به شکل انتگرال زمانی لاگرانژی کلاسیکی تعریف می‌گردد:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt L_{\text{classical}}(x, \dot{x}) = 0 \quad (۳۵-۵-۲)$$

که از هر معادله‌ی لاگرانژی حرکتی به دست می‌آید.

فرمول بندی فاینمن

اکنون تفاوت اصلی مکانیک کلاسیک و مکانیک کوانتومی آشکار می‌گردد. در مکانیک کلاسیک یک مسیر معلوم در صفحه‌ی xt معرف حرکت ذره است. برعکس در مکانیک کوانتومی همه‌ی مسیرهای ممکن ایفاگر نقشی می‌باشند، از جمله آن‌هایی که هیچ شباهتی به مسیر کلاسیکی ندارند. البته هنوز هم باید در حد $\hbar \rightarrow 0$ به مکانیک کلاسیک برسیم. چگونه به این مسأله دست خواهیم یافت.

ما همانند دانشجوی جوان دانشگاه پرینستون، آر.پی. فاینمن با این مسأله برخورد می‌کنیم. او در جستجوی سرنخی بود که توجه‌اش به جمله‌ی رمز آلودی در یادداشت‌های دیراک جلب شد. که در زیر آمده است:

$$\exp \left[i \int_{t_1}^{t_2} \frac{dt L_{\text{classical}}(x, \dot{x})}{\hbar} \right] \quad \langle x_2, t_2 | x_1, t_1 \rangle \quad \text{متناظر است با}$$

فاینمن تلاش کرد تا مفهوم این جمله را درک کند. آیا "متناظر است با" به معنی "معادل است با" بود؟ آنچه او انجام داد، وی را به دستاورد فضا-زمانی در مکانیک کوانتومی رساند. این دستاورد بر مبنای انتگرال‌های مسیر استوار بود.

در فرمول بندی فاینمن مسیر کلاسیکی نقش مهمی را ایفا می‌کند. برای فشرده نویسی، نمادگذاری زیر را معرفی می‌نماییم:

$$S(n, n-1) \equiv \int_{t_{n-1}}^{t_n} dt L_{\text{classical}}(x, \dot{x}) \quad (۳۶-۵-۲)$$

از آن جا که کلاسیکی L تابعی از x و \dot{x} است، $S(n, n-1)$ تنها پس از تعیین یک مسیر معلوم که بتوان انتگرال گیری را روی آن انجام داد، تعریف می‌گردد. بنابراین اگرچه در این نمادگذاری وابستگی به مسیر صریحاً قید نشده است، اما می‌بایست مسیر خاصی را در نظر بگیریم که انتگرال در آن مسیر گرفته شود. اکنون فرض کنید که ما مسیر مشخصی را دنبال می‌کنیم. توجه خود را به تکه کوچکی از مسیر مثلاً

بین (x_{n-1}, t_{n-1}) و (x_n, t_n) جلب می‌کنیم. با توجه به گفته‌ی دیراک، این تکه با $\exp[iS(n, n-1)/\hbar]$ تعیین می‌شود. با حرکت در امتداد این مسیر معلوم و یا ضرب متوالی این عبارت‌ها داریم:

$$\prod_{n=2}^N \exp\left[\frac{iS(n, n-1)}{\hbar}\right] = \exp\left[\left(\frac{i}{\hbar}\right) \sum_{n=2}^N S(n, n-1)\right] = \exp\left[\frac{iS(N, 1)}{\hbar}\right] \quad (37-5-2)$$

هنوز این رابطه برابر با $\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle$ نیست. این معادله، تنها سهم یک مسیر مشخص در $\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle$ است. هنوز باید روی x_2, x_3, \dots, x_{N-1} انتگرال بگیریم. با توجه به خاصیت ترکیب، در زمان‌های مساوی، می‌توان بازه‌ای بین t_n و t_{n-1} را بی‌نهایت کوچک در نظر گرفت. بنابراین عبارت پیشنهادی ما برای $\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle$ را به شکل غیر دقیق می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle \sim \sum_{\text{همه‌ی مسیرها}} \exp\left[\frac{iS(N, 1)}{\hbar}\right] \quad (38-5-2)$$

که در آن جمع روی یک مجموعه‌ی غیر قابل شمارش بی‌نهایت از مسیر صورت می‌گیرد.

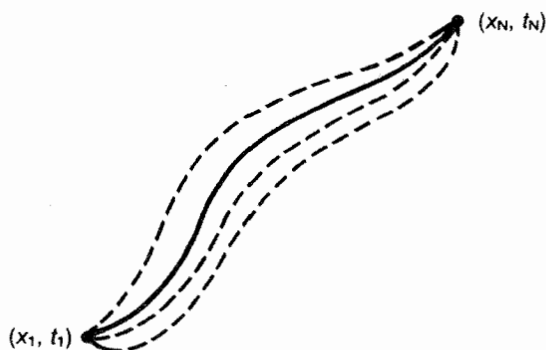
قبل از بررسی یک فرمول‌بندی دقیق‌تر، اجازه دهید ببینیم که بررسی به این طریق، در حد کلاسیکی به نتایج درستی منجر می‌شود. به ازای $\hbar \rightarrow 0$ تابع نمایی در (38-5-2) با سرعت زیادی نوسان می‌کند. بنابراین سهم مختلف مسیرهای همسایه حذف می‌شود. این بدان جهت است که $\exp[iS/\hbar]$ برای یک مسیر معین و $\exp[iS/\hbar]$ برای یک مسیر که کمی با آن تفاوت دارد، به خاطر کوچک بودن \hbar ، تفاوت فاز زیادی دارند. بنابراین هنگامی که \hbar به عنوان کمیتی کوچک در نظر گرفته شود، بیشتر مسیرها سهمی ندارند. اما یک استثنای مهم وجود دارد.

فرض کنید که یک مسیر در شرط زیر صادق باشد:

$$\delta S(N, 1) = 0 \quad (39-5-2)$$

که در آن تغییر در S ناشی از انحرافات کوچک در مسیری با نقاط ابتدایی و انتهایی ثابت است. این دقیقاً مسیر کلاسیکی است که با استفاده از مفهوم هامیلتونی به دست آمد. ما S را که در (39-5-2) صدق کند، با S_{min} معرفی می‌کنیم. اکنون سعی می‌کنیم، که کمی مسیرمان را از مسیر کلاسیکی منحرف کنیم. گوی که نتیجه می‌شود هنوز معادل با S_{min} از اولین مرتبه‌ی انحراف است. این بدان معنی است که فاز $\exp[iS/\hbar]$ حتی در حالتی که \hbar کوچک فرض می‌شود، نسبت به مسیر کلاسیکی تغییر چندانی نمی‌کند. به عنوان یک نتیجه، تا هنگامی که در نزدیکی مسیر کلاسیکی باقی بمانیم، امکان تداخل سازنده مسیرهای همسایه بر همدیگر ممکن است. در حد $\hbar \rightarrow 0$ همان‌طور که در شکل ۳-۲ نشان داده شده است، سهم

اصلی متعلق به یک باریکه نوار بسیار نازک (یا در ابعاد بالاتر یک لوله) است که شامل مسیر کلاسیکی می‌شود. حدس ما (فاینمن) که بر پایه‌ی جمله‌ی رمزآلود دیراک بنا شده بود، حدس درستی است چون در حد $\hbar \rightarrow 0$ مسیر کلاسیکی به دست می‌آید.



شکل ۲-۳. مسیرهای مهم در حد $\hbar \rightarrow 0$

برای فرمول‌بندی دقیق‌تر حدس فاینمن، بگذارید تا به عبارت $\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle$ باز گردیم که در آن اختلاف $t_n - t_{n-1}$ بسیار کوچک در نظر گرفته شده است. می‌نویسم:

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle = \left[\frac{1}{w(\Delta t)} \right] \exp \left[\frac{iS(n, n-1)}{\hbar} \right] \quad (۴۰-۵-۲)$$

که در آن $S(n, n-1)$ در یک لحظه در $\Delta t \rightarrow 0$ نوشته شده است. توجه کنید که در این عبارت یک عامل وزن $1/w(\Delta t)$ وارد شده است که تنها به بازه‌ی زمانی $t_n - t_{n-1}$ بستگی دارد و هیچگونه وابستگی به $V(x)$ در آن وجود ندارد. احتیاج به این عامل با توجه به ملاحظات ابعادی روشن می‌شود. از آنجا که ویژه‌کت مکان بهنجار شده است، $\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle$ دارای بُعد عکس طول است.

اکنون به تابع‌نمایی در (۴۰-۵-۲) نگاه می‌کنیم. کار ما محاسبه‌ی $S(n, n-1)$ در حد $\Delta t \rightarrow 0$ است. از آنجا که بازه‌ی زمانی بسیار کوچک است، تقریب خط راست برای مسیری که (x_{n-1}, t_{n-1}) را به (x_n, t_n) وصل می‌کند، منطقی می‌باشد:

$$\begin{aligned} S(n, n-1) &= \int_{t_{n-1}}^{t_n} dt \left[\frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x) \right] \\ &= \Delta t \left\{ \left(\frac{m}{2} \right) \left[\frac{(x_n - x_{n-1})}{\Delta t} \right]^2 - V \left(\frac{(x_n + x_{n-1})}{2} \right) \right\} \end{aligned} \quad (۴۱-۵-۲)$$

به عنوان یک مثال، به طور خاص مورد ذره‌ی آزاد را بررسی می‌کنیم که در آن $V = 0$ است. اکنون معادله‌ی (۲-۵-۴۰) تبدیل می‌شود به:

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle = \left[\frac{1}{w(\Delta t)} \right] \exp \left[\frac{im(x_n - x_{n-1})^2}{2\hbar \Delta t} \right] \quad (۴۲-۵-۲)$$

می‌بینیم که تابع نمایی که در این جا ظاهر شده است، کاملاً برابر با تابعی نمایی است که در انتشارگر ذره‌ی آزاد (۲-۵-۱۶) ظاهر شد. خواننده می‌تواند چنین کاری را برای مقایسه‌ی شباهت با نوسانگر هماهنگ ساده انجام دهد.

پیش‌تر خاطر نشان کردیم که عامل وزن $1/w(\Delta t)$ که در (۲-۵-۴۰) ظاهر شده است، مستقل از $V(x)$ فرض می‌شود. بنابراین به راحتی می‌توانیم آن را برای ذره‌ی آزاد محاسبه کنیم. با توجه به تعامد و شکل تابع δ ، ویژه‌کتهای مکان در تصویر هایزنبرگ، در زمان‌های مساوی داریم:

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle |_{t_n = t_{n-1}} = \delta(x_n - x_{n-1}) \quad (۴۳-۵-۲)$$

به دست می‌آوریم:

$$\frac{1}{w(\Delta t)} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar \Delta t}} \quad (۴۴-۵-۲)$$

که در آن از روابط زیر استفاده شده است:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar \Delta t}\right) = \sqrt{\frac{2\pi i\hbar \Delta t}{m}} \quad (\text{الف } ۴۵-۵-۲)$$

و

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar \Delta t}} \exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar \Delta t}\right) = \delta(\xi) \quad (\text{ب } ۴۵-۵-۲)$$

البته این عامل وزن، از عبارت انتشارگر ذره‌ی آزاد قابل پیش‌بینی بود.

به طور خلاصه در $\Delta t \rightarrow 0$ داریم:

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar \Delta t}} \exp \left[\frac{iS(n, n-1)}{\hbar} \right] \quad (۴۶-۵-۲)$$

عبارت نهایی برای دامنه‌ی گذار با $t_N - t_1$ محدود عبارت است از:

$$\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{(N-1)/2} \\ \times \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \cdots \int dx_2 \prod_{n=2}^N \exp \left[\frac{iS(n, n-1)}{\hbar} \right] \quad (۴۷-۵-۲)$$

که در آن حد $N \rightarrow \infty$ با x_N و t_N ثابت گرفته می‌شود. مناسب است که در این جا نوع جدیدی از عملگر انتگرال چندبعدی (در حقیقت بعد محدود) را تعریف کنیم:

$$\int_{x_1}^{x_N} \mathcal{D}[x(t)] \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{(N-1)/2} \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \cdots \int dx_2 \quad (۴۸-۵-۲)$$

و رابطه‌ی (۴۷-۵-۲) را به صورت زیر می‌نویسیم:

$$\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle = \int_{x_1}^{x_N} \mathcal{D}[x(t)] \exp \left[i \int_{t_1}^{t_N} dt \frac{L_{\text{classical}}(x, \dot{x})}{\hbar} \right] \quad (۴۹-۵-۲)$$

این عبارت به **انتگرال مسیر فاینمن** معروف است. مفهوم جمع روی تمام مسیرها در (۴۷-۵-۲) مشخص می‌شود. مرحله‌ی که به (۴۹-۵-۲) منجر شد، به معنی استخراج این رابطه نیست. بلکه ما تلاش کردیم که با استفاده از گفته رمزآلود دیراک فرمول‌بندی جدیدی برای مکانیک کوانتومی، بر پایه‌ی مسیرها ارائه دهیم.

تنها ایده‌هایی که برای رسیدن به این فرمول‌بندی جدید، از مکانیک کوانتومی مرسوم قرض گرفتیم عبارت بودند از: (۱) اصل برهم نهی (که در جمع بستن سهم مسیرهای مختلف از آن استفاده کردیم) (۲) خاصیت ترکیب دامنه‌ی گذار، و (۳) رسیدن به مکانیک کلاسیکی در حد $\hbar \rightarrow 0$.

حتی برای مورد ذره‌ی آزاد، نتایج یکسانی با نظریه‌ی کوانتوم مرسوم به دست آوردیم. از آنچه به دست آوردیم نتیجه می‌شود که: فرمول‌بندی فاینمن کاملاً معادل با مکانیک موجی شرودینگر است. این بخش را با اثبات این مطلب به پایان می‌بریم که، عبارت فاینمن $\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle$ در معادله‌ی موج وابسته به زمان شرودینگر با متغیرهای x_N و t_N ، درست شبیه انتشارگری که با (۸-۵-۲) تعریف شد، صدق می‌کند.

با عبارت زیر شروع می‌کنیم:

$$\begin{aligned} \langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle &= \int dx_{N-1} \langle x_N, t_N | x_{N-1}, t_{N-1} \rangle \langle x_{N-1}, t_{N-1} | x_1, t_1 \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N-1} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \exp \left[\left(\frac{im}{2\hbar} \right) \frac{(x_N - x_{N-1})^2}{\Delta t} - \frac{iV\Delta t}{\hbar} \right] \\ &\quad \times \langle x_{N-1}, t_{N-1} | x_1, t_1 \rangle \end{aligned} \quad (50-5-2)$$

که در آن فرض کرده‌ایم $t_N - t_{N-1}$ بسیار کوچک است. عبارت زیر را معرفی می‌کنیم:

$$\xi = x_N - x_{N-1} \quad (51-5-2)$$

و قرار می‌دهیم $x_N \rightarrow x$ و $t_N \rightarrow t + \Delta t$ ، داریم:

$$\langle x, t + \Delta t | x_1, t_1 \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \exp \left(\frac{im\xi^2}{2\hbar \Delta t} - \frac{iV\Delta t}{\hbar} \right) \langle x - \xi, t | x_1, t_1 \rangle \quad (52-5-2)$$

به عنوان یک نتیجه از (۲-۵-۴۵ ب)، در حد $\Delta t \rightarrow 0$ ، سهم اصلی انتگرال از ناحیه‌ی $\xi \approx 0$ ناشی می‌شود.

بنابراین منطقی است که $\langle x - \xi, t | x_1, t_1 \rangle$ را بر حسب توان‌های ξ بسط دهیم. معمولاً $\langle x, t + \Delta t | x_1, t_1 \rangle$ و $\exp(-iV\Delta t/\hbar)$ را بر حسب توان‌های Δt بسط می‌دهیم. بنابراین:

$$\begin{aligned} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle \\ = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \exp \left(\frac{im\xi^2}{2\hbar \Delta t} \right) \left(1 - \frac{iV\Delta t}{\hbar} + \dots \right) \\ \times \left[\langle x, t | x_1, t_1 \rangle + \left(\frac{\xi^2}{2} \right) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle + \dots \right] \end{aligned} \quad (53-5-2)$$

که در آن جمله‌ی خطی ξ را حذف کرده‌ایم. چون هنگامی که انتگرال گیری نسبت به ξ انجام می‌شود، این جمله برابر با صفر خواهد بود. با توجه به (۲-۵-۴۵ الف)، جمله‌ی $\langle x, t | x_1, t_1 \rangle$ در سمت چپ، دقیقاً برابر با جمله‌ی سمت راست است. با برابر قرار دادن جملات مرتبه اول Δt ، داریم:

$$\begin{aligned} \Delta t \frac{\partial}{\partial t} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle &= \left(\sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \right) (\sqrt{2\pi}) \left(\frac{i\hbar \Delta t}{m} \right)^{3/2} \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle \\ &\quad - \left(\frac{i}{\hbar} \right) \Delta t V \langle x, t | x_1, t_1 \rangle \end{aligned}$$

که در آن از عبارت زیر استفاده شده است:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \xi^2 \exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar \Delta t}\right) = \sqrt{2\pi} \left(\frac{i\hbar \Delta t}{m}\right)^{3/2} \quad (۵۵-۵-۲)$$

این رابطه با دیفرانسیل گیری از (۲-۵-۴۵ الف) نسبت به Δt به دست می آید. به این ترتیب دیدیم که $\langle x, t | x_1, t_1 \rangle$ در معادله‌ی موج وابسته به زمان شرو دینگر صدق می کند:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle = -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle + V \langle x, t | x_1, t_1 \rangle \quad (۵۶-۵-۲)$$

بنابراین نتیجه می گیریم که $\langle x, t | x_1, t_1 \rangle$ که در نسخه‌ی فاینمن، همان انتشارگر در مکانیک موجی شرو دینگر است.

دستاورد فضا- زمان فاینمن که بر پایه‌ی انتگرال مسیر استوار است، برای حل مسائل در مکانیک کوانتومی غیرنسبیتی چندان مرسوم نیست. حتی برای نوسان گر هماهنگ ساده، حل دقیق انتگرال مسیر قدری مشکل است.* با این حال، این دستاورد از نقطه نظر مفهومی بسیار مطلوب است. با فرض مجموعه‌ی معینی از شرایط معقول بر یک تئوری فیزیکی، به فرمول بندی عمومی مکانیک کوانتومی هدایت می شویم. این که می توان برای توصیف موفق پدیده‌های میکروسکوپی یک نظریه‌ی منطقی و معقول دیگر را تشکیل داد، تعجب برانگیز است.

روش‌های مبتنی بر انتگرال مسیر در سایر شاخ‌های فیزیک مدرن نظیر نظریه‌ی میدان کوانتومی و مکانیک آماری، بسیار قدرتمند هستند. در این کتاب هنگامی که راجع به اثر آهارانوف- بوهم به بحث می پردازیم، مجدداً به روش انتگرال مسیر بازمی گردیم.

۶.۲ پتانسیل‌ها و تبدیلات پیمانه‌ای

پتانسیل‌های ثابت

در مکانیک کلاسیک نقطه‌ی صفر انرژی پتانسیل اهمیت فیزیکی ندارد. وابستگی زمانی متغیرهای دینامیکی نظیر $\mathbf{x}(t)$ و $\mathbf{L}(t)$ ، مستقل از آن است که پتانسیل به صورت $V(x)$ یا $V(x) + V_0$ با V_0 ثابت باشد. نیرویی که در قانون دوم نیوتون به دست می آید ناشی از گرادیان پتانسیل است، واضح است که

* خواننده در مسأله‌ی ۲-۳۱ با حل مسئله‌ی نوسان گر هماهنگ ساده از طریق انتگرال مسیر فاینمن درگیر خواهد شد.

افزودن یک ثابت به این پتانسیل بی‌اهمیت خواهد بود. اما وضعیت مشابه این مسأله، در مکانیک کوانتومی چیست؟

توجه خود را به تحول زمانی یک کت حالت در تصویر شرودینگر، که با پتانسیلی برهم‌کنش دارد، معطوف می‌کنیم. $|\alpha, t_0; t\rangle$ را به‌عنوان کت حالت در حضور $V(x)$ در نظر می‌گیریم و $|\alpha, t_0; t\rangle$ را کت حالت متناظر با:

$$\tilde{V}(\mathbf{x}) = V(\mathbf{x}) + V_0 \quad (۱-۶-۲)$$

در نظر می‌گیریم. بگذارید که در لحظه‌ی $t = t_0$ هر دو کت حالت در $|\alpha\rangle$ باشند. اگر این دو کت معرف شرایط فیزیکی یکسان باشند، با انتخاب فاز مناسب می‌توان این یکسانی را صورت داد. یادآوری می‌کنیم که کت حالت در t را می‌توان با اعمال عملگر تحول زمانی $\mathcal{U}(t, t_0)$ به کت حالت در t_0 به‌دست آورد. داریم:

$$\begin{aligned} |\alpha, t_0; t\rangle &= \exp\left[-i\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(x) + V_0\right)\frac{(t-t_0)}{\hbar}\right]|\alpha\rangle \\ &= \exp\left[\frac{-iV_0(t-t_0)}{\hbar}\right]|\alpha, t_0; t\rangle \end{aligned}$$

(۲-۶-۲)

به‌عبارت دیگر، برای کتی که تحت تأثیر \tilde{V} قرار گرفته است، تنها در عامل فاز $\exp[-iV_0(t-t_0)/\hbar]$ ، یک اختلاف وابسته به زمان وجود دارد. برای حالت‌های پایا، به این معنی است که اگر وابستگی زمانی ناشی از $V(x)$ ، برابر با $\exp[-iE(t-t_0)/\hbar]$ باشد، آنگاه وابستگی زمانی حاصل از $V(x) + V_0$ برابر $\exp[-i(E+V_0)(t-t_0)/\hbar]$ می‌شود. به‌عبارت دیگر استفاده از \tilde{V} به‌جای V تنها تغییر متغیر زیر را به‌جا خواهد گذاشت:

$$E \rightarrow E + V_0 \quad (۳-۶-۲)$$

که احتمالاً خواننده آن را حدس زده بود. آثار قابل مشاهده‌ای نظیر تحول زمانی مقادیر چشم‌داشتی $\langle \mathbf{x} \rangle$ و $\langle \mathbf{S} \rangle$ معمولاً وابسته به اختلاف انرژی هستند [(۲-۱-۴۷) را ببینید]. فرکانس‌های بور که وابستگی زمانی سینوسی مقادیر چشم‌داشتی را مشخص می‌کنند، نظیر این هستند که از $V(x)$ یا $V(x) + V_0$ استفاده کنیم. در حالت کلی، اگر هر کتی در عالم در یک عامل عمومی $\exp[-iV_0(t-t_0)/\hbar]$ ضرب شود هیچ اختلافی در مقادیر چشم‌داشتی مشاهده‌پذیرها پیش نمی‌آید.

در این جا اولین مثال دسته‌ای از تبدیلات، که به تبدیلات پیمانه‌ای معروف‌اند، را دیدیم. در قرارداد ما، برای تغییر نقطه‌ی صفر انرژی پتانسیل:

$$V(\mathbf{x}) \rightarrow V(\mathbf{x}) + V_0 \quad (۴-۶-۲)$$

می‌بایست در کت حالت به شکل زیر تغییر ایجاد کرد:

$$|\alpha, t_0; t\rangle \rightarrow \exp\left[\frac{-iV_0(t-t_0)}{\hbar}\right] |\alpha, t_0; t\rangle \quad (۵-۶-۲)$$

البته این تغییر، منجر به تغییر در تابع موج خواهد شد:

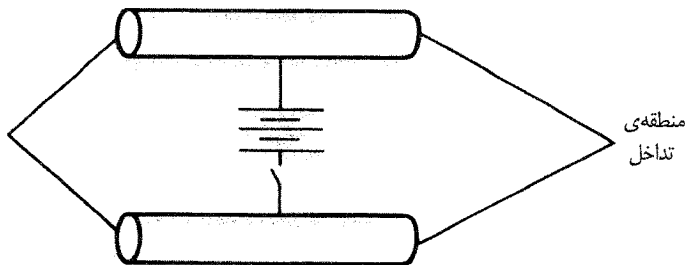
$$\psi(\mathbf{x}', t) \rightarrow \exp\left[\frac{-iV_0(t-t_0)}{\hbar}\right] \psi(\mathbf{x}', t) \quad (۶-۶-۲)$$

اکنون V_0 را به صورت یکنواخت فضایی اما وابسته به زمان در نظر می‌گیریم. به سادگی می‌بینیم که همانند (۵-۶-۲) داریم:

$$|\alpha, t_0; t\rangle \rightarrow \exp\left[-i \int_{t_0}^t dt' \frac{V_0(t')}{\hbar}\right] |\alpha, t_0; t\rangle \quad (۷-۶-۲)$$

از نظر فیزیکی، استفاده از $V(x)+V_0$ به جای $V(x)$ به این معنی است که می‌توانیم در هر لحظه از زمان یک نقطه‌ی صفر جدید را برای مقیاس انرژی انتخاب کنیم.

حتی اگر به طور دلخواه یک مقیاس مطلق را انتخاب کنیم، اختلاف پتانسیل دارای اهمیت فیزیکی است. این نکته با روش بسیار ظریفی قابل آشکار سازی است. برای روشن ساختن این مطلب، بگذارید تا شکل ۴-۲ را در نظر بگیریم. در این شکل یک پرتو از ذرات باردار به دو قسمت تقسیم می‌شود و هر کدام از آن‌ها به قفسه‌ای فلزی وارد می‌شوند. همان‌طور که نشان داده است با وصل کردن یک کلید می‌توانیم اختلاف پتانسیلی بین دو قفسه برقرار کنیم. یک ذره در پرتو را می‌توان با بسته موجی که ابعاد آن بسیار کوچک‌تر از ابعاد قفسه است، نشان داد. فرض می‌کنیم که تنها پس از اینکه بسته موج به قفسه وارد شد، اختلاف پتانسیل برقرار می‌شود و پیش از ترک قفسه توسط بسته موج، این پتانسیل قطع می‌گردد. ذره در قفسه با نیرویی مواجه نمی‌شود، چون در داخل قفسه هیچ‌گونه میدان الکتریکی وجود ندارد. اکنون اجازه می‌دهیم تا دو مؤلفه‌ی پرتو در ناحیه‌ی تداخل شکل ۴-۲ دوباره با هم ترکیب شوند.



شکل ۲-۴: تداخل کوانتومی برای آشکارسازی یک اختلاف پتانسیل.

به خاطر وجود پتانسیل، همان‌طور که در (۲-۶-۷) دیدیم هر کدام از مؤلفه‌ها یک تغییر فاز یافته‌اند. به‌عنوان یک نتیجه، یک جمله‌ی تداخلی قابل مشاهده در شدت پرتو، در ناحیه‌ی تداخلی به‌وجود می‌آید که به‌صورت زیر نمایش داده می‌شود:

$$\cos(\phi_1 - \phi_2), \quad \sin(\phi_1 - \phi_2) \quad (۲-۶-۸)$$

که در آن

$$\phi_1 - \phi_2 = \left(\frac{1}{\hbar} \right) \int_{t_i}^{t_f} dt [V_2(t) - V_1(t)] \quad (۲-۶-۹)$$

بنابراین اگر چه ذرات تحت تأثیر نیروی قرار نمی‌گیرند اما باز هم اثر قابل مشاهده‌ای که وابسته به $V_2(t) - V_1(t)$ است بر آن‌ها اعمال می‌شود. توجه کنید که این اثر کاملاً کوانتومی است. در حد $\hbar \rightarrow 0$ اثر تداخل از بین می‌رود چون کسینوس با سرعت بی‌نهایت نوسان می‌کند.*

گرانش در مکانیک کوانتومی

آزمایشی وجود دارد که با روشی ظریف چگونگی بروز اثر گرانش را در مکانیک کوانتومی نشان می‌دهد. قبل از توضیح این آزمایش، ابتدا به شرح مختصری درباره‌ی نقش گرانش در مکانیک کوانتومی و کلاسیکی می‌پردازیم.

مسأله‌ی کلاسیکی سقوط آزاد ایده‌آل یک جسم را در نظر بگیرید:

$$m\ddot{x} = -m\nabla\Phi_{\text{grav}} = -mg\hat{z} \quad (۲-۶-۱۰)$$

جرم از دو طرف معادله حذف می‌شود. بنابراین تحت تأثیر گرانش و در غیاب مقاومت هوا، یک پر و یک سنگ رفتار یکسانی را بروز می‌دهند (همان‌طور که گالیله گفته است). البته این، نتیجه‌ی برابری جرم

* این آزمایش ذهنی مینکوفسکی - روتاند از آزمایش آهارانوف-بوهم است، که در همین فصل مورد بحث قرار می‌گیرد.

گرانشی و جرم اینرسی است. از آن جا که در معادله‌ی مسیر یک ذره، جرم ظاهر نمی‌شود، گرانش در مکانیک کلاسیک غالباً یک نظریه‌ی کاملاً هندسی انگار می‌شود.

وضعیت در مکانیک کوانتومی نسبتاً متفاوت است. در فرمول‌بندی مکانیک موجی، رابطه‌ی معادل با (۲-۶-۱۰)، عبارت است از:

$$\left[-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\nabla^2 + m\Phi_{\text{grav}} \right] \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (11-6-2)$$

در این جا جرم حذف نمی‌شود. در عوض به شکل ترکیب \hbar/m ظاهر می‌شود. بنابراین انتظار می‌رود، مسأله‌ی که \hbar در آن ظاهر می‌گردد، m را هم در خود داشته باشد. می‌توانیم با بهره‌گیری از فرمول‌بندی انتگرال مسیر فاینمن نیز برای یک جسم در حال سقوط این مسأله را ببینیم:

$$\langle \mathbf{x}_n, t_n | \mathbf{x}_{n-1}, t_{n-1} \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \exp \left[i \int_{t_{n-1}}^{t_n} dt \frac{(\frac{1}{2} m \dot{\mathbf{x}}^2 - mgz)}{\hbar} \right] \\ (t_n - t_{n-1} = \Delta t \rightarrow 0) \quad (12-6-2)$$

در این جا دوباره می‌بینیم که m به صورت ترکیب m/\hbar ظاهر شده است. این مسأله با آنچه که از هامیلتونی کلاسیکی به شکل زیر به دست می‌آید، اختلاف آشکاری دارد:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt \left(\frac{m \dot{\mathbf{x}}^2}{2} - mgz \right) = 0 \quad (13-6-2)$$

که در آن m ، در همان آغاز حذف می‌شود.

با شروع از معادله‌ی شرو دینگر (۲-۶-۱۱) می‌توانیم قضیه‌ی اهرنفتست را استخراج کنیم:

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle \mathbf{x} \rangle = -g \hat{\mathbf{z}} \quad (14-6-2)$$

هر چند \hbar در این جا ظاهر نشده است، اما m هم در آن وجود ندارد. برای دیدن یک اثر کوانتومی غیربدهی گرانش می‌بایست اثراتی را مطالعه کنیم که در آن برخلاف پدیده‌های کاملاً گرانشی در مکانیک کلاسیک، \hbar (و به تبع آن همان‌طور که انتظار داریم، جرم) ظاهر شده باشد.

تا سال ۱۹۷۵، آزمایش مستقیمی که نشان‌دهنده‌ی حضور جمله‌ی $m\Phi_{\text{grav}}$ در (۲-۶-۱۱) باشد انجام نشده بود. مطمئناً برای مسئله‌ی سقوط آزاد ذره‌ای بنیادی، معادلات حرکت کلاسیکی (یا قضیه‌ی اهرنفتست) (۲-۶-۱۴) که در آن \hbar ظاهر نمی‌شود) کفایت می‌کرد. در آزمایش مشهور "جرم فوتون" وی. پاوند و

همکارانش، گرانش را در حوزه‌ی کوانتومی آزمایش نکردند، چون آن‌ها انتقال فرکانس را اندازه‌گیری نمودند که در آن \hbar به‌طور صریح ظاهر نشده بود.

در مقیاس میکروسکوپی، نیروهای گرانشی به نسبت سایر مشاهده‌پذیرها بسیار کوچک‌اند. برای نشان دادن سختی مشاهده‌ی گرانش، که در مسئله‌های حالت‌های مقید وجود دارد، بگذارید حالت پایه‌ی یک الکترون و یک نوترون را که در قید نیروهای گرانشی هستند، در نظر بگیریم. این مسأله‌ی گرانشی نظیر مسأله‌ی اتم هیدروژن است که در آن الکترون و پروتون در قید نیروی کلمبی هستند. در فواصل یکسان، نیروی گرانشی بین الکترون و نوترون از مرتبه‌ی 2×10^{39} بار ضعیف‌تر از نیروی کلمبی بین پروتون و الکترون است. شعاع بور در این جا به‌شکل زیر به‌دست می‌آید:

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{e^2 m_e} \rightarrow \frac{\hbar^2}{G_N m_e^2 m_n} \quad (15-6-2)$$

که در آن G_N ثابت گرانشی نیوتون است. اگر در این معادله، مقادیر عددی قرار دهیم، شعاع بور برای سیستم‌هایی با قید گرانشی به‌اندازه‌ی 10^{31} سانتی‌متر یا 10^{13} سال نوری خواهد بود که این فاصله به‌اندازه چند مرتبه، از شعاع تخمینی جهان بزرگ‌تر خواهد.

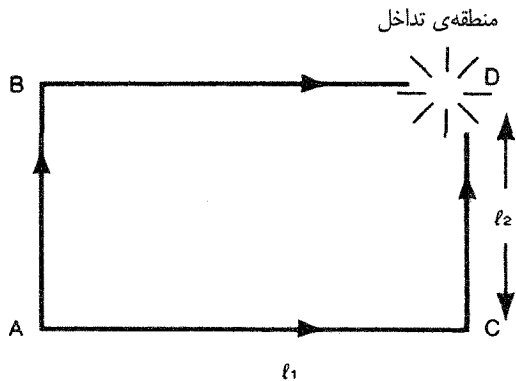
اکنون درباره‌ی پدیده‌ی قابل تخمینی بحث می‌کنیم که به تداخل کوانتومی ناشی از گرانش معروف است. یک پرتو از ذرات تقریباً هم انرژی (در عمل، نوترون‌های گرمایی) را به دو قسمت تقسیم می‌کنیم و سپس آن‌ها را آنچنان که در شکل ۲-۵ نشان داده شده است به هم می‌رسانیم. در آزمایش عملی، نوترون‌ها جدا شده و سپس توسط بلورهای سیلیکون، خم می‌شوند. اما در این جا جزئیات هنر زیبای تداخل سنجی نوترون، مورد بحث ما نیست. از آن جا که اندازه‌ی بسته موج بسیار کوچک‌تر از اندازه‌ی ماکروسکوپی یک حلقه‌ای است که توسط دو مسیر تشکیل می‌شود، می‌توانیم مفهوم مسیر کلاسیکی را اعمال کنیم. ابتدا بگذارید مسیر $A \rightarrow B \rightarrow D$ و مسیر $A \rightarrow C \rightarrow D$ را در یک صفحه‌ی افقی در نظر بگیریم. از آن جا که تعیین صفر مطلق پتانسیل گرانشی بی‌اهمیت است، برای هر پدیده‌ای که در این صفحه رخ دهد، V را برابر صفر قرار می‌دهیم. به‌عبارت دیگر از گرانش صرف‌نظر می‌کنیم. اما اگر صفحه‌ای که دو مسیر در آن قرار گرفته‌اند را به‌اندازه‌ی δ حول خط AC بچرخانیم وضعیت کاملاً متفاوت خواهد بود. این بار پتانسیل در BD به‌اندازه‌ی $mgl_2 \sin \delta$ بالاتر از پتانسیل در AC خواهد بود. به این معنی که، کت حالت متناظر با مسیر BD ، "سریع‌تر می‌چرخد". این قضیه منجر به اختلاف فاز ناشی از گرانش بین دامنه‌های دو بسته موجی می‌شود که به D می‌رسند. در عمل تغییر فازی بین AB و CD نیز وجود دارد، اما چون این دو مسیر

را با هم مقایسه می‌کنیم، این تغییر فاز حذف می‌شود. نتیجه کل شبکه این است که بسته موجی که از راه ABD به D می‌رسد نسبت به بسته موجی که از ACD به D می‌رسد تغییر فازی به اندازه‌ی زیر می‌یابد:

$$\exp\left[\frac{-im_n g l_2 \sin \delta T}{\hbar}\right] \quad (۱۶-۶-۲)$$

که در آن T زمانی است که بسته موج صرف رسیدن از B به D (یا از A به C) می‌کند و m_n جرم نوترون است. می‌توانیم با چرخاندن صفحه‌ی شکل ۲-۵، این اختلاف فاز را در اختیار خود بگیریم. δ از ۰ تا $\pi/2$ یا از 0 تا $-\pi/2$ تغییر می‌کند. با نوشتن T یا بسته موج l_1/v بر حسب λ (طول موج دوپروی نوترون)، عبارت زیر برای اختلاف فاز به دست می‌آید:

$$\phi_{ABD} - \phi_{ACD} = -\frac{(m_n^2 g l_1 l_2 \lambda \sin \delta)}{\hbar^2} \quad (۱۷-۶-۲)$$



شکل ۲-۵: آزمایشی برای مشخص کردن تداخل کوانتومی ناشی از گرانش.

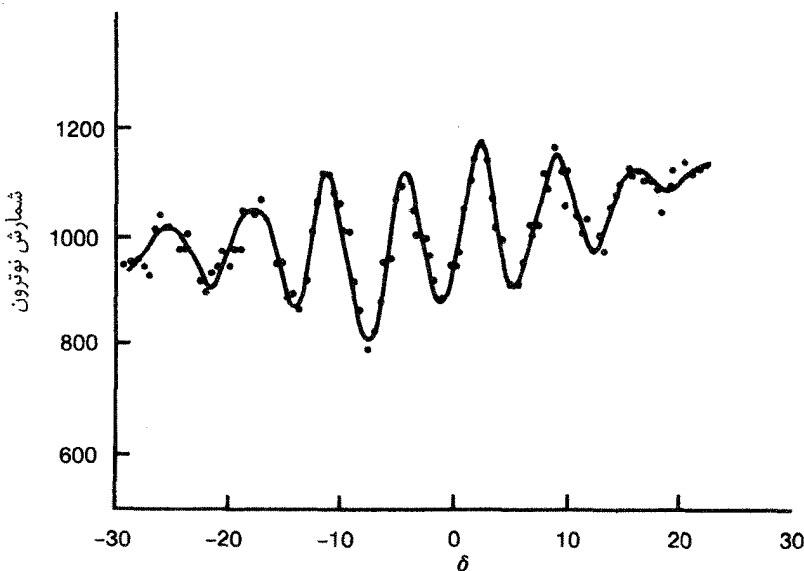
به این صورت اثر تداخل قابل مشاهده‌ای که وابسته به زاویه δ است را پیش‌بینی کرده‌ایم. این رابطه یادآور فریزهای تداخلی اپتیکی در آزمایش مایکلسون است.

روش دیگری که در ادامه می‌آید از طریق مکانیک موجی به درک رابطه‌ی (۱۷-۶-۲) می‌انجامد، چون ما با یک پتانسیل مستقل از زمان سرو کار داریم، جمع انرژی جنبشی و انرژی پتانسیل همواره ثابت می‌ماند:

$$\frac{p^2}{2m} + mgz = E \quad (۱۸-۶-۲)$$

اختلاف ارتفاع بین سطح BD و AC به اختلاف اندکی در p یا λ می‌انجامد. به‌عنوان یک نتیجه، جمع اختلاف فازها، منجر به اختلاف λ می‌شود. این روش از طریق مکانیک موجی منجر به رابطه‌ی (۲-۶-۱۷) می‌شود. اثبات این مطلب را، به‌عنوان تمرین به خواننده واگذار می‌کنیم.

نکته‌ی جالبی در مورد (۲-۶-۱۷) وجود دارد این است که بزرگی آن نه زیاد کوچک است و نه زیاد بزرگ. برای آشکار شدن این اثر در نوترون‌های حرارتی که از "مسیر بالایی" می‌آیند، این اندازه کاملاً مناسب است. برای $\lambda = 1.42 \text{ \AA}$ (قابل مقایسه با فضای بین اتمی در سیلیکون) و $l_1 l_2 = 10 \text{ cm}^2$ ، برای $m_n^2 g l_1 l_2 \lambda / \hbar^2$ مقدار $55.6 / 2\pi \approx 9$ بار نوسان ببینیم. این چنین اثری در آزمایش دیده شده است. شکل ۲-۶ را ببینید. این شکل در سال ۱۹۷۵ از آزمایش آر. کوللا، ای. اُرهوزر و اس.ای. ورنر بدست آمده است. دیده می‌شود که در این شکل اختلاف فاز ناشی از گرانش با دقت ۱٪ با فرمول تطابق دارد.



شکل ۲-۶: وابستگی فاز ناشی از گرانش به زاویه‌ی چرخش δ

تأکید می‌کنیم که این اثر کاملاً کوانتومی است. چون به‌ازای $\hbar \rightarrow 0$ ، الگوی تداخلی از بین می‌رود. پتانسیل گرانشی به‌همان صورتی که انتظار می‌رفت در معادله‌ی شرودینگر وارد شد. این آزمایش همچنین نشان می‌دهد که گرانش در سطح کوانتومی به‌هیچ‌وجه هندسی نیست. چون این اثر وابسته به $(m/\hbar)^2$ است.*

* یا این حال، این منجر به این نمی‌شود که مفهوم هم‌ارزی در فهمیدن اثری از این نوع بی‌اهمیت است. اگر جرم گرانشی (m_{grav}) و جرم اینرسی (m_{inert}) برابر باشند، $(m/\hbar)^2$ یا $m_{\text{grav}} m_{\text{inert}} / \hbar^2$ تعویض می‌شود. این واقعیت که نقش تداخل را بدون تفاوت قائل شدن بین m_{inert} و m_{grav} پیش‌بینی می‌کنیم، نشان‌دهنده‌ی اصل هم‌ارزی در سطح کوانتومی است.

تبدیلات پیمانه‌ای در الکترومغناطیس

بگذارید تا به پتانسیل‌هایی که در الکترومغناطیس ظاهر می‌شوند، بازگردیم. یک میدان الکتریکی و یک میدان مغناطیسی که از پتانسیل‌های نرده‌ای و برداری، $\phi(\mathbf{x})$ و $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ مشتق می‌شوند را در نظر می‌گیریم:

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (19-6-2)$$

هامیلتونی برای یک بار نقطه‌ای e (برای الکترون $e < 0$ است) که در یک میدان الکترومغناطیسی قرار دارد، در فیزیک کلاسیکی برابر است با:

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c} \right)^2 + e\phi \quad (20-6-2)$$

در مکانیک کوانتومی ϕ و \mathbf{A} را به‌عنوان تابعی از عملگر مکان \mathbf{x} ذره‌ی باردار می‌شناسیم. از آن‌جا که \mathbf{p} و \mathbf{A} جا به جا نمی‌شوند، در تفسیر (20-6-2) به دقت بیشتری نیاز است. مطمئن‌ترین روش این است که بنویسیم:

$$\left(\mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c} \right)^2 \rightarrow p^2 - \left(\frac{e}{c} \right) (\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) + \left(\frac{e}{c} \right)^2 \mathbf{A}^2 \quad (21-6-2)$$

واضح است که هامیلتونی به این شکل، هرمیتی است.

برای مطالعه‌ی دینامیک ذره‌ی بارداری که با ϕ و \mathbf{A} درگیر است، بگذارید تا ابتدا در تصویر هایزنبرگ اقدام کنیم. مشتق زمانی \mathbf{x} را به‌صورت سراسر به‌شکل زیر محاسبه می‌کنیم:

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{[x_i, H]}{i\hbar} = \frac{(p_i - eA_i/c)}{m} \quad (22-6-2)$$

که در آن عملگر \mathbf{p} ، که در این کتاب به‌عنوان ایجاد کننده‌ی انتقال تعریف شد، برابر با $m d\mathbf{x}/dt$ نیست. غالباً \mathbf{p} را تکانه‌ی بندادی (کانونیک) می‌نامیم تا از تکانه‌ی سینماتیک (یا مکانیکی) که آن را با $\mathbf{\Pi}$ نشان می‌دهیم، متمایز شود:

$$\mathbf{\Pi} \equiv m \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c} \quad (23-6-2)$$

اگرچه برای تکانه‌ی کانونیک داریم:

$$[p_i, p_j] = 0 \quad (24-6-2)$$

اما برای تکانه‌ی مکانیکی، جابه‌جایی مشابه صفر نمی‌شود. در عوض داریم:

$$[\Pi_i, \Pi_j] = \left(\frac{i\hbar e}{c} \right) \varepsilon_{ijk} B_k \quad (25-6-2)$$

که خواننده به راحتی می‌تواند آن را به دست آورد. هامیلتونی را دوباره به شکل زیر می‌نویسیم:

$$H = \frac{\Pi^2}{2m} + e\phi \quad (26-6-2)$$

و با استفاده از رابطه‌ی بنیادی جابه‌جایی، می‌توانیم گونه‌ی کوانتومی نیروی لورنتس را به شکل زیر به دست آوریم:

$$m \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = \frac{d\Pi}{dt} = e \left[\mathbf{E} + \frac{1}{2c} \left(\frac{d\mathbf{x}}{dt} \times \mathbf{B} - \mathbf{B} \times \frac{d\mathbf{x}}{dt} \right) \right] \quad (27-6-2)$$

این همان معادله‌ی اهرنفتست در تصویر هایزنبرگ برای ذره‌ای در حضور میدان‌های \mathbf{E} و \mathbf{B} است.

اکنون معادله‌ی موج شرودینگر با Φ و \mathbf{A} را مورد مطالعه قرار می‌دهیم. نخستین کار ما ساندویچ کردن

بین $\langle \mathbf{x}' |$ و $|\alpha, t_0; t\rangle$ است. تنها جمله‌ای که می‌بایست در محاسبه‌ی آن دقت کنیم، جمله‌ی زیر است:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}' | \left[\mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}(\mathbf{x})}{c} \right]^2 | \alpha, t_0; t \rangle \\ &= \left[-i\hbar \nabla' - \frac{e\mathbf{A}(\mathbf{x}')}{c} \right] \langle \mathbf{x}' | \left[\mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}(\mathbf{x})}{c} \right] | \alpha, t_0; t \rangle \\ &= \left[-i\hbar \nabla' - \frac{e\mathbf{A}(\mathbf{x}')}{c} \right] \cdot \left[-i\hbar \nabla' - \frac{e\mathbf{A}(\mathbf{x}')}{c} \right] \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle \end{aligned} \quad (28-6-2)$$

تأکید می‌کنیم که نخستین ∇' در آخرین خط، از هر دو عبارت $\langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle$ و $\mathbf{A}(\mathbf{x}')$ مشتق می‌گیرد. با یک جمع بندی داریم:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m} \left[-i\hbar \nabla' - \frac{e\mathbf{A}(\mathbf{x}')}{c} \right] \cdot \left[-i\hbar \nabla' - \frac{e\mathbf{A}(\mathbf{x}')}{c} \right] \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle \\ + e\phi(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle \end{aligned} \quad (29-6-2)$$

از این عبارت به سرعت می‌توانیم معادله‌ی پیوستگی را به دست آوریم:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla' \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (30-6-2)$$

که ρ همانند قبل برابر با $|\psi|^2$ است که در آن $\langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle$ را به عنوان ψ می نویسیم اما برای شار احتمال \mathbf{j} داریم:

$$\mathbf{j} = \left(\frac{\hbar}{m} \right) \text{Im}(\psi^* \nabla \psi) - \left(\frac{e}{mc} \right) \mathbf{A} |\psi|^2 \quad (۳۱-۶-۲)$$

که دقیقاً همان شکلی است که از تبدیل زیر انتظار می رفت:

$$\nabla' \rightarrow \nabla' - \left(\frac{ie}{\hbar c} \right) \mathbf{A} \quad (۳۲-۶-۲)$$

با نوشتن تابع موج به شکل $\sqrt{\rho} \exp(iS/\hbar)$ [(۲-۴-۱۸) را ببینید] شکل متفاوتی برای \mathbf{j} به دست می آوریم:

$$\mathbf{j} = \left(\frac{\rho}{m} \right) \left(\nabla S - \frac{e\mathbf{A}}{c} \right) \quad (۳۳-۶-۲)$$

که با (۲-۶-۲۰) قابل مقایسه است. خواهیم دید که این شکل در بحث های ابر رسانایی، کوانتس شار و نظایر آنها کاربرد دارد. اغلب یادآوری می کنیم که انتگرال فضایی \mathbf{j} ، برابر با مقدار انتظاری تکانه ی سینماتیکی (نه تکانه ی کانونیک)، صرف نظر از $1/m$ است:

$$\int d^3x' \mathbf{j} = \frac{\langle \mathbf{p} - e\mathbf{A}/c \rangle}{m} = \langle \Pi \rangle / m \quad (۳۴-۶-۲)$$

اکنون در موقعیتی هستیم که می توانیم راجع به تبدیلات پیمانه ای در الکترو دینامیک بحث کنیم. نخست فرض کنید:

$$\phi \rightarrow \phi + \lambda, \quad \mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} \quad (۳۵-۶-۲)$$

که λ ثابت یعنی مستقل از \mathbf{x} و t است. واضح است که هم \mathbf{E} و هم \mathbf{B} بدون تغییر می مانند. این تبدیل به معنی تغییر نقطه ی صفر مقیاس انرژی است. امکانی که در آغاز این فصل مورد بررسی قرار گرفت. ما تنها V را با $e\phi$ جایگزین می کنیم. قبلاً راجع به تغییری که باید روی کت حالت انجام دهیم بحث کردیم. بنابراین در مورد تبدیل به بحث بیشتری نمی پردازیم.

مورد جذاب تر تبدیل:

$$\phi \rightarrow \phi, \quad \mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla \Lambda \quad (۳۶-۶-۲)$$

است. که در آن Λ تابعی از \mathbf{x} است. پس از تغییر (۲-۶-۳۶)، میدان های ایستای الکترومغناطیسی \mathbf{E} و \mathbf{B} بدون تغییر می مانند. هم (۲-۶-۳۵) و هم (۲-۶-۳۶) موارد خاصی از

$$\phi \rightarrow \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \Lambda}{\partial t}, \quad \mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla \Lambda \quad (۳۷-۶-۲)$$

هستند. که در آن \mathbf{E} و \mathbf{B} که از روابط زیر به دست می آیند:

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (38-6-2)$$

بدون تغییر می ماند. در ادامه با میدان ها و پتانسیل های وابسته به زمان کاری نداریم. در بخش های باقیمانده این فصل، منظور ما از تبدیل پیمانه ای رابطه ی (2-6-36) خواهد بود.

در فیزیک کلاسیک آثار قابل مشاهده، مانند مسیر یک ذره ی باردار، مستقل از پیمانه ای مورد استفاده است. یعنی مستقل از انتخاب خاص Λ است. یک ذره ی باردار را در یک میدان مغناطیسی در راستای z در نظر بگیرد:

$$\mathbf{B} = B\hat{z} \quad (39-6-2)$$

این میدان مغناطیسی می تواند از پتانسیل زیر مشتق شود:

$$A_x = \frac{-By}{2}, \quad A_y = \frac{Bx}{2}, \quad A_z = 0 \quad (40-6-2)$$

همچنین می تواند از:

$$A_x = -By, \quad A_y = 0, \quad A_z = 0 \quad (41-6-2)$$

ناشی شود. شکل دوم را می توان با استفاده از رابطه ی زیر از اولی به دست آورد:

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} - \nabla \left(\frac{Bxy}{2} \right) \quad (42-6-2)$$

که در واقع به شکل (2-6-36) است. بدون توجه به این که کدام \mathbf{A} را مورد استفاده قرار دهیم، مسیر ذره ی باردار با شرایط اولیه ی داده شده، یکسان است. این حرکت به شکل یک مارپیچ است که به صورت حرکت دایره ای یکنواختی که روی صفحه ی xy شده و با یک حرکت خطی در راستای z توأم می شود، صورت می پذیرد. اگر هنوز به p_x و p_y نگاه کنیم، نتایج بسیار متفاوت است. وقتی از (2-6-41) استفاده کنیم p_x ثابت حرکت است، اما وقتی (2-6-40) مورد استفاده واقع شود این مطلب صادق نیست.

یادآوری می کنیم که معادلات هامیلتونی حرکت عبارتند از:

$$\frac{dp_x}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x}, \quad \frac{dp_y}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial y}, \dots \quad (43-6-2)$$

در حالت کلی، تکانه ی کانونیک \mathbf{p} ، یک کمیت ناوردای پیمانه ای نیست. مقدار عددی این کمیت وابسته به پیمانه ای خاصی است که مورد استفاده واقع می شود. حتی اگر از پیمانه های مختلف حالت های فیزیکی یکسانی نتیجه شود. در مقابل تکانه ی سیستماتیک Π ، یا $md\mathbf{x}/dt$ که بیانگر مسیر ذره است، همان طور که

انتظار داریم یک کمیت ناوردای پیمانه‌ای است. از آن‌جا که \mathbf{p} و $m\mathbf{dx}/dt$ با (۲-۶-۲۳) بهم وابسته‌اند، \mathbf{p} می‌بایست با توجه به تغییر در \mathbf{A} که با (۲-۶-۴۲) به دست می‌آید، تغییر کند.

اکنون به مکانیک کوانتومی بازمی‌گردیم. ما معتقدیم که منطقی است اگر، مقادیر انتظاری در مکانیک کوانتومی شبیه به متناظرهای کلاسیکی خود تحت تبدیلات پیمانه‌ای بدون تغییر بمانند. بنابراین $\langle \mathbf{x} \rangle$ و $\langle \Pi \rangle$ تحت تبدیلات پیمانه‌ای تغییر نمی‌کنند، در حالی که انتظار می‌رود $\langle \mathbf{p} \rangle$ تغییر کند.

بگذارید تا کت حالت در حضور \mathbf{A} را با $|\alpha\rangle$ تعریف کنیم. کت حالت برای وضعیت فیزیکی مشابه وقتی که

$$\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A} + \nabla\Lambda \quad (۲-۶-۴۴)$$

است با $|\tilde{\alpha}\rangle$ نشان داده می‌شود. در این‌جا Λ ، همانند \mathbf{A} ، تابعی از عملگر مکان \mathbf{x} است. الزام‌های اصلی ما عبارتند از:

$$\langle \alpha | \mathbf{x} | \alpha \rangle = \langle \tilde{\alpha} | \mathbf{x} | \tilde{\alpha} \rangle \quad (۲-۶-۴۵ \text{ الف})$$

و

$$\langle \alpha | \left(\mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c} \right) | \alpha \rangle = \langle \tilde{\alpha} | \left(\mathbf{p} - \frac{e\tilde{\mathbf{A}}}{c} \right) | \tilde{\alpha} \rangle \quad (۲-۶-۴۵ \text{ ب})$$

به‌علاوه، طبق معمول، احتیاج داریم که بهنجارش کت حالت برقرار باشد:

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = \langle \tilde{\alpha} | \tilde{\alpha} \rangle \quad (۲-۶-۴۶)$$

می‌باید عملگر \mathcal{G} را برای ارتباط $|\alpha\rangle$ با $|\tilde{\alpha}\rangle$ تشکیل دهیم:

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \mathcal{G}|\alpha\rangle \quad (۲-۶-۴۷)$$

خواص ناوردایی (۲-۶-۴۵ الف) و (۲-۶-۴۵ ب) وقتی تضمین می‌شوند که:

$$\mathcal{G}^\dagger \mathbf{x} \mathcal{G} = \mathbf{x} \quad (۲-۶-۴۸ \text{ الف})$$

و

$$\mathcal{G}^\dagger \left(\mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c} - \frac{e\nabla\Lambda}{c} \right) \mathcal{G} = \mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c} \quad (۲-۶-۴۸ \text{ ب})$$

ادعا می‌کنیم که:

$$\mathcal{G} = \exp \left[\frac{ie\Lambda(\mathbf{x})}{\hbar c} \right] \quad (۲-۶-۴۹)$$

این کار را انجام خواهیم داد. نخست \mathcal{U} یکانی است، بنابراین (۲-۶-۴۶) همواره درست است. دوم، بهوضوح (۲-۶-۴۸ الف) برقرار است چون \mathbf{x} با هر تابعی از \mathbf{x} جابه‌جا می‌شود. همین‌طور برای (۲-۶-۴۸ ب) توجه کنید که

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{-ie\Lambda}{\hbar c}\right) \mathbf{p} \exp\left(\frac{ie\Lambda}{\hbar c}\right) &= \exp\left(\frac{-ie\Lambda}{\hbar c}\right) \left[\mathbf{p}, \exp\left(\frac{ie\Lambda}{\hbar c}\right) \right] + \mathbf{p} \\ &= -\exp\left(\frac{-ie\Lambda}{\hbar c}\right) i\hbar \nabla \left[\exp\left(\frac{ie\Lambda}{\hbar c}\right) \right] + \mathbf{p} \\ &= \mathbf{p} + \frac{e\nabla\Lambda}{c}, \end{aligned} \quad (۲-۶-۵۰)$$

که در آن از (۲-۲-۲۳ ب) بهره بردیم.

با نگاه مستقیم به معادله‌ی شرودینگر، ناوردایی مکانیک کوانتومی تحت تبدیلات پیمانه‌ای معلوم می‌گردد. بگذارید $|\alpha, t_0; t\rangle$ را به‌عنوان یک جواب معادله‌ی شرودینگر در حضور A در نظر بگیریم:

$$\left[\frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A}/c)^2}{2m} + e\phi \right] |\alpha, t_0; t\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0; t\rangle \quad (۲-۶-۵۱)$$

پاسخ متناظر در حضور A باید در رابطه‌ی زیر صدق کند:

$$\left[\frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A}/c - e\nabla\Lambda/c)^2}{2m} + e\phi \right] \widetilde{|\alpha, t_0; t\rangle} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \widetilde{|\alpha, t_0; t\rangle} \quad (۲-۶-۵۲)$$

می‌بینیم که اثر کت جدید با رابطه‌ی زیر داده شود:

$$\widetilde{|\alpha, t_0; t\rangle} = \exp\left(\frac{ie\Lambda}{\hbar c}\right) |\alpha, t_0; t\rangle \quad (۲-۶-۵۳)$$

طبق (۲-۶-۴۹)، معادله‌ی شرودینگر جدید (۲-۶-۵۲)، صادق خواهد بود. تنها باید توجه کنیم که

$$\exp\left(\frac{-ie\Lambda}{\hbar c}\right) \left(\mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c} - \frac{e\nabla\Lambda}{c} \right)^2 \exp\left(\frac{ie\Lambda}{\hbar c}\right) = \left(\mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c} \right)^2 \quad (۲-۶-۵۴)$$

که از دوباره به کار بستن (۲-۶-۵۰) به‌دست می‌آید.

معادله‌ی (۲-۶-۵۳) همچنین بیان می‌کند که معادله‌ی موج متناظر وابسته به رابطه‌ی زیر است:

$$\tilde{\psi}(\mathbf{x}', t) = \exp\left[\frac{ie\Lambda(\mathbf{x}')}{\hbar c}\right] \psi(\mathbf{x}', t) \quad (۲-۶-۵۵)$$

که در آن $\Lambda(\mathbf{x}')$ تابعی حقیقی از ویژه مقادیر بردار مکان \mathbf{x}' است. البته می توان این رابطه را با جایگذاری مستقیم (۲-۶-۵۵) در معادله‌ی شرودینگر و به کار بردن $\mathbf{A} + \nabla\Lambda$ به جای \mathbf{A} به دست آورد. برحسب ρ و S می بینیم که p بدون تغییر می ماند. اما S مطابق رابطه‌ی زیر اصلاح می شود:

$$S \rightarrow S + \frac{e\Lambda}{c} \quad (۲-۶-۵۶)$$

این مسأله بسیار رضایت بخش است. چون نشان می دهد که شار احتمال به دست آمده از رابطه‌ی (۲-۶-۳۳) ناوردای پیمانه‌ای است.

به طور خلاصه و برای جمع بندی می گوئیم، وقتی که پتانسیل های برداری مختلف در پیمانه های متفاوت برای یک حالت فیزیکی یکسان به کار برده می شوند، کت های حالت (یا توابع موج) متناظر می بایست مختلف باشند. اما فقط یک تغییر ساده مورد نیاز است. می توانیم از پیمانه ای که در آن \mathbf{A} برقرار است به پیمانه ای دیگری که در آن $\mathbf{A} + \nabla\Lambda$ برقرار است برویم، به شرطی که کت قدیمی (تابع موج قدیمی) را در $\exp[ie\Lambda(\mathbf{x}')/\hbar c]$ ضرب کنیم. **تکانه ی کانونیک**، که به عنوان ایجاد کننده ی انتقال تعریف شد، آشکارا وابسته به پیمانه است به طوری که مقدار انتظاری آن با توجه به پیمانه ای انتخاب شده به دست می آید، در حالی که **تکانه ی سینماتیک** و شار احتمال ناوردای پیمانه ای هستند.

خواننده ممکن است تعجب کند که چرا ناوردایی تحت (۲-۶-۴۹)، ناوردایی پیمانه ای خواننده می شود. این عبارت ترجمه ی کلمه ی آلمانی *Eichinvarianz* است که *Eich* به معنای پیمانه است. خاستگاه این عبارت قصه ای تاریخی دارد.

تابعی از مکان در $F(\mathbf{x})$: \mathbf{x} را فرض کنید. واضح است که در همسایگی این نقطه داریم:

$$F(\mathbf{x} + d\mathbf{x}) \approx F(\mathbf{x}) + (\nabla F) \cdot d\mathbf{x} \quad (۲-۶-۵۷)$$

اما فرض می کنیم که تغییری مقیاسی را از \mathbf{x} به $\mathbf{x} + d\mathbf{x}$ به صورت زیر به آن اعمال می کنیم:

$$1|_{\text{at } \mathbf{x}} \rightarrow [1 + \Sigma(\mathbf{x}) \cdot d\mathbf{x}]|_{\text{at } \mathbf{x} + d\mathbf{x}} \quad (۲-۶-۵۸)$$

می بایست $F(\mathbf{x})$ را به صورت زیر دوباره مقیاس بندی کنیم:

$$F(\mathbf{x} + d\mathbf{x})|_{\text{مقیاس بندی دوباره}} \approx F(\mathbf{x}) + [(\nabla + \Sigma)F] \cdot d\mathbf{x} \quad (۲-۶-۵۹)$$

به جای (۲-۶-۵۷) ترکیب $\nabla + \Sigma$ شبیه به ترکیب ناوردای پیمانه ای

$$\nabla - \left(\frac{ie}{\hbar c} \right) \mathbf{A} \quad (۲-۶-۶۰)$$

در (۲-۶-۳۲) است، البته در غیاب i . از لحاظ تاریخی، اچ. وایل تلاش‌های ناموفقی برای تشکیل یک نظریه‌ی هندسی در الکترومغناطیس بر مبنای ناوردای پیمانه‌ای و با استفاده از یکی گرفتن تابع مقیاس $\Sigma(\mathbf{x})$ از (۲-۶-۵۸) و (۲-۶-۵۹) با خود پتانسیل برداری \mathbf{A} انجام داد. با تولد مکانیک کوانتومی، وی. فوک و اف. لندن به اهمیت ناوردای پیمانه‌ای (۲-۶-۶۰) پی بردند و با مقایسه‌ی Σ با i ضربدر \mathbf{A} کارهای پیشین وایل را یادآور شدند. ما حتی در مکانیک کوانتومی نیز همراه با عبارت "ناوردای پیمانه‌ای" می‌مانیم و نظیر (۲-۶-۵۸) می‌نویسیم:

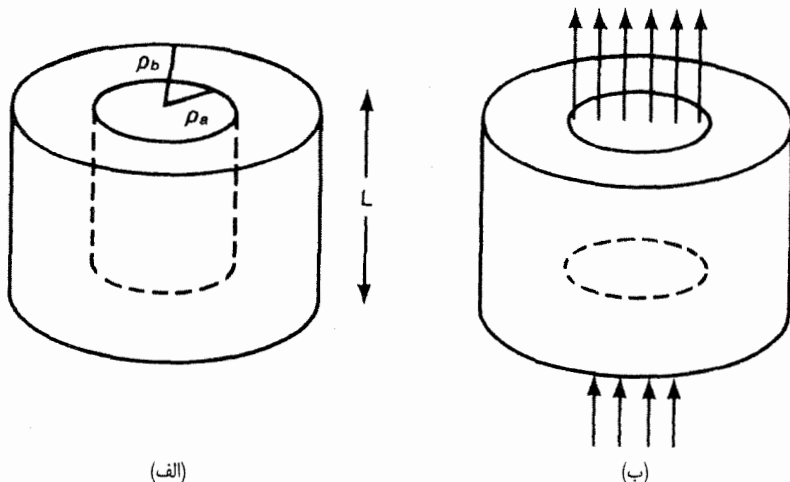
$$1 \Big|_{\text{at } \mathbf{x}} \rightarrow \left[1 - \left(\frac{ie}{\hbar c} \right) \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x} \right] \Big|_{\text{at } \mathbf{x} + d\mathbf{x}} \quad (۲-۶-۶۱)$$

که در عمل به جای "تغییر مقیاس" متناظر با "تغییر فاز" است.

اثر آهارانوف-بوهم

استفاده از پتانسیل برداری در مکانیک کوانتومی نتایج بسیار گسترده‌ای دارد. برخی از این نتایج را در این جا مورد بحث قرار می‌دهیم. با یک مسأله‌ی در ظاهر بی‌فایده کار خود را آغاز می‌کنیم.

یک پوسته‌ی استوانه‌ای تو خالی نظیر شکل ۲-۷ الف را در نظر بگیرید. فرض می‌کنیم که ذره‌ی باردار e می‌تواند به‌طور کامل در داخل این پوسته که دیواره‌های صلب دارد، گیر بیافتد. تابع موج می‌باید در روی دیواره‌های داخلی ($\rho = \rho_a$) و خارجی ($\rho = \rho_b$) و همچنین در بالا و پایین صفر شود. به‌دست آوردن ویژه مقادیر انرژی این مسأله‌ی مقدار مرزی در ریاضی فیزیک، سراسر است.



شکل ۲-۷: پوسته‌ی سوراخ استوانه‌ای. الف) بدون میدان مغناطیسی ب) با یک میدان مغناطیسی یکنواخت.

بگذارید مجموعه‌ای تغییر یافته از پوسته‌ی استوانه‌ای را طوری در نظر بگیریم که این پوسته، همان‌طور که در شکل ۲-۷ نشان داده شده است، دربرگیرنده‌ی یک میدان مغناطیسی یکنواخت باشد. می‌توانید این‌طور تصور کنید که یک سیم‌لوله‌ی خیلی طویل را در سوراخ میانی طوری قرار دهیم که میدان مغناطیسی به ناحیه‌ی $\rho \geq \rho_a$ نشت نکند. شرایط مرزی تابع موج همانند قبل مانده است و دیواره همچنان صلب فرض می‌شوند. به‌طور منطقی می‌توانیم حدس بزنیم که طیف انرژی بدون تغییر باقی می‌ماند. چون ناحیه‌ی $\mathbf{B} \neq 0$ در داخل پوسته کاملاً برای ذره‌ی باردار خارج از دسترس است. اما مکانیک کوانتومی به ما می‌گوید که این حدس درست نیست.

با وجود این که میدان در داخل پوسته صفر می‌شود، پتانسیل برداری \mathbf{A} در این ناحیه صفر نیست. با استفاده از قضیه‌ی استوکوس می‌توان دریافت که پتانسیل برداری لازم برای ایجاد میدان مغناطیسی $\mathbf{B} (= B\hat{z})$ برابر است با:

$$\mathbf{A} = \left(\frac{B\rho_a^2}{2\rho} \right) \hat{\phi} \quad (۶۲-۶-۲)$$

که در آن $\hat{\phi}$ بردار واحد در جهت افزایش زاویه‌ی سمتی است. در تلاش برای حل معادله‌ی شرودینگر برای پیدا کردن ویژه مقادیر انرژی این مسأله‌ی جدید، تنها می‌باید، جای گرادیان ∇ را با $\nabla - (ie/\hbar c)\mathbf{A}$ عوض کنیم. در مختصات استوانه‌ای این کار را با یک تغییر در مشتق جزئی برحسب ϕ به‌شکل زیر انجام می‌دهیم:

$$\frac{\partial}{\partial \phi} \rightarrow \frac{\partial}{\partial \phi} - \left(\frac{ie}{\hbar c} \right) \frac{B\rho_a^2}{2} \quad (۶۳-۶-۲)$$

یادآوری می‌کنیم که گرادیان در مختصات استوانه‌ای به‌شکل زیر است:

$$\nabla = \hat{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \hat{z} \frac{\partial}{\partial z} + \hat{\phi} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (۶۴-۶-۲)$$

با جایگذاری (۶۳-۶-۲) در رابطه‌ی بالا همان‌طور که خواننده می‌تواند صریحاً تشخیص دهد، تغییر قابل مشاهده‌ای در طیف انرژی به‌وجود می‌آید. این مسأله قابل توجهی است چون ذره به‌هیچ صورتی با میدان مغناطیسی "برخورد" نمی‌کند. نیروی لورنتس در این مسأله عیناً برابر با صفر است. با این حال ترازهای انرژی، وابسته به حضور یا عدم حضور میدان، در ناحیه‌ی تهی غیرقابل دسترس برای ذره می‌باشند.

مسئله‌ای که در این جا شرح دادیم، حالت مقید از اثری است که در حالت عمومی به آن اثر آهارنوف-بوهم می‌گویند.* اکنون در موقعیتی هستیم که می‌توانیم در مورد شکل اصلی خود اثر آهارنوف-بوهم به بحث پردازیم. همان‌طور که در شکل ۲-۸ نشان داده شده است، ذره‌ای با بار e را در نظر بگیرید که در پایین یا در بالای یک استوانه‌ای بسیار طویل نفوذناپذیر در حرکت است. در داخل استوانه یک میدان مغناطیسی موازی با محور استوانه که عمود بر صفحه‌ی شکل ۲-۸ واقع می‌شود، قرار دارد. بنابراین مسیر ذره در پایین یا در بالا، یک شار مغناطیسی را دربرمی‌گیرد. کار ما مطالعه‌ی چگونگی احتمال یافتن ذره در ناحیه‌ی تداخلی B وابسته به شار مغناطیسی است.

حتی با وجود این که، این مسئله با مقایسه‌ی جواب‌های معادله‌ی شرودینگر در حضور یا غیاب میدان، قابل حل است، اما به‌خاطر دلائل آموزشی، ترجیح می‌دهیم که از روش انتگرال مسیر فاینمن استفاده کنیم. بگذارید تا X_1 و X_N را به‌عنوان نقاطی نوعی به‌ترتیب در ناحیه‌ی منبع A و ناحیه‌ی تداخل B انتخاب کنیم. از مکانیک کلاسیک به‌یاد می‌آوریم که لاگرانژی در حضور میدان مغناطیسی، با استفاده از لاگرانژی در غیاب میدان مغناطیسی، که آن را با $L_{\text{classical}}^{(0)}$ نشان می‌دهیم، به‌صورت زیر به‌دست می‌آید:

$$L_{\text{classical}}^{(0)} = \frac{m}{2} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 \rightarrow L_{\text{classical}}^{(0)} + \frac{e}{c} \frac{dx}{dt} \cdot \mathbf{A} \quad (65-6-2)$$

تغییر متناظر در کنش برای تکه مسیر تعریف شده‌ای که از (x_{n-1}, t_{n-1}) به (x_n, t_n) می‌رود برابر است با:

$$S^{(0)}(n, n-1) \rightarrow S^{(0)}(n, n-1) + \frac{e}{c} \int_{t_{n-1}}^{t_n} dt \left(\frac{dx}{dt} \right) \cdot \mathbf{A} \quad (66-6-2)$$

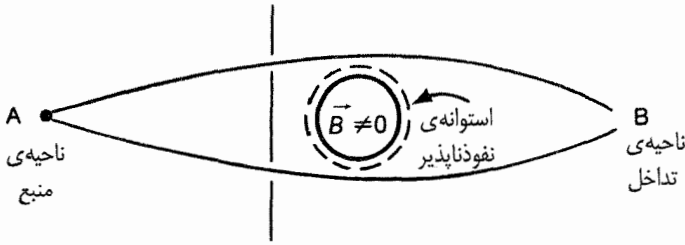
اما این انتگرال آخر را می‌توان به‌صورت زیر نوشت:

$$\frac{e}{c} \int_{t_{n-1}}^{t_n} dt \left(\frac{dx}{dt} \right) \cdot \mathbf{A} = \frac{e}{c} \int_{x_{n-1}}^{x_n} \mathbf{A} \cdot ds \quad (67-6-2)$$

که ds المان خطی دیفرانسیلی در جهت تکه مسیر، می‌باشد. بنابراین وقتی که مسیر کامل از X_1 به X_N را در نظر می‌گیریم، از تغییر زیر پیروی می‌کنیم:

$$\text{Pexp} \left[\frac{iS^{(0)}(n, n-1)}{\hbar} \right] \rightarrow \left\{ \text{Pexp} \left[\frac{iS^{(0)}(n, n-1)}{\hbar} \right] \right\} \exp \left(\frac{ie}{\hbar c} \int_{x_1}^{x_N} \mathbf{A} \cdot ds \right) \quad (68-6-2)$$

* پس از مقاله‌ی سال ۱۹۵۹ توسط وای. آهارنوف و دی-بوهم، در اصل ۱۰ سال پیش از آن اثری شبیه به این اثر، توسط دلبیو، اینبرگ و آراس، سیدای مورد بحث قرار گرفته بود.



شکل ۲-۸: اثر آهارانوف-بوهم

تمام مطالب گفته شده برای مسیر خاصی، نظیر وقتی در بالای استوانه حرکت کنیم، صادق است. هنوز می‌باید روی تمام مسیرهای ممکن جمع بزنیم که این کار ممکن است سخت به نظر برسد. خوشبختانه، از نظریه‌ی الکترومغناطیس می‌دانیم که انتگرال خطی $\int \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s}$ مستقل از مسیر است. یعنی تا وقتی که حلقه‌ی تشکیل شده توسط دو مسیر مختلف در برگیرنده‌ی شار مغناطیسی نباشد، این انتگرال تنها به نقاط ابتدایی و پایانی بستگی دارد. به عنوان یک نتیجه، سهم ناشی از $\mathbf{A} \neq 0$ در تمام مسیرهایی که از بالای استوانه عبور می‌کنند، با یک عامل فاز مشترک داده می‌شود. به همین صورت، سهم تمام مسیرهای عبوری از زیر استوانه در یک عامل فاز مشترک دیگر ضرب می‌شوند. در نماد گذاری انتگرال مسیر، برای کل دامنه‌ی گذار داریم:

$$\int_{\text{above}} \mathcal{D}[\mathbf{x}(t)] \exp\left[\frac{iS^{(0)}(N,1)}{\hbar}\right] + \int_{\text{below}} \mathcal{D}[\mathbf{x}(t)] \exp\left[\frac{iS^{(0)}(N,1)}{\hbar}\right]$$

$$\rightarrow \int_{\text{above}} \mathcal{D}[\mathbf{x}(t)] \exp\left[\frac{iS^{(0)}(N,1)}{\hbar}\right] \left\{ \exp\left[\left(\frac{ie}{\hbar c}\right) \int_{x_1}^{x_N} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s}\right]_{\text{above}} \right\}$$

$$+ \int_{\text{below}} \mathcal{D}[\mathbf{x}(t)] \exp\left[\frac{iS^{(0)}(N,1)}{\hbar}\right] \left\{ \exp\left[\left(\frac{ie}{\hbar c}\right) \int_{x_1}^{x_N} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s}\right]_{\text{below}} \right\}$$

(۶۹-۶-۲)

احتمال یافتن ذره در ناحیه‌ی تداخلی B وابسته به قدر مطلق مربع کل دامنه‌ی گذار و بنابراین وابسته به اختلاف فاز بین سهم‌های ناشی از مسیرهای عبوری از بالا و پایین است. اختلاف فاز در حضور میدان B برابر است با:

$$\left[\left(\frac{e}{\hbar c}\right) \int_{x_1}^{x_N} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} \right]_{\text{above}} - \left[\left(\frac{e}{\hbar c}\right) \int_{x_1}^{x_N} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} \right]_{\text{below}} = \left(\frac{e}{\hbar c}\right) \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s}$$

$$= \left(\frac{e}{\hbar c}\right) \Phi_B,$$

(۷۰-۶-۲)

که در آن Φ_B نشان دهنده‌ی شار مغناطیسی، درون استوانه نفوذناپذیر است. این یعنی وقتی که شدت میدان مغناطیسی را تغییر دهیم، یک مؤلفه‌ی سینوسی در احتمال مشاهده‌ی ذره وجود خواهد داشت دوره تناوب آن با واحد بنیادی شار مغناطیسی به صورت زیر داده می‌شود:

$$\frac{2\pi\hbar c}{|e|} = 4.135 \times 10^{-7} \text{ Gauss-cm}^2 \quad (۷۱-۶-۲)$$

تأکید می‌کنیم که اثر تداخلی که در این جا مورد بحث قرار می‌گیرد کاملاً کوانتومی است. از لحاظ کلاسیکی، حرکت یک ذره‌ی باردار منحصرأ با استفاده از قانون دوم نیوتون به انضمام قانون نیروی لورنتس به دست می‌آید. در این جا، همانند مسأله‌ی حالت مقید قبلی، ذره نمی‌تواند به ناحیه‌ای که در آن \mathbf{B} معین است وارد شود. به همین صورت نیروی لورنتس در تمام نواحی که تابع موج ذره معین است، صفر است. هنوز الگوی تداخل قابل توجهی وجود دارد که وابسته به حضور یا عدم حضور میدان مغناطیسی درون استوانه‌ی نفوذناپذیر است. این نکته است که برخی از مردم را بر آن داشته است تا بر این قائل شوند که در مکانیک کوانتومی \mathbf{A} بنیادی‌تر از \mathbf{B} است. با این حال، باید توجه شود که اثرات قابل مشاهده در هر دو مثال تنها وابسته به Φ_B است که این به طور مستقیم با \mathbf{B} بیان می‌شود. آزمایشاتی که برای تأیید اثر آهارانوف-بوهم انجام شده است با استفاده از یک رشته آهن مغناطیسی جاروب مانند انجام می‌شوند.*

تک قطبی مغناطیسی

این بخش را با یکی از پیش‌بینی‌های قابل توجه فیزیک کوانتومی که هنوز به طور آزمایشی دیده نشده است به پایان می‌رسانیم. یک دانشجوی باهوش در الکتروپدینامیک ممکن است به این واقعیت پی برده باشد که تقارنی قوی بین \mathbf{E} و \mathbf{B} برقرار است. این تقارن تنها در یک هم‌تای بار مغناطیسی (که به طور عام به یک تک قطبی مغناطیسی اشاره دارد) برای بار الکتریکی در معادلات ماکسول مستثنی است. منبع میدان مغناطیسی در طبیعت هم بار الکتریکی متحرک و هم دو قطبی مغناطیسی ثابت است و تک بار مغناطیسی ثابت تا کنون دیده نشده است. در طبقه‌ی معمولی نوشتن معادلات ماکسول، به جای داشتن رابطه‌ی:

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 4\pi\rho_M \quad (۷۲-۶-۲)$$

که شبیه به:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho \quad (۷۳-۶-۲)$$

* یکی از آزمایشات اخیر انجام شده (A. Tonomura et al, Phys.Rev.Lett.48(1982) است.

است، $\nabla \cdot \mathbf{B}$ صفر می‌شود. مکانیک کوانتومی پیش‌بینی نمی‌کند که باید تک قطبی مغناطیسی وجود داشته باشد، اما همان‌طور که نشان خواهیم داد، واضح است که اگر یک تک قطبی مغناطیسی در طبیعت پیدا شود، لازم است که مقدار این بار مغناطیسی برحسب e و \hbar و c کوانتیده باشد.

فرض کنید که یک تک قطبی مغناطیسی نقطه‌ای وجود دارد و در مبدأ قرار گرفته است. قدرت e_M آن شبیه به بار الکتریکی نقطه‌ای است. در این حالت میدان مغناطیسی پایا با عبارت

$$\mathbf{B} = \left(\frac{e_M}{r^2} \right) \hat{\mathbf{r}} \quad (۷۴-۶-۲)$$

به دست می‌آید. در دید اول ممکن است به نظر رسد که میدان مغناطیسی (۷۴-۶-۲) را می‌توان از رابطه‌ی:

$$\mathbf{A} = \left[\frac{e_M(1 - \cos \theta)}{r \sin \theta} \right] \hat{\boldsymbol{\phi}} \quad (۷۵-۶-۲)$$

به دست آورد. یادآوری می‌کنیم که عبارت تاو در مختصات کروی به صورت زیر است:

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{A} = & \hat{\mathbf{r}} \left[\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (A_{\phi} \sin \theta) - \frac{\partial A_{\theta}}{\partial \phi} \right] \\ & + \hat{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{r} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial A_r}{\partial \phi} - \frac{\partial}{\partial r} (r A_{\phi}) \right] + \hat{\boldsymbol{\phi}} \frac{1}{r} \left[\frac{\partial}{\partial r} (r A_{\theta}) - \frac{\partial A_r}{\partial \theta} \right] \end{aligned} \quad (۷۶-۶-۲)$$

اما پتانسیل برداری (۷۵-۶-۲) یک مشکل دارد. این رابطه بر روی محور z منفی ($\theta = \pi$) تکیه است. در حقیقت، به دست می‌آید که ساختن یک پتانسیل غیر تکیه که برای این مسأله در همه جا صادق باشد، غیرممکن است. برای درک این مطلب بهتر است که ابتدا به "قانون گاوس" توجه کنیم:

$$\int_{\text{سطح بسته}} \mathbf{B} \cdot d\boldsymbol{\sigma} = 4\pi e_M \quad (۷۷-۶-۲)$$

که برای هر سطح بسته‌ای که مبدأ آن بر روی تک قطبی مغناطیسی واقع است، صدق می‌کند. به عبارت دیگر، اگر \mathbf{A} غیر تکیه باشد، خواهیم داشت:

$$\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) = 0 \quad (۷۸-۶-۲)$$

که این رابطه در همه جا صدق خواهد کرد. بنابراین:

$$\int_{\text{سطح بسته}} \mathbf{B} \cdot d\boldsymbol{\sigma} = \int_{\text{داخل حجم}} \nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) d^3x = 0 \quad (۷۹-۶-۲)$$

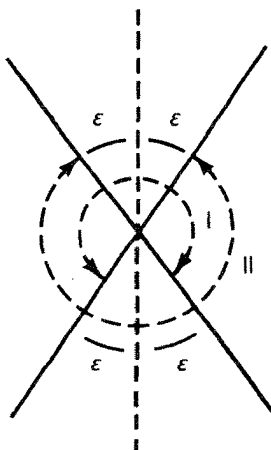
که با (۷۷-۶-۲) در تناقض است.

با این حال، می‌توان استدلال کرد، از آن‌جا که پتانسیل برداری تنها وسیله‌ای برای به دست آوردن **B** است، بر این اصراری نیست که یک بیان واحد داشته باشیم، که در همه جا برای **A** صادق باشد. فرض کنید که یک جفت پتانسیل تشکیل می‌دهیم:

$$\mathbf{A}^{(I)} = \left[\frac{e_M(1 - \cos \theta)}{r \sin \theta} \right] \hat{\phi}, \quad (\theta < \pi - \varepsilon) \quad (۲-۶-۸۰ \text{ الف})$$

$$\mathbf{A}^{(II)} = - \left[\frac{e_M(1 + \cos \theta)}{r \sin \theta} \right] \hat{\phi}, \quad (\theta > \varepsilon) \quad (۲-۶-۸۰ \text{ ب})$$

پتانسیل $\mathbf{A}^{(I)}$ را می‌توان در همه جا به غیر از داخل مخروط $\theta = \pi - \varepsilon$ ، اطراف محور Z منفی، به کار برد. به همین ترتیب پتانسیل $\mathbf{A}^{(II)}$ را می‌توان در همه جا به غیر از داخل مخروط $\theta = \varepsilon$ اطراف محور Z مثبت، مورد استفاده قرار داد. شکل ۲-۹ را ببینید. این دو پتانسیل، با هم، عبارت صحیح را برای **B** در همه جا نتیجه می‌دهند.*



شکل ۲-۹: منطقه‌هایی که در آن‌ها پتانسیل‌های $\mathbf{A}^{(I)}$ و $\mathbf{A}^{(II)}$ معتبر هستند.

اکنون در نظر بگیرید که در ناحیه‌ی مشترک $\varepsilon < \theta < \pi - \varepsilon$ چه اتفاقی می‌افتد. جایی که می‌توان هم از $\mathbf{A}^{(I)}$ و هم از $\mathbf{A}^{(II)}$ استفاده کرد. از آن‌جا که هر دو پتانسیل یک میدان را نتیجه می‌دهند، این دو پتانسیل می‌بایست با یک تبدیل پیمانه‌ای به هم مربوط باشند. برای یافتن Λ مناسب به این مسأله ابتدا توجه می‌کنیم که:

$$\mathbf{A}^{(II)} - \mathbf{A}^{(I)} = - \left(\frac{2e_M}{r \sin \theta} \right) \hat{\phi} \quad (۲-۶-۸۱)$$

* یک روش متفاوت برای این مسأله این است که $\mathbf{A}^{(I)}$ را همه جا استفاده کرد، اما بسیار مراقب راسته‌ی تکینگی که در امتداد محور Z منفی قرار گرفته و به راسته‌ی دیراک معروف است، بود.

یادآوری می‌کنیم که عبارت گرادیان در مختصات کروی به شکل زیر است:

$$\nabla\Lambda = \hat{r} \frac{\partial\Lambda}{\partial r} + \hat{\theta} \frac{1}{r} \frac{\partial\Lambda}{\partial\theta} + \hat{\phi} \frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial\Lambda}{\partial\phi} \quad (۸۲-۶-۲)$$

به دست می‌آوریم که:

$$\Lambda = -2e_M\phi \quad (۸۳-۶-۲)$$

کار انجام شد.

سپس فرض می‌کنیم که تابع موج یک ذره‌ی باردار الکتریکی به بار e در میدان مغناطیسی (۷۴-۶-۲) قرار می‌گیرد. همان‌طور که پیش‌تر تأکید کردیم، شکل خاص تابع موج وابسته به شکل خاص پیمانه‌ی مورد استفاده است. در ناحیه‌ی همپوشانی که هم $\mathbf{A}^{(I)}$ و هم $\mathbf{A}^{(II)}$ معتبرند، توابع موج متناظر، طبق (۵۵-۶-۲) به صورت زیر با هم در ارتباطند:

$$\psi^{(II)} = \exp\left(\frac{-2iee_M\phi}{\hbar c}\right) \psi^{(I)} \quad (۸۴-۶-۲)$$

توابع موج $\psi^{(I)}$ و $\psi^{(II)}$ می‌بایست تک مقدار باشند چون وقتی که ما پیمانه‌ی خاصی را انتخاب می‌کنیم، بسط کت حالت برحسب ویژه‌کت‌های مکان باید یکتا باشد. همان‌طور که قبلاً تأکید کردیم به‌طور ساده، تابع موج یک ضریب بسط برای کت حالت برحسب ویژه‌کت‌های مکان است.

حال بگذارید رفتار تابع موج $\psi^{(II)}$ را در استوا $e = \pi/2$ ، در یک فاصله‌ی مشخص r که ثابت است، بیازماییم. وقتی که زاویه‌ی سمتی ϕ را در امتداد استوا افزایش می‌دهیم و یک دور می‌زنیم، یعنی از $\phi = 0$ به $\phi = 2\pi$ می‌رویم، $\psi^{(II)}$ همانند $\psi^{(I)}$ ، باید به مقدار اصلی خود بازگردد و چون هر دو تک مقدارند، طبق (۸۴-۶-۲)، این تنها وقتی ممکن است که:

$$\frac{2ee_M}{\hbar c} = \pm N, \quad N = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (۸۵-۶-۲)$$

بنابراین به نتیجه‌ی بسیار دور از انتظاری رسیدیم. بارهای مغناطیسی برحسب عبارت زیر کوانتیده‌اند:

$$\frac{\hbar c}{2|e|} \approx \left(\frac{137}{2}\right)|e| \quad (۸۶-۶-۲)$$

کوچک‌ترین بار مغناطیسی ممکن برابر با $\hbar c/2|e|$ است که در آن e بار الکتریکی است. جالب است که یکبار فرض کنیم تک قطبی مغناطیسی وجود دارد. می‌توانیم از (۸۵-۶-۲) در جهت عکس استفاده کنیم و

بگوییم که چرا بارهای الکتریکی کوانتیده‌اند. برای مثال، چرا بار پروتون نمی‌تواند $0.9999972/e$ برابر $|e|$ باشد.*

یک بار دیگر تکرار می‌کنیم که مکانیک کوانتومی احتیاجی به وجود تک قطبی مغناطیسی ندارد. اما به‌طور واضح پیش‌بینی می‌کند که یک بار مغناطیسی، اگر در طبیعت یافت شود، می‌باید برحسب $\hbar c/2|e|$ کوانتیده باشد. کوانتش بارهای مغناطیسی در مکانیک کوانتومی نخستین بار توسط پی.ای.ام. دیراک نشان داده شد. استنتاجی که در این‌جا آورده شده متعلق به تی.تی. وو و سی.ان. یانگ است.

مسائل

۱. مسأله‌ی حرکت تقدیمی اسپین را که در این کتاب مورد بحث قرار گرفت، در نظر بگیرید. می‌توان این مسأله را در تصویر هایزنبرگ نیز حل کرد با استفاده از هامیلتونی:

$$H = -\left(\frac{eB}{mc}\right)S_z = \omega S_z$$

و نوشتن معادلات حرکت برای عملگرهای وابسته به زمان $S_x(t)$ و $S_y(t)$ و $S_z(t)$ این معادلات را برای به‌دست آوردن $S_{x,y,z}$ به‌شکل توابعی از زمان حل کنید.

۲. دوباره به هامیلتونی مسأله‌ی ۱۱ فصل ۱ نگاه کنید. فرض کنید که تاپیست اشتباه کرده و H را به‌صورت زیر بنویسید:

$$H = H_{11}|1\rangle\langle 1| + H_{22}|2\rangle\langle 2| + H_{12}|1\rangle\langle 2|$$

اکنون چه اصلی نقض می‌شود؟ نظر خود را به‌طور صریح با تلاش برای حل یک مسأله‌ی کلی وابسته به زمان و با استفاده از یک هامیلتونی غلط از این نوع نشان دهید (می‌توانید برای سادگی $H_{11} = H_{22} = 0$ قرار دهید).

۳. یک الکترون با یک میدان مغناطیسی مستقل از زمان یکنواخت به قدرت B در جهت مثبت محور z برهمکنش دارد. در زمان $t=0$ الکترون با ویژه حالت $\mathbf{S} \cdot \mathbf{n}$ با ویژه مقدار $\hbar/2$ معلوم است که در آن \mathbf{n} بردار واحدی در صفحه‌ی xz است که با محور z زاویه β می‌سازد.

الف. احتمال یافتن الکترون در حالت $S_x = \hbar/2$ را به‌صورت تابعی از زمان به‌دست آورید.

ب. مقدار انتظاری S_x را به‌صورت تابعی مستقل از زمان بیابید.

* از لحاظ آزمایشگاهی معادل بودن اندازه‌ی بار الکترون و پروتون با دقت چهاربرابر 10^{19} اندازه‌گیری شده است.

ج. برای آسودگی خیال خودتان، نشان دهید که جواب شما در حالت‌های حدی $\beta \rightarrow 0$ (i) و $\beta \rightarrow \pi/2$ (ii) خوش‌رفتار است.

۴. $x(t)$ را به‌عنوان عملگر مختصات برای یک ذره‌ی آزاد در یک بُعد، در تصویر هایزنبرگ در نظر بگیرید:

$$[x(t), x(0)]$$

را محاسبه کنید.

۵. ذره‌ای در یک بُعد در نظر بگیرید که هامیلتونی آن با رابطه‌ی زیر به‌دست می‌آید:

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

با محاسبه‌ی $[[H, x], x]$ اثبات کنید که:

$$\sum_{a'} |\langle a'' | x | a' \rangle|^2 (E_{a'} - E_{a''}) = \frac{\hbar^2}{2m}$$

که در آن $|a'\rangle$ یک ویژه‌کت انرژی با ویژه مقدار $E_{a'}$ است.

۶. ذره‌ای را در سه بعد با هامیلتونی زیر در نظر بگیرید:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x})$$

با محاسبه‌ی $[\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}, H]$ به‌دست آورید:

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{x} \cdot \mathbf{p} \rangle = \left\langle \frac{\mathbf{p}^2}{m} \right\rangle - \langle \mathbf{x} \cdot \nabla V \rangle$$

برای معادل‌سازی این رابطه به‌عنوان همتای کوانتومی قضیه ویریاال واضح است که سمت چپ باید صفر شود. تحت چه شرایطی این امر اتفاق می‌افتد؟

۷. یک بسته موج ذره‌ی آزاد را یک بعد در نظر بگیرید. در زمان $t=0$ این بسته موج حداقل رابطه‌ی عدم قطعیت را برقرار می‌سازد.

$$\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0 \quad (t=0)$$

به‌علاوه می‌دانیم که

$$H = |a'\rangle \delta \langle a''| + |a''\rangle \delta \langle a'|$$

با استفاده از تصویر هایزنبرگ، $\langle (\Delta x)^2 \rangle$ را به عنوان تابعی از t ($t \geq 0$)، هنگامی که $\langle (\Delta x)^2 \rangle_{t=0}$ داده شده است، به دست آورید. (تذکر: برای به دست آوردن مزیت‌های خواص حداقل عدم قطعیت بسته موج به مسأله‌ی ۱۸ فصل ۱ مراجعه کنید)

۸. $|a'\rangle$ و $|a''\rangle$ را به عنوان ویژه حالت‌های عملگر هرمیتی A به ترتیب با ویژه مقادیر a' و a'' ($a' \neq a''$) در نظر بگیرید. عملگر هامیلتونی با رابطه‌ی زیر داده می‌شود:

$$H = |a'\rangle \delta \langle a''| + |a''\rangle \delta \langle a'|$$

که در آن δ تنها یک عدد حقیقی است.

الف) واضح است که $|a'\rangle$ و $|a''\rangle$ ویژه حالت‌های هامیلتونی نیستند. ویژه حالت‌های هامیلتونی را بنویسید. ویژه مقادیر انرژی آن‌ها کدامند؟

ب) فرض کنید که سیستم در $t=0$ در حالت $|a'\rangle$ قرار دارد. بردار حالت را در تصویر شرودینگر برای $t > 0$ بنویسید.

ج) اگر سیستم در $t=0$ در حالت $|a'\rangle$ باشد، احتمال یافتن آن در $t > 0$ در حالت $|a'\rangle$ چقدر است؟

د) آیا می‌توانید یک وضعیت فیزیکی متناسب با این مسأله را در نظر بیاورید؟

۹. یک جعبه حاوی یک ذره با یک جداساز نازک به دو قسمت چپ و راست تقسیم شده است. اگر مطمئن باشیم که ذره در طرف چپ یا راست قرار گرفته است، حالت آن با ویژه کت مکان $|R\rangle$ و یا $|L\rangle$ نمایش داده می‌شود که در آن از تغییرات فضای جعبه صرف نظر کرده‌ایم. کلی‌ترین بردار حالتی که می‌توانیم برای آن بنویسیم عبارت است از:

$$|\alpha\rangle = |R\rangle \langle R|\alpha\rangle + |L\rangle \langle L|\alpha\rangle$$

که در آن $\langle R|\alpha\rangle$ و $\langle L|\alpha\rangle$ را می‌توان به عنوان "توابع موج" در نظر گرفت. ذره می‌تواند به سمت مجاور تونل بزند، این اثر تونل زنی، با هامیلتونی زیر مشخص می‌شود:

$$H = \Delta (|L\rangle \langle R| + |R\rangle \langle L|)$$

که در آن Δ یک عدد حقیقی با بعد انرژی است.

الف) ویژه کت‌های بهنجار انرژی را بیابید. ویژه مقادیر متناظر با آن‌ها کدامند؟

ب) در تصویر شرودینگر، کت‌های $|R\rangle$ و $|L\rangle$ ثابت‌اند و بردار حالت با زمان در حرکت است.

فرض کنید که سیستم در زمان $t=0$ با $|\alpha\rangle$ که در بالا داده شده است، مشخص می‌شود. با اعمال

عملگر تحول زمانی مناسب بر $|\alpha\rangle$ ، بردار حالت $\langle R|\alpha, t_0=0; t\rangle$ را برای $t > 0$ بیابید.

ج) فرض کنید که ذره در لحظه‌ی $t=0$ با اطمینان در سمت راست جعبه قرار دارد. احتمال آن که ذره به طور تابعی از زمان در سمت چپ مشاهده شود چقدر است؟

د) دو معادله‌ی شرودینگر برای توابع موج $\langle R|\alpha, t_0=0; t \rangle$ و $\langle L|\alpha, t_0=0; t \rangle$ بنویسید. نشان دهید که جواب این دو معادله‌ی شرودینگر دقیقاً همان چیزی است که از (ب) انتظار داریم.

ه) فرض کنید دستگاه چاپ، اشتباهاً هامیلتونی را به شکل زیر نوشته است:

$$H = \Delta|L\rangle\langle R|$$

با حل صریح کلی‌ترین مسأله‌ی تحول زمانی با این هامیلتونی، نشان دهید که پایداری احتمال نقض می‌شود.

۱۰. به عنوان یک مثال، از نوسان گر هماهنگ ساده در یک بُعد استفاده کنید و اختلاف بین تصویر هایزنبرگ و تصویر شرودینگر را مشخص کنید. به طور خاص مورد بحث قرار دهید: الف) متغیرهای دینامیک x و p و ب) کلی‌ترین بردار حالت با زمان در دو تصویر.

۱۱. یک ذره را تحت اثر پتانسیل نوسان گر ساده‌ی یک بعدی در نظر بگیرید. فرض کنید در $t=0$ بردار حالت با عبارت زیر داده می‌شود:

$$\exp\left(\frac{-ipa}{\hbar}\right)|0\rangle$$

که در آن p عملگر تکانه و a عددی با بعد طول است. با استفاده از تصویر هایزنبرگ، مقدار انتظاری $\langle x \rangle$ را برای $t \geq 0$ به دست آورید.

۱۲- الف) تابع موج را (در فضای مختصات) برای حالت مشخص شده در مسأله‌ی ۱۱ در زمان $t=0$ بنویسید. می‌توانید از

$$\langle x'|0\rangle = \pi^{-1/4} x_0^{-1/2} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x'}{x_0}\right)^2\right], \quad \left(x_0 \equiv \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2}\right)$$

استفاده کنید.

ب- یک عبارت ساده برای احتمال یافتن ذره در حالت پایه در زمان $t=0$ به دست آورید. تغییر این

احتمال در $t > 0$ چیست؟

۱۳. یک نوسان گر هماهنگ ساده یک بعدی را در نظر بگیرید.

الف) با استفاده از

$$\left. \begin{aligned} a \\ a^\dagger \end{aligned} \right\} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x \pm \frac{ip}{m\omega} \right), \quad \left. \begin{aligned} a|n\rangle \\ a^\dagger|n\rangle \end{aligned} \right\} = \left\{ \begin{aligned} \sqrt{n}|n-1\rangle \\ \sqrt{n+1}|n+1\rangle \end{aligned} \right.$$

عبارت‌های $\langle m|x|n\rangle$, $\langle m|p|n\rangle$, $\langle m|\{x, p\}|n\rangle$, $\langle m|x^2|n\rangle$, and $\langle m|p^2|n\rangle$ را محاسبه کنید.

ب) ببینید که آیا قضیه‌ی ویریا برای مقادیر انتظاری انرژی جنبشی و انرژی پتانسیل که از ویژه مقادیر انرژی به دست می‌آیند برقرار است؟

۱۴. الف) با استفاده از:

$$\langle x'|p'\rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{ip'x'/\hbar} \quad (\text{یک بعدی})$$

اثبات کنید که:

$$\langle p'|x|\alpha\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \langle p'|\alpha\rangle$$

ب) یک نوسان گر هماهنگ ساده‌ی یک بعدی را در نظر بگیرید. با شروع از معادله‌ی شرودینگر برای کت حالت، معادله‌ی شرودینگر را برای تابع موج در فضای تکانه بنویسید. (مطمئن شوید که بین عملگر p و ویژه مقدار p' فرق قائل شده‌اید.) آیا می‌توانید ویژه توابع انرژی را در فضای تکانه حدس بزنید؟

۱۵. تابعی را فرض کنید، که به تابع همبستگی معروف است و به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$C(t) = \langle x(t)x(0) \rangle$$

که در آن $x(t)$ عملگر مکان در تصویر هایزنبرگ است. تابع همبستگی را برای حالت پایه‌ی یک نوسان گر هماهنگ ساده محاسبه کنید.

۱۶. دوباره یک نوسان گر هماهنگ ساده را در نظر بگیرید. عملیات جبری زیر را انجام دهید. یعنی از توابع موج استفاده نکنید:

الف) یک ترکیب خطی از $|0\rangle$ و $|1\rangle$ بسازید به طوری که $\langle x \rangle$ تا حد ممکن بزرگ باشد.

ب) فرض کنید که نوسان گر در $t=0$ در حالتی قرار دارد که در قسمت الف) ساخته شد. بردار حالت آن برای $t>0$ در تصویر شرودینگر کدام است؟ مقدار انتظاری $\langle x \rangle$ را به صورت تابعی از زمان برای $\langle (\Delta x)^2 \rangle$ برای دو حالت (i) تصویر شرودینگر و (ii) تصویر هایزنبرگ محاسبه کنید.

ج) با استفاده از هر دو تصویر مقدار $\langle (\Delta x)^2 \rangle$ را به عنوان تابعی از زمان محاسبه کنید.

۱۷. برای نوسان گر هماهنگ یک بعدی نشان دهید که

$$\langle 0|e^{ikx}|0\rangle = \exp[-k^2\langle 0|x^2|0\rangle/2]$$

که در آن x عملگر مکان است.

۱۸. حالت همدوس نوسان گر هماهنگ یک بعدی به عنوان یک ویژه حالت (غیرهرمیتی) عملگر فنای a تعریف می شود:

$$a|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$$

که در آن λ در حالت کلی یک عدد مختلط است.

الف) اثبات کنید که

$$|\lambda\rangle = e^{-|\lambda|^2/2} e^{\lambda a^\dagger} |0\rangle$$

یک حالت بهنجار همدوس است.

ب) برقراری حداقل رابطه ی عدم قطعیت را برای چنین حالتی اثبات کنید.

ج) $\langle \lambda|\lambda\rangle$ را به صورت

$$|\lambda\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} f(n)|n\rangle$$

بنویسید. نشان دهید که توزیع $|f(n)|^2$ با توجه به n شکل پواسونی است. مقادیر ممکن n و بنابراین E را بیابید.

د) نشان دهید که یک حالت همدوس، با اعمال عملگر انتقال (جابجایی کوچک) $e^{-ipl/\hbar}$ (که در آن p ، عملگر تکانه و l فاصله ی جابجایی است) برای حالت پایه، به دست می آید. (همچنین گاتفرید ۱۹۶۶، ۶۴-۲۶۲ را ببینید)

۱۹. قرار دهید:

$$J_{\pm} = \hbar a_{\pm}^{\dagger} a_{\mp}, \quad J_z = \frac{\hbar}{2} (a_+^{\dagger} a_+ - a_-^{\dagger} a_-), \quad N = a_+^{\dagger} a_+ + a_-^{\dagger} a_-$$

که در آن a_{\pm} و a_{\pm}^{\dagger} عملگرهای خلق و فنا برای دو نوسان گر هماهنگ ساده مستقل هستند که در روابط جابجایی نوسان گر هماهنگ ساده ی معمولی صدق می کنند. ثابت کنید:

$$[J_z, J_{\pm}] = \pm \hbar J_{\pm}, \quad [J^2, J_z] = 0, \quad J^2 = \left(\frac{\hbar^2}{2}\right) N \left[\left(\frac{N}{2}\right) + 1\right]$$

۲۰. یک ذره به جرم m را در نظر بگیرید که تحت اثر یک پتانسیل تک‌بعدی به شکل زیر قرار گرفته است:

$$V = \begin{cases} \frac{1}{2}kx^2 & \text{برای } x > 0 \\ \infty & \text{برای } x < 0 \end{cases}$$

الف) انرژی حالت پایه کدام است؟

ب) مقدار انتظاری $\langle x^2 \rangle$ برای حالت پایه کدام است؟

۲۱. ذره‌ای در یک بُعد بین دو دیوار صلب محصور است:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{برای } 0 < x < L \\ \infty, & \text{برای } x < 0, \quad x > L \end{cases}$$

در $t = 0$ ذره دقیقاً و با اطمینان در $x = L/2$ قرار گرفته است. احتمال نسبی برای اینکه ذره در ویژه حالت‌های مختلف انرژی پیدا شود چقدر است؟ تابع موج را برای $t \geq 0$ بنویسید. (لازم نیست که در مورد بهنجارش مطلق همگرایی و دیگر موشکافی‌های ریاضیاتی نگران باشید.)

۲۲. فرض کنید که یک ذره در یک بعد توسط یک پتانسیل تابع دلتا (δ) به شکل زیر:

$$V(x) = -v_0\delta(x), \quad (v_0 \text{ real and positive})$$

در مرکز ثابت شده است. تابع موج و انرژی بستگی حالت پایه را پیدا کنید. آیا حالت‌های مقید برانگیخته نیز وجود دارند؟

۲۳. فرض کنید که یک ذره در یک بعد توسط یک پتانسیل جاذب تابع دلتا (δ) به شکل زیر:

$$V(x) = -\lambda\delta(x), \quad (\lambda > 0)$$

در مرکز ثابت شده است. در زمان $t = 0$ ، پتانسیل ناگهان خاموش می‌شود (یعنی، برای $t > 0$ داریم $V = 0$).

تابع موج را برای $t > 0$ بیابید. (یک بیان کمی داشته باشید! اما لازم نیست که برای حل انتگرالی که ممکن است ظاهر شود تلاش کنید.)

۲۴- ذره‌ای در یک بعد ($-\infty < x < \infty$) با نیروی ثابتی که از پتانسیل زیر ناشی می‌شود درگیر است:

$$V = \lambda x, \quad (\lambda > 0)$$

الف) طیف انرژی پیوسته است یا گسسته؟ یک عبارت تقریبی برای ویژه توابع انرژی که با E مشخص می‌شوند بنویسید. همچنین آن را به‌طور ابتدایی رسم کنید.

ب) به‌طور خلاصه بحث کنید که چه تغییری نیاز است اگر V با عبارت زیر تعویض شود:

$$V = \lambda|x|$$

۲۵. فرض کنید یک الکترون در داخل یک پوسته‌ی استوانه‌ای که محور آن بر محور z منطبق است، قرار دارد. تابع موجی نیاز است که در دیواره‌های داخلی و خارجی $\rho = \rho_a$ و ρ_b و همچنین در پایین و بالا $z=0$ و $z=L$ ، صفر شود.

الف) ویژه توابع انرژی را پیدا کنید (بهنجارش لازم نیست) نشان دهید که ویژه مقادیر انرژی با عبارت زیر به‌دست می‌آید:

$$E_{lmn} = \left(\frac{\hbar^2}{2m_e} \right) \left[k_{mn}^2 + \left(\frac{l\pi}{L} \right)^2 \right] \quad (l=1,2,3,\dots, m=0,1,2,\dots)$$

که در آن n ، k_{mn} ، n امین ریشه‌ی معادله‌ی غیر جبری زیر است:

$$J_m(k_{mn}\rho_b)N_m(k_{mn}\rho_a) - N_m(k_{mn}\rho_b)J_m(k_{mn}\rho_a) = 0$$

ب) عملیات قسمت قبلی را برای مسأله‌ای مشابه انجام دهید که در آن یک میدان مغناطیسی یکنواخت، به‌صورت $\mathbf{B} = B\hat{z}$ در $0 < \rho < \rho_a$ ، وجود دارد. توجه کنید که ویژه مقادیر انرژی تحت تأثیر میدان مغناطیسی تراز می‌گیرند، حتی اگر الکترون هرگز با میدان مغناطیسی برخورد نکند.

ج) در حالت خاص، حالت پایه‌ی مسأله‌ی $B=0$ را با مسأله‌ی $B \neq 0$ مقایسه کنید. نشان دهید که اگر ما بخواهیم انرژی در حضور میدان مغناطیسی B بدون تغییر بماند، "کوانتتس شار" را به‌دست می‌آوریم:

$$\pi\rho_a^2 B = \frac{2\pi N\hbar c}{e}, \quad (N = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

۲۶. فرض کنید که ذره‌ای تحت تأثیر پتانسیل $V(x)$ در یک بعد حرکت می‌کند. فرض کنید که تابع موج را می‌توان به‌شکل $\exp[iS(x,t)/\hbar]$ نوشت. نشان دهید که در حدی که بتوان مقدار \hbar را به‌اندازه‌ی کافی کوچک در نظر گرفت، $S(x,t)$ در معادله‌ی کلاسیکی هامیلتون ژاکوبی، صدق می‌کند. نشان دهید که

چطور می‌توان با شروع از جواب معادله‌ی کلاسیکی هامیلتون - ژاکوبی با قرار دادن $V(x)$ برابر صفر، تابع موج درست را برای یک موج تخت به‌دست آورد. در این مورد خاص، چرا تابع موج دقیق را به‌دست می‌آوریم؟

۲۷. با استفاده از مختصات کروی، عبارتی برای ψ در حالت پایه و حالت‌های برانگیخته‌ی اتم هیدروژن به‌دست آورید. در حالت خاص نشان دهید که برای حالت‌های $m_l \neq 0$ ، وابسته به این که m_l مثبت یا منفی باشد، شار سیاری وجود دارد و نشانگر آن است که ψ در جهت افزایش و یا کاهش ϕ قرار دارد.

۲۸. رابطه‌ی (۲-۵-۱۶) را اثبات کنید و تعمیم یافته‌ی آن را در سه بُعد به‌دست آورید.

۲۹. تابع پارش به‌شکل زیر تعریف می‌شود:

$$Z = \int d^3x' K(\mathbf{x}', t; \mathbf{x}', 0) |_{\beta = it/\hbar}$$

مطابق با روابط (۲-۵-۲۰) تا (۲-۵-۲۲) نشان دهید که انرژی حالت پایه با محاسبه‌ی

$$-\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta}, \quad (\beta \rightarrow \infty)$$

به دست می‌آید. واضح است که این مطلب برای یک ذره در یک جعبه‌ی یک بعدی است.

۳۰. انتشار در فضای تکانه همانند (۲-۵-۲۶) با عبارت $\langle \mathbf{p}', t | \mathbf{p}', t_0 \rangle$ به‌دست می‌آید. یک عبارت صریح برای $\langle \mathbf{p}', t | \mathbf{p}', t_0 \rangle$ برای مورد ذره‌ی آزاد استخراج کنید.

۳۱. الف) یک عبارت برای کنش کلاسیکی یک نوسان‌گر هماهنگ ساده در بازه‌ی زمانی محدود بنویسید.

ب) با استفاده از نسخه فاینمن برای $t_n - t_{n-1} = \Delta t$ کوچک، $\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle$ را برای نوسان‌گر هماهنگ ساده بنویسید. تنها جملات پایین‌تر از مرتبه‌ی $(\Delta t)^2$ را نگه دارید و نشان دهید که این با حد $t - t_0 \rightarrow 0$ انتشار که از (۲-۵-۲۶) به‌دست می‌آید، کاملاً در توافق است.

۳۲. اصل کنش شوینگر را شرح دهید (فینکنشتاین ۱۹۷۳، ۱۵۵ را ببینید) با انتگرال‌گیری از اصل شوینگر جوابی برای $\langle x_2 t_2 | x_1 t_1 \rangle$ به‌دست آورید و آن را با عبارت متناظر فاینمن برای $\langle x_2 t_2 | x_1 t_1 \rangle$ مقایسه کنید. حدود کلاسیکی این دو عبارت را توصیف کنید.

۳۳. نشان دهید که روش مکانیک موجی در مسأله‌ی القای گرانشی که در بحث ۲-۶ مورد بحث واقع شد، عبارت اختلاف فاز (۲-۶-۱۷) را نتیجه می‌دهد.

۳۴. الف) (۲-۶-۲۵) و (۲-۶-۲۷) را به دست آورید.

ب) معادله‌ی پیوستگی را، وقتی که \mathbf{J} با (۲-۶-۳۱) داده می‌شود به دست آورید.

۳۵. هامیلتونی یک ذره‌ی بدون اسپین به بار e را در نظر بگیرید. در حضور یک میدان مغناطیسی ثابت، جمله‌ی برهم کنشی به شکل زیر تعمیم پیدا می‌کند:

$$\mathbf{P}_{operator} \rightarrow \mathbf{P}_{operator} - \frac{e\mathbf{A}}{c}$$

که در آن \mathbf{A} پتانسیل برداری مناسب است. برای سادگی، فرض کنید که، میدان مغناطیسی \mathbf{B} در جهت مثبت محور z ثابت است. ثابت کنید که الگوی بالا به عبارت صحیحی برای برهم کنش تکانه‌ی زاویه‌ی مغناطیسی $(e/2mc)\mathbf{L}$ با میدان مغناطیسی \mathbf{B} می‌انجامد. نشان دهید که یک جمله‌ی اضافی متناسب با $B^2(x^2 + y^2)$ نیز وجود دارد و به طور خلاصه معنای فیزیکی آن را شرح دهید.

۳۶. یک الکترون در حضور میدان مغناطیسی یکنواختی در جهت z ($\mathbf{B} = B\hat{z}$) حرکت می‌کند.

الف) محاسبه کنید:

$$[\Pi_x, \Pi_y]$$

که در آن

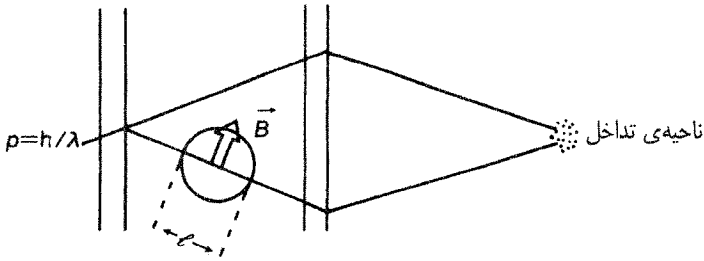
$$\Pi_x \equiv p_x - \frac{eA_x}{c}, \quad \Pi_y \equiv p_y - \frac{eA_y}{c}$$

ب) با مقایسه‌ی هامیلتونی و رابطه‌ی جابه‌جایی به دست آمده در قسمت (الف)، با متناظر آن‌ها در مسأله‌ی نوسان گر یک بُعدی، نشان دهید که چطور می‌توانیم ویژه مقادیر انرژی را به شکل زیر بنویسیم:

$$E_{k,n} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \left(\frac{|eB\hbar|}{mc} \right) \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

که در آن $\hbar k$ ویژه مقادیر پیوسته‌ی عملگر p_z هستند و n یک عدد غیرمنفی، از جمله صفر، است.

۳۷. تداخل سنج نوترون را در نظر بگیرید.



اثبات کنید اختلاف میدان‌های مغناطیسی که دو ماکسیمم متوالی در سرعت شمارش ایجاد می‌کنند، با عبارت زیر به دست می‌آید:

$$\Delta B = \frac{4\pi\hbar c}{|e|g_n\lambda l}$$

که در آن g_n تکانه‌ی مغناطیسی نوترون در واحد $e\hbar/2m_n c$ است. [اگر شما این مسأله را در سال ۱۹۶۷ حل می‌کردید، می‌توانستید آن را در *Physical Review Letters* چاپ کنید.]

فصل سوم

نظریه‌ی تکانه‌ای زاویه‌ای

این فصل، با دیدی منظم و اصولی به بررسی مسأله‌ی تکانه‌ی زاویه‌ای و مسائل پیرامون آن می‌پردازد. اهمیت تکانه‌ی زاویه‌ای به شدت در فیزیک مدرن به چشم می‌آید. فهم کامل تکانه‌ی زاویه‌ای در طیف‌سنجی مولکولی، اتمی و هسته‌ای مورد نیاز است. مطالعات مربوط به تکانه‌ی زاویه‌ای در مسائل پراکندگی، برخورد و همچنین در مسائل حالت‌های مقید نقش مهمی را بازی می‌کنند. به علاوه مفهوم تکانه‌ی زاویه‌ای، تعمیم‌های مهمی همچون ایزواسپین را در فیزیک هسته‌ای و $SU(3)$ و $SU(2) \otimes U(1)$ را در ذرات بنیادی، یافته‌اند.

۱.۳ چرخش و روابط جابه‌جایی تکانه‌ی زاویه‌ای

چرخش‌های محدود در برابر چرخش‌های بی‌نهایت کوچک

از فیزیک مقدماتی به یاد می‌آوریم که چرخش‌ها حول یک محور همسان با هم جابه‌جا می‌شوند در حالی که چرخش‌های پیرامون محورهای مختلف این طور نیستند. برای مثال پیداست که یک چرخش 3° پیرامون محور Z و به دنبال آن یک چرخش 6° حول محور Z ، به وضوح همانند یک چرخش 6° پیرامون محور Z و سپس یک چرخش 3° حول آن محور است. اما بگذارید تا دو حالت را با هم مقایسه کنیم. در اولی یک چرخش 9° پیرامون محور Z ، که آن را با $R_z(\pi/2)$ نشان می‌دهیم، با یک چرخش 9° پیرامون محور X دنبال می‌شود و در دومی یک چرخش 9° پیرامون محور X ، با یک چرخش 9° پیرامون محور Z دنبال می‌شود. جواب این دو حالت همان طور که در شکل ۳-۱ نشان داده‌ایم با هم متفاوت است.

نخستین کار اصلی ما دست آوردن کمی این مطلب است که چرا چرخش، حول محورهای مختلف با هم جابه‌جا نمی‌شوند. برای رسیدن به این مقصود، به یاد می‌آوریم که چطور می‌توانیم چرخش در سه بعد را با یک ماتریس 3×3 ، حقیقی و متعامد نشان دهیم. بردار V را با مختصه‌های V_x و V_y و V_z در نظر بگیرید. وقتی که این بردار را می‌چرخانیم، سه مؤلفه به مقادیر دیگری مثل V'_x و V'_y و V'_z تبدیل می‌شوند. مؤلفه‌های قدیمی و جدید با یک ماتریس 3×3 متعامد به یکدیگر وابسته‌اند.

$$\begin{pmatrix} V'_x \\ V'_y \\ V'_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} & & \\ & R & \\ & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix}$$

(۱-۱-۳ الف)

$$RR^T = R^T R = 1$$

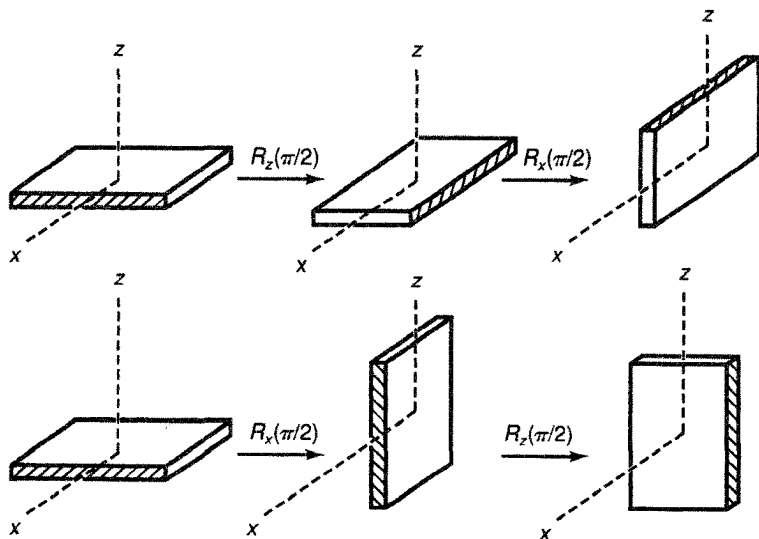
(۱-۱-۳ ب)

که در آن شاخص T بیان کننده‌ی ترانزپوزیته‌ی ماتریس است، یک خاصیت ماتریس متعامد این است که:

$$\sqrt{V_x^2 + V_y^2 + V_z^2} = \sqrt{V_x'^2 + V_y'^2 + V_z'^2}$$

(۲-۱-۳)

به‌طور خودکار برقرار باشد.



شکل ۱-۳: مثالی برای نشان دادن جا به‌جایی‌ناپذیر بودن چرخش‌های محدود.

به‌عنوان تعریف، چرخش پیرامون محور z را با زاویه‌ی ϕ نشان می‌دهیم. قراردادی که در این کتاب از آن تبعیت می‌کنیم آن است که عملگر چرخش، همانند شکل ۱-۳، روی خود سیستم فیزیکی اثر می‌کند و محورهای مختصات بدون تغییر می‌مانند. وقتی که چرخش در صفحه‌ی xy در جهت پادساعتگرد باشد زاویه‌ی ϕ مثبت است و همان‌طور که نشان داده است نسبت به سمت مثبت محور z سنجیده می‌شود. اگر خم راستگردی را با چنین چرخشی توصیف کنیم، چرخش ϕ مثبت حول محور z به این معنی است که خم در جهت مثبت محور z ها است. با این قرارداد، به‌راحتی به‌دست می‌آوریم که:

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

(۳-۱-۳)

اگر قرارداد دیگری داشتیم که در آن سیستم فیزیکی ثابت می‌ماند و محورهای مختصات می‌چرخیدند، زاویه‌ی مثبت در این ماتریس، چرخش ساعتگرد محورهای x و y را برای ناظری که از سمت مثبت z نگاه می‌کند، توصیف می‌کرد. مهم است که این دو قرارداد را با هم اشتباه نگیریم! برخی از نویسندگان با اسامی "چرخش فعال" برای چرخش سیستم فیزیکی و "چرخش غیرفعال" برای چرخش سیستم مختصات، این دو قرارداد را از هم جدا می‌کنند.

در حالت خاص می‌خواهیم شکل بی‌نهایت کوچک R را ببینیم.

$$R_z(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon & 0 \\ \varepsilon & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (۴-۱-۳)$$

که در آن از جملات ε^3 و درجه بالا صرف نظر شده است. به همین ترتیب داریم:

$$R_x(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon \\ 0 & \varepsilon & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} \end{pmatrix} \quad (۵-۱-۳ \text{ الف})$$

و

$$R_y(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & 0 & \varepsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -\varepsilon & 0 & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} \end{pmatrix} \quad (۵-۱-۳ \text{ ب})$$

که می‌توان با جایگشت دوره‌ای x و y و $-z$ یعنی $x \rightarrow y$ و $y \rightarrow z$ و $z \rightarrow x$ این دو ماتریس را در (۴-۱-۳) دید. اکنون اثر یک چرخش محور y که با یک چرخش محور x دنبال می‌شود را با اثر یک چرخش محور x که با یک چرخش محور y دنبال می‌شود، مقایسه می‌کنیم. با عملیات مقدماتی ماتریسی به دست می‌آوریم:

$$R_x(\varepsilon)R_y(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & 0 & \varepsilon \\ \varepsilon^2 & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon \\ -\varepsilon & \varepsilon & 1 - \varepsilon^2 \end{pmatrix} \quad (۳-۱-۶ \text{ الف})$$

و

$$R_y(\varepsilon)R_x(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & \varepsilon^2 & \varepsilon \\ 0 & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon \\ -\varepsilon & \varepsilon & 1 - \varepsilon^2 \end{pmatrix} \quad (۳-۱-۶ \text{ ب})$$

با توجه به (۳-۱-۶ الف) و (۳-۱-۶ ب) به این نتیجه‌ی مهم می‌رسیم: چرخش‌های بی‌نهایت کوچک، حول محورهای مختصات مختلف به این شرط که از جملات مرتبه‌ی ε^2 و بالاتر صرف‌نظر شود، با هم جابه‌جا می‌شوند.* دومین نتیجه که حتی مهم‌تر نیز هست، این است که وقتی از جمله‌ی ε^2 صرف‌نظر نشود، چرخش‌های حول محورهای مختلف جابه‌جا نمی‌شوند. داریم:

$$\begin{aligned} R_x(\varepsilon)R_y(\varepsilon) - R_y(\varepsilon)R_x(\varepsilon) &= \begin{pmatrix} 0 & -\varepsilon^2 & 0 \\ \varepsilon^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= R_z(\varepsilon^2) - 1 \end{aligned} \quad (۳-۱-۷)$$

که در آن از جملاتی که مرتبه‌ی بالاتر از ε^2 دارند صرف‌نظر شده است. همچنین داریم:

$$1 = R_{\text{any}}(0) \quad (۳-۱-۸)$$

که اندیس هر کدام، بیان‌کننده‌ی این است که هر کدام از بردارها می‌توانند، بردار چرخش واقع شوند. بنابراین نتیجه‌ی نهایی را می‌توان به شکل زیر نوشت:

$$R_x(\varepsilon)R_y(\varepsilon) - R_y(\varepsilon)R_x(\varepsilon) = R_z(\varepsilon^2) - R_{\text{any}}(0) \quad (۳-۱-۹)$$

این مثالی از روابط جابه‌جایی بین عملگرهای جابه‌جایی حول محورهای متفاوت است که بعدها از آن در بحث روابط جابه‌جایی تکانه‌ی زاویه‌ای در مکانیک کوانتومی استفاده می‌کنیم.

* در واقع یک مثال آشنا از این موضوع در مکانیک مقدماتی وجود دارد. بردار سرعت زاویه‌ای ω که بیان‌گر تغییر بی‌نهایت کوچک زاویه‌ی چرخش در یک زمان بی‌نهایت کوچک است. قانون معمولی جمع بردارها، از جمله جابه‌جایی جمع برداری پیروی می‌کند. با این حال نمی‌توانیم خواص برداری را به یک تغییرات زاویه‌ای محدود نسبت دهیم.

چرخش بی‌نهایت کوچک در مکانیک کوانتومی

تا به این جا به مفاهیم کوانتومی نپرداخته‌ایم. ماتریس R ، فقط یک ماتریس متعامد 3×3 ی بود که بر روی بردار V که آن را به شکل یک ماتریس ستونی نوشتیم، عمل می‌کرد. اکنون باید بفهمیم که چطور می‌توانیم، چرخش را در مکانیک کوانتومی مؤلفه‌بندی کنیم.

از آن جا که چرخش بر سیستم‌های فیزیکی اثر می‌کند، کت حالت متناظر با یک سیستم چرخیده، همان‌طور که انتظار می‌رود، باید از کت حالت متناظر با سیستم اولیه‌ی چرخش نیافته متفاوت باشد. به عملگر چرخش R ، که با این ماتریس متعامد 3×3 R نشان داده می‌شود، یک عملگر $\mathcal{D}(R)$ در فضای کت مناسب همانند آنچه در زیر آمده است، نسبت داده می‌شود.

$$|\alpha\rangle_R = \mathcal{D}(R)|\alpha\rangle \quad (10-1-3)$$

که در آن $|\alpha\rangle_R$ و $|\alpha\rangle$ به ترتیب نشان‌دهنده‌ی کت‌های چرخش یافته و اصلی سیستم هستند.* توجه کنید که ماتریس متعامد 3×3 R ، روی ماتریس ستونی‌ای که نشان‌دهنده‌ی بردار کلاسیکی در سه بُعد است، اثر می‌کند. در حالتی که عملگر $\mathcal{D}(R)$ روی بردارهای حالت، در فضای کت عمل می‌کند. نمایش ماتریسی $\mathcal{D}(R)$ ، که آن را با جزئیات بیشتر در بخش‌های بعدی مورد مطالعه قرار می‌دهیم، وابسته به بعد N ، فضای کت خاص مسئله است. برای $N=2$ ، که برای توصیف سیستم اسپین $\frac{1}{2}$ بدون درجات آزادی دیگر، مناسب است، $\mathcal{D}(R)$ با یک ماتریس 2×2 نشان داده می‌شود. برای یک سیستم اسپین 1 نمایش مناسب، ماتریسی یکانی و 3×3 است و به همین ترتیب.

برای تشکیل عملگر چرخش $\mathcal{D}(R)$ ، همانند قبل آزمودن خواص آن تحت یک چرخش بی‌نهایت کوچک مفید است. با مقایسه می‌توان حدس زد که این عملگر چه رفتاری خواهد داشت. در هر دو مسأله‌ی انتقال و تحول زمانی، که به ترتیب در بخش‌های ۱-۶ و ۲-۱ مورد مطالعه قرار دادیم، عملگرهای بی‌نهایت کوچک مناسب را به صورت زیر نوشتیم:

$$U_\varepsilon = 1 - iG\varepsilon \quad (11-1-3)$$

که در آن G یک عملگر هرمیتی است. به‌ویژه:

$$G \rightarrow \frac{p_x}{\hbar}, \quad \varepsilon \rightarrow dx' \quad (12-1-3)$$

* علامت \mathcal{D} از واژه‌ی آلمانی Drehung به معنی چرخش گرفته شده است.

برای انتقال بی نهایت کوچک به اندازه dx' در راستای x به کار می رود و

$$G \rightarrow \frac{H}{\hbar}, \quad \varepsilon \rightarrow dt \quad (۱۳-۱-۳)$$

برای یک تحول زمانی بی نهایت کوچک با جا به جایی زمانی dt مورد استفاده قرار می گیرد. از مکانیک کلاسیک می دانیم که تکانه‌ی زاویه‌ای ایجاد کننده‌ی چرخش است. همان طور که تکانه و هامیلتونی به ترتیب، ایجاد کننده‌ی انتقال و تحول زمانی بودند. بنابراین عملگر تکانه‌ی زاویه‌ای \mathbf{J}_k را به طریقی مشابه، به عنوان عملگری تعریف می کنیم که یک چرخش بی نهایت کوچک حول محور k ام به اندازه‌ی زاویه‌ی $d\phi \rightarrow 0$ ایجاد می کند و این چرخش با قرارداد

$$G \rightarrow \frac{\mathbf{J}_k}{\hbar}, \quad \varepsilon \rightarrow d\phi \quad (۱۴-۱-۳)$$

در عبارت (۱۱-۱-۳) به دست می آید. با هریتی بودن \mathbf{J}_k داده شده، یکانی بودن عملگر چرخش تضمین می شود همچنین با این خاصیت (هریتی بودن \mathbf{J}_k) عملگر چرخش در حد $d\phi$ به یک عملگر واحد تقلیل می یابد. به طور کلی تر، داریم:

$$\mathcal{D}(\hat{\mathbf{n}}, d\phi) = 1 - i \left(\frac{\mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{n}}}{\hbar} \right) d\phi \quad (۱۵-۱-۳)$$

این عبارت برای چرخشی نوشته شده که حول محوری در جهت بردار واحد $\hat{\mathbf{n}}$ به اندازه‌ی $d\phi$ صورت می پذیرد. در این کتاب تأکید می کنیم که عملگر تکانه‌ی زاویه‌ای را با $\mathbf{x} \times \mathbf{p}$ تعریف نمی کنیم. این مسأله از آن جهت مهم است که تکانه‌ی زاویه‌ای اسپینی که در فرمول بندی کلی ما وارد می شود با x_i و p_j تعریف نمی گردد. به بیان دیگر، در مکانیک کلاسیک می توان ثابت کرد که تکانه‌ی زاویه‌ای که با $\mathbf{x} \times \mathbf{p}$ تعریف می شود ایجاد کننده‌ی چرخش است، در عوض در مکانیک کوانتومی \mathbf{J} را عملگری تعریف می کنیم که با یک چرخش بی نهایت کوچک از (۱۵-۱-۳) حاصل شود.

یک چرخش محدود را می توان از اعمال متوالی چرخش های بی نهایت کوچک، پیرامون یک محور خاص به دست آورد. برای مثال اگر یک چرخش محدود را حول محور z به زاویه ϕ بخواهیم، فرض می کنیم:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_z(\phi) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left[1 - i \left(\frac{J_z}{\hbar} \right) \left(\frac{\phi}{N} \right) \right]^N \\ &= \exp \left(- \frac{i J_z \phi}{\hbar} \right) \\ &= 1 - \frac{i J_z \phi}{\hbar} - \frac{J_z^2 \phi^2}{2 \hbar^2} + \dots \end{aligned} \quad (۱۶-۱-۳)$$

برای به دست آوردن روابط جابه‌جایی تکانه‌ی زاویه‌ای، به مفاهیم بیشتری نیاز داریم. از قبل به یاد می‌آوریم که برای هر چرخش R که با یک ماتریس 3×3 متعامد R نمایش داده می‌شود یک عملگر چرخش $\mathcal{D}(R)$ در فضای کت مناسب وجود دارد. به‌عنوان اصل موضوعه، بیان می‌کنیم که $\mathcal{D}(R)$ یک گروه ویژگی یکسان با R دارد:

$$R \cdot 1 = R \Rightarrow \mathcal{D}(R) \cdot 1 = \mathcal{D}(R) \quad \text{همانی بودن:} \quad (3-17-الف)$$

$$R_1 R_2 = R_3 \Rightarrow \mathcal{D}(R_1) \mathcal{D}(R_2) = \mathcal{D}(R_3) \quad \text{بسته بودن:} \quad (3-17-ب)$$

$$\begin{aligned} RR^{-1} = 1 &\Rightarrow \mathcal{D}(R) \mathcal{D}^{-1}(R) = 1 \\ R^{-1}R = 1 &\Rightarrow \mathcal{D}^{-1}(R) \mathcal{D}(R) = 1 \end{aligned} \quad \text{معکوس پذیری:} \quad (3-17-ج)$$

$$\begin{aligned} R_1(R_2 R_3) &= (R_1 R_2) R_3 = R_1 R_2 R_3 \\ &\Rightarrow \mathcal{D}(R_1) [\mathcal{D}(R_2) \mathcal{D}(R_3)] \\ &= [\mathcal{D}(R_1) \mathcal{D}(R_2)] \mathcal{D}(R_3) \\ &= \mathcal{D}(R_1) \mathcal{D}(R_2) \mathcal{D}(R_3) \end{aligned} \quad \text{شرکت پذیری:} \quad (3-17-د)$$

حال بگذارید به روابط جابه‌جایی بنیادین برای عملگرهای چرخش (۳-۱-۹) که برحسب ماتریس‌های R نوشته شده‌اند بازگردیم. مشابه آن را برای عملگر چرخش می‌نویسیم:

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{iJ_x \varepsilon}{\hbar} - \frac{J_x^2 \varepsilon^2}{2\hbar^2}\right) \left(1 - \frac{iJ_y \varepsilon}{\hbar} - \frac{J_y^2 \varepsilon^2}{2\hbar^2}\right) \\ - \left(1 - \frac{iJ_y \varepsilon}{\hbar} - \frac{J_y^2 \varepsilon^2}{2\hbar^2}\right) \left(1 - \frac{iJ_x \varepsilon}{\hbar} - \frac{J_x^2 \varepsilon^2}{2\hbar^2}\right) = 1 - \frac{iJ_z \varepsilon^2}{\hbar} - 1 \end{aligned} \quad (3-18-۱)$$

جملات ε به‌طور خودکار حذف می‌شوند. با مساوی قرار دادن جملات ε^2 در دو طرف (۳-۱-۱۸) به دست می‌آوریم:

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z \quad (3-19-۱)$$

با تکرار همین کار برای چرخش حول محورهای دیگر داریم:

$$[J_i, J_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} J_k \quad (3-20-۱)$$

که به‌عنوان روابط جابه‌جایی بنیادی تکانه‌ی زاویه‌ای شناخته می‌شوند.

در حالت کلی، وقتی ایجادکننده‌های تبدیلات بی‌نهایت کوچک با هم جابه‌جا نشوند، به گروه عمل‌های متناظر آن‌ها غیرآبلی گفته می‌شود. با توجه به (۳-۱-۲۰)، گروه چرخش در سه بعد، غیرآبلی است. در مقابل، گروه انتقال در سه بعد آبلی است چون حتی اگر $i \neq j$ باشد، p_i و p_j با هم جابه‌جا می‌شوند.

تأکید می‌کنیم که در به‌دست آوردن روابط جابه‌جایی (۳-۱-۲۰) از دو مفهوم استفاده کردیم:

۱- \mathbf{J}_k ایجادکننده‌ی چرخش حول محور k است.

۲- چرخش حول محورهای مختصات جابه‌جا ناپذیرند.

این اغراق نیست اگر که بگوییم، روابط جابه‌جایی (۳-۱-۲۰) همگی خواص چرخش در سه بعد را به طریق فشرده در بر گرفته‌اند.

۲.۳ سیستم اسپین $\frac{1}{2}$ و چرخش‌های محدود

عملگر چرخش برای اسپین $\frac{1}{2}$

N نشان‌دهنده‌ی بُعدی است که روابط تکانه‌ی زاویه‌ای در آن نوشته می‌شوند. کمترین عدد برای N برابر با ۲ است. خواننده قبلاً باید در مسأله‌ی ۸ فصل ۱ به‌دست آورده باشد که عملگرهایی که با

$$S_x = \left(\frac{\hbar}{2}\right) \{ (|+\rangle\langle -|) + (|- \rangle\langle +|) \}$$

$$S_y = \left(\frac{i\hbar}{2}\right) \{ -(|+\rangle\langle -|) + (|- \rangle\langle +|) \}$$

$$S_z = \left(\frac{\hbar}{2}\right) \{ (|+\rangle\langle +|) - (|- \rangle\langle -|) \}$$

(۱-۲-۳)

تعریف می‌شوند، با تعویض S_k با \mathbf{J}_k در روابط جابه‌جایی (۳-۱-۲۰) صدق می‌کند. به‌عنوان پیش‌فرض، نمی‌توان گفت که طبیعت برای کار در کمترین بعد (۳-۱-۲۰) مزیتی قائل می‌شود. اما آزمایش‌های زیادی- از طیف‌سنجی اتمی گرفته تا تشدید مغناطیسی هسته‌ای- وجود دارد که می‌تواند ما را متقاعد کند که این مسأله حقیقت دارد.

چرخشی به‌اندازه‌ی زاویه‌ی ϕ حول محور z در نظر بگیریم. اگر کت سیستم اسپین $\frac{1}{2}$ قبل از چرخش

با $|\alpha\rangle$ نمایش داده شود. این کت پس از چرخش با عبارت زیر نشان داده می‌شود:

$$|\alpha\rangle_R = \mathcal{D}_z(\phi)|\alpha\rangle$$

(۲-۲-۳)

که در آن:

$$\mathcal{D}_z(\phi) = \exp\left(\frac{-iS_z\phi}{\hbar}\right) \quad (۳-۲-۳)$$

است. برای اینکه ببینید این عملگر واقعاً یک سیستم فیزیکی را می‌چرخاند، بگذارید تا به اثر آن روی $\langle S_x \rangle$ نگاه کنیم. این مقدار انتظاری تحت چرخش به صورت زیر تغییر می‌یابد:

$$\langle S_x \rangle \rightarrow_R \langle \alpha | S_x | \alpha \rangle_R = \langle \alpha | \mathcal{D}_z^\dagger(\phi) S_x \mathcal{D}_z(\phi) | \alpha \rangle \quad (۴-۲-۳)$$

بنابراین باید عبارت زیر را محاسبه کنیم:

$$\exp\left(\frac{iS_z\phi}{\hbar}\right) S_x \exp\left(\frac{-iS_z\phi}{\hbar}\right) \quad (۵-۲-۳)$$

به خاطر مسائل آموزشی این عبارت را از دو راه متفاوت محاسبه می‌کنیم.

روش ۱: در این جا از شکل ویژه‌ی S_x که با (۱-۲-۳) داده شده است، استفاده می‌کنیم و سپس برای

(۵-۲-۳) به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\hbar}{2}\right) \exp\left(\frac{iS_z\phi}{\hbar}\right) \{(|+\rangle\langle -|) + (|- \rangle\langle +|)\} \exp\left(\frac{-iS_z\phi}{\hbar}\right) \\ &= \left(\frac{\hbar}{2}\right) (e^{i\phi/2}|+\rangle\langle -| - e^{i\phi/2}|- \rangle\langle +| + e^{-i\phi/2}|- \rangle\langle +| + e^{-i\phi/2}|+\rangle\langle -|) \\ &= \frac{\hbar}{2} [\{(|+\rangle\langle -|) + (|- \rangle\langle +|)\} \cos \phi + i\{(|+\rangle\langle -|) - (|- \rangle\langle +|)\} \sin \phi] \\ &= S_x \cos \phi - S_y \sin \phi \end{aligned} \quad (۶-۲-۳)$$

روش ۲: از طرف دیگر، می‌توانیم از رابطه‌ی (۲-۳-۴۷) برای حل (۵-۲-۳) استفاده کنیم:

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{iS_z\phi}{\hbar}\right) S_x \exp\left(\frac{-iS_z\phi}{\hbar}\right) &= S_x + \left(\frac{i\phi}{\hbar}\right) \underbrace{[S_z, S_x]}_{i\hbar S_y} \\ &+ \left(\frac{1}{2!}\right) \left(\frac{i\phi}{\hbar}\right)^2 \underbrace{[S_z, [S_z, S_x]]}_{i\hbar S_x} + \left(\frac{1}{3!}\right) \left(\frac{i\phi}{\hbar}\right)^3 \underbrace{[S_z, [S_z, [S_z, S_x]]]}_{\hbar^2 S_x} + \dots \\ &= S_x \left[1 - \frac{\phi^2}{2!} + \dots\right] - S_y \left[\phi - \frac{\phi^3}{3!} + \dots\right] \\ &= S_x \cos \phi - S_y \sin \phi \end{aligned}$$

به این نکته توجه کنید که در روش ۲ ما تنها از روابط جابه‌جایی برای S_i ، استفاده کردیم. بنابراین این روش را می‌توان به چرخش سیستم‌هایی با تکانه‌ی زاویه‌ای بالاتر از $\frac{1}{2}\pi$ ، نیز تعمیم داد.

هر دو روش، برای اسپین $\frac{1}{2}$ می‌دهند:

$$\langle S_x \rangle \rightarrow_R \langle \alpha | S_x | \alpha \rangle_R = \langle S_x \rangle \cos \phi - \langle S_y \rangle \sin \phi \quad (۸-۲-۳)$$

که در آن مقدار انتظاری بدون شاخص پایین، یعنی نسبت به حالت بدون چرخش (قدیمی) سیستم، سنجیده می‌شود. به‌طور مشابه:

$$\langle S_y \rangle \rightarrow \langle S_y \rangle \cos \phi + \langle S_x \rangle \sin \phi \quad (۹-۲-۳)$$

اما مقدار انتظاری S_z بدون تغییر باقی می‌ماند. چون S_z با $\mathcal{D}_z(\phi)$ جابه‌جا می‌شود:

$$\langle S_z \rangle \rightarrow \langle S_z \rangle \quad (۱۰-۲-۳)$$

روابط (۸-۲-۳)، (۹-۲-۳) و (۱۰-۲-۳) کاملاً منطقی هستند. این روابط نشان می‌دهند که وقتی عملگر چرخش (۳-۲-۳) روی کت حالت اثر می‌کند، مقدار انتظاری S را حول محور z به اندازه‌ی ϕ می‌چرخاند. به عبارت دیگر، مقدار انتظاری عملگر اسپین طوری رفتار می‌کند که انگار یک بردار کلاسیکی می‌چرخد:

$$\langle S_k \rangle \rightarrow \sum_l R_{kl} \langle S_l \rangle \quad (۱۱-۲-۳)$$

که در آن R_{kl} آرایه‌های ماتریس متعامد 3×3 R هستند و در چرخش مسأله صدق می‌کنند. از روش ۲ روشن است که این خاصیت، محدود به عملگر اسپین سیستم‌های اسپین $\frac{1}{2}$ نیست. در حالت کلی تحت چرخش داریم:

$$\langle J_k \rangle \rightarrow \sum_l R_{kl} \langle J_l \rangle \quad (۱۲-۲-۳)$$

که در آن J_k ، ایجادکننده‌ی چرخش است و در روابط جابه‌جایی تکانه‌ی زاویه‌ای (۳-۱-۲۰) صدق می‌کند. پیش‌تر نشان دادیم که روابطی از این دست را می‌توان به هر عملگر برداری دیگری تعمیم داد.

بنابراین، تا به این جا همه چیز همان‌طور است که انتظار می‌رفت. اما اکنون، آماده‌ی یک امر غافلگیرکننده باشید! می‌خواهیم تأثیر عملگر چرخش (۳-۲-۳) را روی کت کلی زیر بیازماییم:

$$|\alpha\rangle = |+\rangle \langle +|\alpha\rangle + |-\rangle \langle -|\alpha\rangle \quad (۱۳-۲-۳)$$

این آزمون را با کمی دقت بیشتر انجام می‌دهیم. می‌بینیم که:

$$\exp\left(\frac{-iS_z\phi}{\hbar}\right)|\alpha\rangle = e^{-i\phi/2}|+\rangle \langle +|\alpha\rangle + e^{i\phi/2}|-\rangle \langle -|\alpha\rangle \quad (۱۴-۲-۳)$$

در این جا، $\phi/2$ ، رخداد نیم‌زاویه‌ای $\phi/2$ ، نتایج بسیار جالبی در بر خواهد داشت.

حال بگذارید چرخشی به اندازه‌ی 2π را در نظر بگیریم. آنگاه خواهیم داشت:

$$|\alpha\rangle_{R_z(2\pi)} \rightarrow -|\alpha\rangle \quad (۱۵-۲-۳)$$

بنابراین کت ناشی از چرخش 360° با کت اولیه، در یک علامت منفی متفاوت است. ما به یک چرخش 720° ($\phi = 4\pi$) نیاز داریم تا دوباره به کت مشابهی با علامت مثبت برسیم. دقت کنید که این علامت منفی برای مقادیر انتظاری S ظاهر نمی‌شود، چون S توسط $|\alpha\rangle$ و $|\alpha\rangle$ ساندویچ شده است و هر دوی این کت‌ها تغییر علامت می‌دهند. آیا این علامت منفی جایی قابل مشاهده است؟ پس از این که یک بار دیگر درباره‌ی حرکت تقدیمی اسپین به بحث پرداختیم، به این سؤال جواب می‌دهیم.

بازنگری حرکت تقدیمی اسپین

اکنون از نقطه نظر جدیدی به بحث درباره‌ی مسأله‌ی حرکت تقدیمی اسپین، که قبلاً در بخش ۱-۲ درباره‌ی آن حرف زده بودیم، می‌پردازیم. به یاد می‌آوریم که هامیلتونی اصلی مسأله با عبارت زیر داده می‌شد:

$$H = -\left(\frac{e}{m_e c}\right) \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} = \omega S_z \quad (۱۶-۲-۳)$$

که در آن

$$\omega \equiv \frac{|e|B}{m_e c} \quad (۱۷-۲-۳)$$

عملگر تحول زمانی بر پایه‌ی این هامیلتونی با عبارت زیر داده می‌شود:

$$\mathcal{U}(t, 0) = \exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right) = \exp\left(\frac{-iS_z \omega t}{\hbar}\right) \quad (۱۸-۲-۳)$$

با مقایسه‌ی این رابطه و رابطه‌ی (۳-۲-۳)، می‌بینیم که با مساوی قرار دادن ϕ و ωt ، این عملگر تحول زمانی، دقیقاً شبیه به عملگر چرخش در (۳-۲-۳) است. به این ترتیب فوراً می‌بینیم که چرا این هامیلتونی، منجر به حرکت تقدیمی اسپین می‌شود. با استفاده از روابط (۸-۲-۳)، (۹-۲-۳) و (۱۰-۲-۳)، به دست می‌آوریم:

$$\langle S_x \rangle_t = \langle S_x \rangle_{t=0} \cos \omega t - \langle S_y \rangle_{t=0} \sin \omega t \quad (\text{الف } ۱۹-۲-۳)$$

$$\langle S_y \rangle_t = \langle S_y \rangle_{t=0} \cos \omega t + \langle S_x \rangle_{t=0} \sin \omega t \quad (\text{ب } ۱۹-۲-۳)$$

$$\langle S_z \rangle_t = \langle S_z \rangle_{t=0} \quad (\text{ج } ۱۹-۲-۳)$$

پس از طی زمان $t = 2\pi/\omega$ ، اسپین به جای اصلی خود باز می‌گردد.

این مجموعه معادلات را می‌توان در بحث حرکت تقدیمی یک مئون، ذره‌ای شبیه به الکترون اما ۲۱۰ بار سنگین‌تر، به کار برد. تکانه‌ی مغناطیسی مئون را می‌توان از نمونه آزمایش به‌دست آورد که مقدار آن برابر با $e\hbar/2m_\mu c$ است (برای مثال، خطوط طیفی فوق ریز مئونیوم که یک حالت مقید از یک مئون مثبت و یک الکترون است). این دقیقاً همان چیزی است که از نظریه‌ی نسبیتی دیراک برای ذرات با اسپین $\frac{1}{2}$ ، انتظار می‌رود (ما در این جا از تصحیحات بسیار کوچکی که ناشی از اثرات نظریه‌ی میدان کوانتومی است، صرف نظر کردیم). با دانستن تکانه‌ی مغناطیسی، می‌توانیم فرکانس زاویه‌ای حرکت تقدیمی را پیش‌بینی کنیم. بنابراین (۳-۲-۱۹) صحیح است و در واقع این رابطه به‌طور تجربی آزموده می‌شود. در عمل، میدان مغناطیسی خارجی منجر به حرکت تقدیمی اسپین می‌شود، جهت اسپین از این واقعیت به‌دست می‌آید که الکترون‌های حاصل از واپاشی مئون، ترجیح می‌دهند که در خلاف جهت اسپین مئون منتشر شوند.

اکنون بگذارید تا به تحول زمانی خود کت حالت پردازیم. فرض می‌کنیم که کت اولیه ($t=0$) همان کتی است که در (۳-۲-۱۳) داده شده است. پس از طی زمان t به‌دست می‌آوریم:

$$|\alpha, t_0=0; t\rangle = e^{-i\omega t/2}|+\rangle\langle +|\alpha\rangle + e^{+i\omega t/2}|-\rangle\langle -|\alpha\rangle \quad (۳-۲-۲۰)$$

عبارت (۳-۲-۲۰) در $t = 2\pi/\omega$ یک علامت منفی می‌گیرد و باید صبر کنیم تا پس از زمان $t = 4\pi/\omega$ کت به حالت اولیه‌ی خود با علامت یکسان با آن حالت بازگردد.

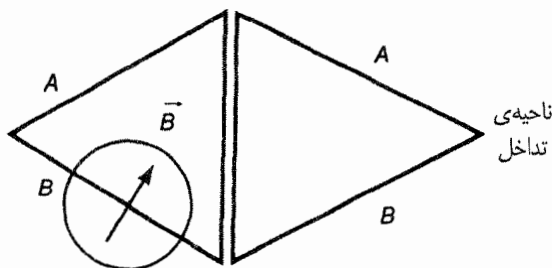
بنابراین، دوره‌ی تناوب کت حالت دو برابر طولانی‌تر از دوره‌ی تناوب حرکت تقدیمی اسپین است:

$$\tau_{\text{حرکت تقدیمی}} = \frac{2\pi}{\omega} \quad (۳-۲-۲۱ \text{ الف})$$

$$\tau_{\text{کت حالت}} = \frac{4\pi}{\omega} \quad (۳-۲-۲۱ \text{ ب})$$

آزمایش تداخل سنجی نوترون برای مطالعه‌ی چرخش‌های 2π

اکنون به شرح آزمایشی می‌پردازیم که برای مشخص کردن علامت منفی در (۳-۲-۱۵) انجام شده است. کاملاً روشن است که اگر همه‌ی کت‌های حالت در جهان در یک منفی ضرب شوند، اثر قابل مشاهده‌ای وجود نخواهد داشت. تنها راه برای تعیین علامت منفی پیش‌بینی شده، انجام مقایسه‌ای بین کت نچرخیده با یک کت چرخیده است. همچون تداخل کوانتومی ناشی از گرانش که در بخش ۲-۶ درباره‌ی آن به بحث پرداختیم، برای نشان دادن این پیش‌بینی فوق‌العاده‌ی مکانیک کوانتومی، اتکای ما بر فن تداخل سنجی نوترون است.



شکل ۲-۳: آزمایشی برای بررسی وجود علامت منفی پیش‌بینی شده، تحت چرخش 2π

باریکه‌ی تقریباً هم انرژی نوترون‌های گرمایی به دو مسیر A و مسیر B شکافته می‌شود. شکل ۲-۳ را ببینید. مسیر A همیشه از یک منطقه‌ی خالی از میدان مغناطیسی عبور می‌کند. در عوض مسیر B از ناحیه‌ی کوچکی عبور می‌کند که در آن یک میدان مغناطیسی ثابت وجود دارد. به‌عنوان یک نتیجه، کت حالت نوترونی که از مسیر B عبور می‌کند یک تغییر فاز $e^{\mp i\omega T/2}$ می‌یابد، که در آن T مدت زمانی است که صرف شده است تا نوترون از ناحیه‌ی $B \neq 0$ بگذرد و ω فرکانس حرکت تقدیمی اسپین است:

$$\omega = \frac{g_n e B}{m_p c}, \quad (g_n \approx -1.91) \quad (22-2-3)$$

این رابطه برای نوترونی با تکانه‌ی مغناطیسی $g_n e \hbar / 2m_p c$ نوشته شده است. با مقایسه‌ی این رابطه با (۲-۳)-۱۷ که برای الکترونی با تکانه‌ی مغناطیسی $e \hbar / 2m_e c$ نوشته شده است، مقدار $e \hbar / 2m_e c$ برای تکانه مغناطیسی نوترون به دست می‌آید.

هنگامی که مسیرهای A و B دوباره در ناحیه‌ی تداخل شکل ۲-۳ به هم می‌رسند، دامنه‌ی نوترونی که از مسیر B رسیده است برابر است با:

$$c_2 = c_2(B=0) e^{\mp i\omega T/2} \quad (23-2-3)$$

در حالی که دامنه‌ی نوترون رسیده از مسیر A برابر با c_1 و مستقل از B است. بنابراین شدت مشاهده شده در ناحیه‌ی تداخل می‌بایست دارای تغییرات سینوسی باشد:

$$\cos\left(\frac{\mp \omega T}{2} + \delta\right) \quad (24-2-3)$$

که در آن δ اختلاف فاز بین c_1 و $c_2(B=0)$ می‌باشد. در عمل، T که همان مدت زمان سپری شده در ناحیه‌ی $B \neq 0$ است، ثابت می‌ماند اما فرکانس حرکت تقدیمی ω ، با تغییر شدت میدان مغناطیسی متغیر است. پیش‌بینی می‌شود که شدت در ناحیه‌ی تداخلی به‌عنوان تابعی از B دارای تغییرات سینوسی باشد. اگر ΔB برابر با تغییرات مورد نیاز در B، برای ایجاد پیشینه‌های متوالی باشد، به آسانی می‌توان نشان داد که:

$$\Delta B = \frac{4\pi\hbar c}{eg_n\lambda l} \quad (۲۵-۲-۳)$$

که در آن l طول مسیر است.

برای استخراج این فرمول از این واقعیت سود بردیم که برای ایجاد کت اولیه پس از چرخش، به یک چرخش 4π نیاز داریم. از طرف دیگر، اگر توصیف ما از سیستم‌های اسپین $\frac{1}{2}$ اشتباه باشد و کت پس از 2π چرخش به حالت اولیه با علامت یکسان با علامت اولیه برسد، مقدار پیش‌بینی شده برای ΔB در (۲۵-۲-۳) را باید نصف کرد.

دو گروه مختلف به‌طور آزمایشگاهی نتیجه گرفتند که پیش‌بینی (۲۵-۲-۳) با خطای کمتر از یک درصد درست است.* این پیروزی دیگری برای مکانیک کوانتومی بود. پیش‌بینی ارزشمند (۱۵-۲-۳) به‌روشنی مستقیم در آزمایشگاه اثبات شده است.

فرمول‌بندی دو مؤلفه‌ای پاؤلی

با استفاده از فرمول‌بندی اسپینورهای دو مؤلفه‌ای که در سال ۱۹۲۶ توسط دلیو - پاؤلی معرفی شد، کار کردن با کت‌های حالت سیستم‌های اسپین $\frac{1}{2}$ ساده‌تر می‌شود. در بخش ۱-۳ آموختیم که چگونه می‌توان یک کت (برای) را با یک ماتریس ستونی (سطری) نشان داد. تنها باید ضرایب بسط را برحسب مجموعه‌ای معین از کت‌های پایه، در یک ماتریس ستونی (سطری) قرار دهیم. در مورد اسپین $\frac{1}{2}$ برای کت‌های پایه و براها داریم:

$$\begin{aligned} |+\rangle &\doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv \chi_+ & |-\rangle &\doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv \chi_- \\ \langle +| &\doteq (1, 0) = \chi_+^\dagger & \langle -| &\doteq (0, 1) = \chi_-^\dagger \end{aligned} \quad (۲۶-۲-۳)$$

و برای یک کت حالت اختیاری و برا حالت متناظر آن داریم:

$$|\alpha\rangle = |+\rangle\langle +|\alpha\rangle + |-\rangle\langle -|\alpha\rangle \doteq \begin{pmatrix} \langle +|\alpha\rangle \\ \langle -|\alpha\rangle \end{pmatrix} \quad (۲۷-۲-۳) \text{ الف}$$

و

$$\langle \alpha| = \langle \alpha|+\rangle\langle +| + \langle \alpha|-\rangle\langle -| \doteq (\langle \alpha|+, \langle \alpha|-) \quad (۲۷-۲-۳) \text{ ب}$$

ماتریس ستونی (۳-۲-۲۷ الف) به‌عنوان یک اسپینور دومؤلفه‌ای است و به‌صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\chi = \begin{pmatrix} \langle + | \alpha \rangle \\ \langle - | \alpha \rangle \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix}$$

$$= c_+ \chi_+ + c_- \chi_- \quad (28-2-3)$$

که در آن c_+ و c_- در حالت کلی اعداد مختلطی هستند. برای χ^\dagger داریم:

$$\chi^\dagger = (\langle \alpha | + \rangle, \langle \alpha | - \rangle) = (c_+^*, c_-^*) \quad (29-2-3)$$

آرایه‌های ماتریس $\langle \pm | S_k | \pm \rangle$ و $\langle \pm | S_k | - \rangle$ ، صرف نظر از $\hbar/2$ ، معادل با ماتریس‌های 2×2 σ_k هستند که به ماتریس‌های پاؤلی مشهورند. تعریف می‌کنیم:

$$\langle \pm | S_k | \pm \rangle \equiv \left(\frac{\hbar}{2} \right) (\sigma_k)_{\pm, \pm}, \quad \langle \pm | S_k | - \rangle \equiv \left(\frac{\hbar}{2} \right) (\sigma_k)_{\pm, -} \quad (30-2-3)$$

اکنون می‌توانیم مقدار انتظاری $\langle S_k \rangle$ را برحسب χ و σ_k بنویسیم:

$$\langle S_k \rangle = \langle \alpha | S_k | \alpha \rangle = \sum_{a' = +, -} \sum_{a'' = +, -} \langle \alpha | a' \rangle \langle a' | S_k | a'' \rangle \langle a'' | \alpha \rangle$$

$$= \left(\frac{\hbar}{2} \right) \chi^\dagger \sigma_k \chi \quad (31-2-3)$$

که در آن در خط آخر از ضرب معمولی ماتریسی استفاده شده است. به‌طور صریح از (۳-۲-۱) و (۳-۲-۳۰) می‌بینیم که:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (32-2-3)$$

که در آن شاخص‌های ۱، ۲ و ۳ به ترتیب به x ، y و z اشاره دارند.

برخی از خواص ماتریس‌های پاؤلی را ذکر می‌کنیم. نخست:

$$\sigma_i^2 = 1 \quad (33-2-3 \text{ الف})$$

$$\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 0, \quad \text{for } i \neq j \quad (33-2-3 \text{ ب})$$

که در آن طرف راست (۳-۲-۳۳ الف)، همان ماتریس یکانی 2×2 است. البته این دو رابطه، معادل با رابطه‌ی پادجاب‌جاگری زیر است:

$$\{ \sigma_i, \sigma_j \} = 2\delta_{ij} \quad (34-2-3)$$

همچنین می‌توانیم رابطه‌ی جابه‌جاگری زیر را نیز داشته باشیم:

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk} \sigma_k \quad (35-2-3)$$

که می‌توان آن را شکل صریح ماتریس 2×2 ی روابط جابه‌جایی تکانه‌ی زاویه‌ای (۳-۲-۲۰) دانست. با ترکیب (۳-۲-۲۴) و (۳-۲-۲۵) می‌توان به‌دست آورد:

$$\sigma_1 \sigma_2 = -\sigma_2 \sigma_1 = i\sigma_3 \dots \quad (۳-۲-۳۶)$$

همچنین توجه کنید که:

$$\sigma_i^\dagger = \sigma_i \quad (۳-۲-۳۷ \text{ الف})$$

$$\det(\sigma_i) = -1 \quad (۳-۲-۳۷ \text{ ب})$$

$$\text{Tr}(\sigma_i) = 0 \quad (۳-۲-۳۷ \text{ ج})$$

اکنون $\sigma \cdot \mathbf{a}$ که در آن \mathbf{a} برداری در سه بعد است، را در نظر می‌گیریم. در واقع این عبارت یک ماتریس 2×2 است. بنابراین:

$$\begin{aligned} \sigma \cdot \mathbf{a} &\equiv \sum_k a_k \sigma_k \\ &= \begin{pmatrix} +a_3 & a_1 - ia_2 \\ a_1 + ia_2 & -a_3 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (۳-۲-۳۸)$$

همچنین تساوی بسیار مهمی وجود دارد:

$$(\sigma \cdot \mathbf{a})(\sigma \cdot \mathbf{b}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i\sigma \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \quad (۳-۲-۳۹)$$

برای اثبات این رابطه تنها به روابط پاد جابه‌جایی و جابه‌جایی یعنی (۳-۲-۳۴) و (۳-۲-۳۵) نیاز داریم:

$$\begin{aligned} \sum_j \sigma_j a_j \sum_k \sigma_k b_k &= \sum_j \sum_k \left(\frac{1}{2} \{ \sigma_j, \sigma_k \} + \frac{1}{2} [\sigma_j, \sigma_k] \right) a_j b_k \\ &= \sum_j \sum_k (\delta_{jk} + i\epsilon_{jkl} \sigma_l) a_j b_k \\ &= \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i\sigma \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \end{aligned} \quad (۳-۲-۴۰)$$

اگر مؤلفه‌های \mathbf{a} حقیقی باشند، داریم:

$$(\sigma \cdot \mathbf{a})^2 = |\mathbf{a}|^2 \quad (۳-۲-۴۱)$$

که در آن $|\mathbf{a}|$ بزرگی بردار \mathbf{a} است.

چرخش در فرمول‌بندی دو مؤلفه‌ای

اکنون بگذارید تا نمایش ماتریس 2×2 ی عملگر چرخش $\mathcal{D}(\hat{n}, \phi)$ را مطالعه کنیم. داریم:

$$\exp\left(\frac{-i\mathbf{S} \cdot \hat{n} \phi}{\hbar}\right) \doteq \exp\left(\frac{-i\sigma \cdot \hat{n} \phi}{2}\right) \quad (۴۲-۲-۳)$$

با استفاده از

$$(\sigma \cdot \hat{n})^n = \begin{cases} 1 & \text{برای } n \text{ های زوج} \\ \sigma \cdot \hat{n} & \text{برای } n \text{ های فرد} \end{cases} \quad (۴۳-۲-۳)$$

که از (۴۱-۲-۳) به دست می‌آید، می‌توان نوشت:

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{-i\sigma \cdot \hat{n} \phi}{2}\right) &= \left[1 - \frac{(\sigma \cdot \hat{n})^2}{2!} \left(\frac{\phi}{2}\right)^2 + \frac{(\sigma \cdot \hat{n})^4}{4!} \left(\frac{\phi}{2}\right)^4 - \dots \right] \\ &\quad - i \left[(\sigma \cdot \hat{n}) \frac{\phi}{2} - \frac{(\sigma \cdot \hat{n})^3}{3!} \left(\frac{\phi}{2}\right)^3 + \dots \right] \\ &= \mathbf{1} \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) - i\sigma \cdot \hat{n} \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \end{aligned} \quad (۴۴-۲-۳)$$

به‌طور آشکار، به‌شکل ماتریس 2×2 داریم:

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{-i\sigma \cdot \hat{n} \phi}{2}\right) &= \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) - in_z \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & (-in_x - n_y) \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \\ (-in_x + n_y) \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) + in_z \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \end{pmatrix} \\ \sigma_1 \sigma_2 &= -\sigma_2 \sigma_1 = i\sigma_3 \dots \end{aligned} \quad (۴۵-۲-۳)$$

همان‌طور که عملگر $\exp(-i\mathbf{S} \cdot \hat{n} \phi / \hbar)$ روی کت حالت $|\alpha\rangle$ عمل می‌کند. ماتریس 2×2 $\exp(-i\sigma \cdot \hat{n} \phi / 2)$ نیز روی اسپینور دو مؤلفه‌ای χ عمل می‌کند. تحت چرخش، χ را به‌شکل زیر تغییر می‌دهیم:

$$\chi \rightarrow \exp\left(\frac{-i\sigma \cdot \hat{n} \phi}{2}\right) \chi \quad (۴۶-۲-۳)$$

از طرف دیگر، خود σ_k تحت چرخش بدون تغییر می ماند. به طور مستقیم بیان می کنیم که σ ، برخلاف چیزی که به نظر می رسد، همانند یک بردار نیست. بلکه این $\chi^\dagger \sigma \chi$ است که از خواص انتقالی یک بردار پیروی می کند.

$$\chi^\dagger \sigma_k \chi \rightarrow \sum_l R_{kl} \chi^\dagger \sigma_l \chi \quad (۴۷-۲-۳)$$

اثبات صریح این مطلب با استفاده از

$$\exp\left(\frac{i\sigma_3\phi}{2}\right) \sigma_1 \exp\left(\frac{-i\sigma_3\phi}{2}\right) = \sigma_1 \cos \phi - \sigma_2 \sin \phi \quad (۴۸-۲-۳)$$

به دست می آید. و این ماتریس 2×2 معادل (۶-۲-۳) است.

در بحث چرخش 2π با استفاده از فرمول بندی کت، می بینیم که کت اسپین $\frac{1}{2}$ به $|\alpha\rangle$ به $|\alpha\rangle -$ می رود. بیان ماتریسی 2×2 این عبارت به شکل زیر است:

$$\exp\left(\frac{-i\sigma \cdot \hat{n}\phi}{2}\right) \Big|_{\phi=2\pi} = -1, \quad \text{for any } \hat{n} \quad (۴۹-۲-۳)$$

که از رابطه ی (۴۴-۲-۳)، آشکار است.

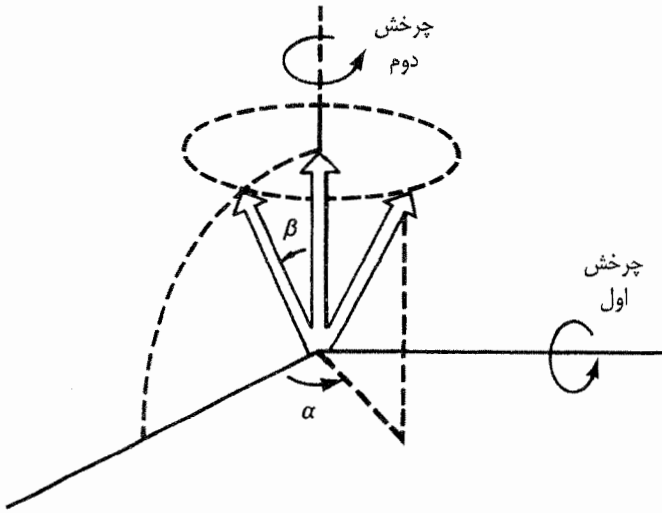
به عنوان یک کاربرد آموزنده از ماتریس چرخش (۴۵-۲-۳)، بگذارید تا ببینیم چطور می توان یک ویژه اسپینور $\sigma \cdot \hat{n}$ با ویژه مقدار $+1$ تشکیل داد که در آن \hat{n} بردار واحد در سمتی معین است. کار ما تشکیل χ است که در رابطه ی زیر صدق کند:

$$\sigma \cdot \hat{n} \chi = \chi \quad (۵۰-۲-۳)$$

به عبارت دیگر، به دنبال نمایش ماتریسی ستونی دو مؤلفه ای $|\mathbf{S} \cdot \hat{n}; +\rangle$ می گردیم که به صورت زیر تعریف می شود:

$$\mathbf{S} \cdot \hat{n} |\mathbf{S} \cdot \hat{n}; +\rangle = \left(\frac{\hbar}{2}\right) |\mathbf{S} \cdot \hat{n}; +\rangle \quad (۵۱-۲-۳)$$

در واقع این مسأله همچون یک مسأله ی ویژه مقداری سراسر حل می شود (مسأله ی ۹ فصل ۱ را ببینید). اما در این جا روش متفاوتی که بر پایه ی ماتریس چرخش (۴۵-۲-۳) استوار است را ارائه می دهیم.

شکل ۳-۳: تفسیر اسپینور $\sigma \cdot \hat{n}$

بگذارید تا زاویه‌های قطبی و سمتی را به ترتیب با β و α نشان دهیم. با $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ شروع می‌کنیم. این همان اسپینور دو مؤلفه‌ای است که حالت اسپین بالا را توصیف می‌کند. ابتدا چرخش را به اندازه زاویه β حول محور y انجام می‌دهیم و سپس به اندازه زاویه α حول z می‌چرخانیم. می‌بینیم که حالت اسپین توصیف شده به دست می‌آید (شکل ۳-۳ را ببینید). به زبان اسپینور پاؤلی این توالی عملگرها معادل آن است که نخست $\exp(-i\sigma_2\beta/2)$ را بر $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ اثر دهیم و به دنبال آن نیز $\exp(-i\sigma_3\alpha/2)$ را بر حاصل عبارت قبل اعمال می‌کنیم. پاسخ کل برابر است با:

$$\begin{aligned} \chi &= \left[\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) - i\sigma_3 \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right] \left[\cos\left(\frac{\beta}{2}\right) - i\sigma_2 \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \right] \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) - i \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) & 0 \\ 0 & \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) + i \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) & -\sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) e^{-i\alpha/2} \\ \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

(۵۲-۲-۳)

اگر بدانیم که عامل فاز مشترک در مؤلفه‌های بالا و پایین فاقد معنی است. این نتیجه کاملاً در توافق با پاسخ مسأله‌ی ۹ فصل ۱ است.

۳.۳ SO(3)، SU(2) و چرخش‌های اویلر

گروه متعامد

اکنون کمی اصولی‌تر به مطالعه‌ی مجموعه خواص عملگرهایی می‌پردازیم که در دو بخش قبل راجع به آن‌ها صحبت کردیم.

ابتدایی‌ترین نتایج حاصل از چرخش، به محور و زاویه‌ی چرخش تعیین شده بستگی دارد. واضح است که به سه عدد حقیقی برای مشخص کردن یک چرخش کلی نیاز داریم: زوایای قطبی و سمتی بردار یک‌ه‌ی \hat{n} که در جهت محور چرخش داده شده است و خود زاویه‌ی چرخش ϕ . به‌طور معادل، چرخش یکسانی را می‌توان با سه مؤلفه‌ی دکارتی بردار $\hat{n}\phi$ تعیین کرد. اما از نقطه نظر بررسی مجموعه‌ی خواص چرخش، این راه‌های تعیین چرخش چندان مناسب نیستند. یکی از دلایل آن، این است که نمی‌توانیم بردارهایی به شکل $\hat{n}\phi$ را برای نشان دادن چرخش با هم جمع کنیم، مگر وقتی که چرخش بسیار کوچک باشد و یا \hat{n} همواره در یک جهت باقی بماند. کار کردن با یک ماتریس متعامد 3×3 بسیار ساده‌تر است، چون اثر چرخش‌های متوالی را می‌توان تنها با ضرب ماتریس‌های متعامد مناسب به‌دست آورد.

چند متغیر مستقل در یک ماتریس 3×3 متعامد وجود دارد؟ یک ماتریس 3×3 حقیقی ۹ عضو دارد، اما از شرط تعامد داریم:

$$RR^T = 1 \quad (1-3-3)$$

که متناظر با ۶ معادله‌ی مستقل است چون ضرب RR^T شبیه به R^TR است و این خود ماتریسی با ۶ عضو مستقل است. به‌عنوان یک نتیجه ۳ عدد مستقل (یعنی ۶-۹) در R وجود دارد. شبیه به همان اعدادی که قبلاً با روش‌های مقدماتی‌تر به‌دست آمده بود.

مجموعه‌ی تمام عمل‌های ضربی با ماتریس‌های متعامد تشکیل یک گروه می‌دهند. با توجه به این مسأله در می‌یابیم که چهار خاصیت زیر برقرار خواهند بود:

۱- ضرب دو ماتریس متعامد، ماتریس متعامد دیگری است. این مسأله برقرار است چون:

$$(R_1 R_2)(R_1 R_2)^T = R_1 R_2 R_2^T R_1^T = 1 \quad (2-3-3)$$

۲- اصل شرکت‌پذیری برقرار است:

$$R_1(R_2 R_3) = (R_1 R_2) R_3 \quad (3-3-3)$$

۳- ماتریس یکانی 1 (که از نظر فیزیکی متناظر با عدم چرخش است) به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$R1 = 1R = R \quad (۴-۳-۳)$$

این ماتریس عضوی از مجموعه‌ی عام ماتریس‌های متعامد است.

۴- ماتریس معکوس R^{-1} که از لحاظ فیزیکی متناظر با چرخش در خلاف جهت است - به صورت زیر تعریف می‌گردد:

$$RR^{-1} = R^{-1}R = 1 \quad (۵-۳-۳)$$

این ماتریس نیز عضوی از همان مجموعه‌ی عام ماتریس‌های متعامد است.

این گروه به $SO(3)$ معروف‌اند. که S نشانه‌ی خاص (Special)، O نشانه‌ی متعامد (Orthogonal) و ۳ به نشانه‌ی سه بعدی بودن است. توجه کنید که در این جا تنها به عمل‌های چرخشی متعامد می‌پردازیم. به همین خاطر از $SO(3)$ به جای $O(3)$ استفاده می‌کنیم. (که شامل عمل معکوس سازی نیز می‌شود و در فصل ۴ به آن خواهیم پرداخت).

گروه تک‌پیمانه‌ای یکانی

در بخش قبل روش دیگری را برای تعیین یک چرخش دلخواه بررسی کردیم. یعنی ماتریسی 2×2 (۴۵-۲-۳) را پیدا کردیم، که به روی اسپینور دو مؤلفه‌ای X اثر می‌کند. به روشنی پیدااست که (۴۵-۲-۳) یکانی است. به عنوان یک نتیجه، c_+ و c_- که با توجه به (۲۸-۲-۳) به صورت زیر نوشته می‌شوند:

$$|c_+|^2 + |c_-|^2 = 1 \quad (۶-۳-۳)$$

ناوردا باقی می‌ماند. به علاوه، ماتریس (۴۵-۲-۳) تک‌پیمانه‌ای است، یعنی دترمینان آن برابر ۱ است. این مسأله در ادامه به طور صریح نشان داده می‌شود.

می‌توانیم بیشتر ماتریس‌های تک‌پیمانه‌ای را به صورت زیر بنویسیم:

$$U(a, b) = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \quad (۷-۳-۳)$$

که a و b اعداد مختلطی هستند و شرط تک‌پیمانه‌ای بودن را برآورده می‌کنند:

$$|a|^2 + |b|^2 = 1 \quad (۸-۳-۳)$$

به راحتی می توان خواص یکانی بودن (۷-۳-۳) را به صورت زیر نشان داد:

$$U(a, b)^\dagger U(a, b) = \begin{pmatrix} a^* & -b \\ b^* & a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} = 1 \quad (9-3-3)$$

که در آن از (۸-۳-۳) استفاده کرده ایم. توجه کنید که تعداد آرایه های حقیقی مستقل در (۷-۳-۳) دوباره همان سه تا است.

به سرعت می توان دید که ماتریس 2×2 ی (۴۵-۲-۳) را که به عنوان یک چرخش برای سیستم اسپین $\frac{1}{2}$ تعیین شد؛ می توان به صورت $U(a, b)$ نوشت. با مقایسه ی (۴۵-۲-۳) و (۷-۳-۳)، به دست می آوریم:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}(a) &= \cos\left(\frac{\phi}{2}\right), & \operatorname{Im}(a) &= -n_z \sin\left(\frac{\phi}{2}\right), \\ \operatorname{Re}(b) &= -n_y \sin\left(\frac{\phi}{2}\right), & \operatorname{Im}(b) &= -n_x \sin\left(\frac{\phi}{2}\right), \end{aligned} \quad (10-3-3)$$

که از این روابط، خاصیت تک پیمانه ای بودن (۸-۳-۳) به دست می آید. برعکس، واضح است که بیشتر ماتریس های تک پیمانه ای به شکل (۷-۳-۳) را می توان به عنوان معرف یک چرخش برشمرد.

دو عدد مختلط a و b به اعداد کایلی-کلین مشهورند. از نظر تاریخی ارتباط بین یک ماتریس تک پیمانه ای یکانی و چرخش قبل از تولد مکانیک کوانتومی نیز شناخته شده بود. در واقع، اعداد کایلی-کلین برای مشخص کردن حرکات پیچیده ی ژيروسکوپ در سینماتیک جسم صلب مورد استفاده قرار گرفته بود.

بدون اعمال دخالت ماتریس های تک پیمانه ای یکانی در چرخش، می توانیم مستقیماً گروه خواص عمل های ضربی را با ماتریس های تک پیمانه ای یکانی بیازماییم. توجه کنید در حالت خاصی که:

$$U(a_1, b_1)U(a_2, b_2) = U(a_1 a_2 - b_1 b_2^*, a_1 b_2 + a_2^* b_1) \quad (11-3-3)$$

که شرط تک پیمانه ای بودن برای ماتریس حاصل به شکل زیر است:

$$|a_1 a_2 - b_1 b_2^*|^2 + |a_1 b_2 + a_2^* b_1|^2 = 1 \quad (12-3-3)$$

برعکس U برابر است با:

$$U^{-1}(a, b) = U(a^*, -b) \quad (13-3-3)$$

این گروه به $SU(2)$ مشهورند که در آن S نشانه ی خاص (Special)، U نشانه ی یکانی بودن (Unitary) و 2 برای بُعد دو است. در مقابل گروهی که برای عمل های ضرب با ماتریس های یکانی 2×2

عمومی (الزامی به تک پیمانه‌ای بودن آن‌ها نیست) تعریف می‌شوند، به $U(2)$ معروف‌اند. عام‌ترین شکل ماتریس‌های یکانی در فضای ۲ بُعدی، چهار آرایه‌ای مستقل دارند و می‌توان آن‌ها را به صورت $e^{i\gamma}$ (با γ حقیقی) ضربدر یک ماتریس تک پیمانه‌ای یکانی نوشت:

$$U = e^{i\gamma} \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}, \quad |a|^2 + |b|^2 = 1, \quad \gamma^* = \gamma \quad (۱۴-۳-۳)$$

$SU(2)$ زیرگروهی از $U(2)$ نامیده می‌شود.

از آن‌جا که می‌توان چرخش را هم با زبان $SO(3)$ و هم با زبان $SU(2)$ مشخص کرد، ممکن است نتیجه بگیریم که $SO(3)$ و $SU(2)$ همریخت هستند. یعنی بین عناصر $SO(3)$ و عناصر $SU(2)$ یک تناظر یک به یک وجود دارد اما این نتیجه‌گیری درست نیست. یک چرخش به اندازه 2π و چرخش دیگری به اندازه‌ی 4π را متصور شوید. به زبان $SO(3)$ ، ماتریس‌های متناظر با چرخش 2π و چرخش 4π هر دو ماتریس‌های 2×2 واحدی هستند. اما در زبان $SU(2)$ ماتریس‌های متناظر به ترتیب (-1) ضربدر ماتریس واحد 2×2 و خود ماتریس واحد 2×2 خواهند بود. به طور کلی‌تر، $U(a, b)$ و $U(-a, -b)$ هر دو با یک تک ماتریس در زبان $SO(3)$ متناظرند. یعنی یک تناظر دو به یک برقرار است؛ برای یک R معلوم، U متناظر دو مقدار است. با این حال می‌توان گفت که دو گروه به طور منطقه‌ای همریخت هستند.

چرخش‌های اویلر

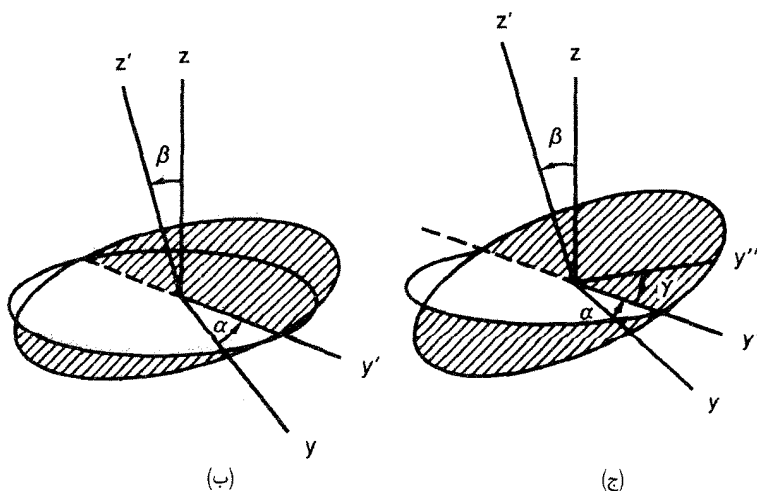
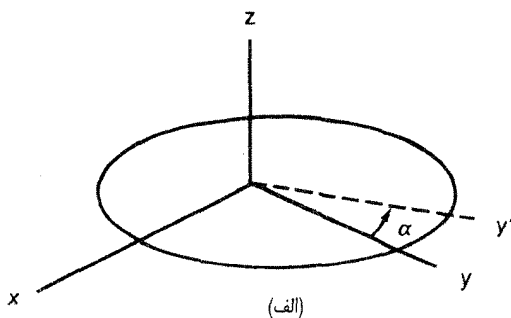
ممکن است خواننده از مکانیک کلاسیک با این واقعیت آشنا باشد که چرخش اختیاری یک جسم صلب در سه مرحله صورت می‌گیرد، که این سه مرحله به **چرخش‌های اویلر** معروف‌اند. زبان چرخش اویلری با سه زاویه‌ی اویلر معین می‌شود. هنوز راه دیگری برای عام‌ترین چرخش در سه بُعد باقی مانده است.

سه مرحله چرخش‌های اویلری به صورتی است که در ادامه می‌آید. نخست، چرخش جسم صلب در جهت پادساعتگرد پیرامون محور Z و به اندازه‌ی زاویه‌ی α . حال تصور کنید که یک محور Y متصل به جسم است، به طوری که قبل از چرخش حول محور Z این محور بر محور Y معمولی یا همان محور Y ثابت در فضا، منطبق است. پیدا است که پس از چرخش حول محور Z محور Y متصل به جسم دیگر در امتداد محور Y ثابت در فضا نیست. اجازه دهید این محور جدید را با Y' نشان دهیم. برای این که ببینید این مراحل چطور برای یک دیسک رُخ می‌دهد شکل ۳-۴ الف را ببینید. اکنون دومین چرخش را انجام می‌دهیم. این بار چرخش به اندازه‌ی زاویه‌ی β و حول محور Y' است. به عنوان یک نتیجه، محور Z متصل

به جسم دیگر در امتداد محور z ثابت در فضا باقی نخواهد ماند. به محور z متصل به جسم پس از چرخش، z' می‌گوییم. شکل ۳-۴ ب را ببینید. سومین و آخرین چرخش حول محور z' و به زاویه γ است. همان‌طور که در شکل ۴-۳ ج پیدا است، محور y متصل به جسم، به محور y' تبدیل می‌شود. می‌توان ضرب سه عملگر را بر حسب ماتریس‌های متعامد 3×3 به شکل زیر نوشت:

$$R(\alpha, \beta, \gamma) \equiv R_{z'}(\gamma) R_{y'}(\beta) R_z(\alpha) \tag{۱۵-۳-۳}$$

در این جا خاطر نشان ساختن یک امر لازم است. در بیشتر کتاب‌های مکانیک کلاسیک، دومین چرخش (چرخش میانی) به جای چرخش حول محور y متصل به جسم، حول محور x متصل به جسم ذکر شده است (برای مثال گلدشتاین ۱۹۸۰ را ببینید). این قرارداد در مکانیک کوانتومی به دلیلی که تا چند لحظه بعد آشکار خواهد شد، مجاز نیست.



شکل ۳-۴: چرخش‌های اوپلر

در رابطه‌ی (۳-۱۵)، R_y و R_z ظاهر می‌شوند که هر دو ماتریس‌های چرخش حول محورهای متصل به جسم‌اند. این رهیافت در چرخش‌های اویلر با مکانیک کوانتومی تقریباً ناجور است. چون پیش‌تر برای عملگر R_z بیان‌های ساده‌ای نسبت به مؤلفه‌های محور ثابت در فضا (بدون پریم) به‌دست آوردیم. اما نسبت به مؤلفه‌های محورهای متصل به جسم چنین چیزی حاصل نشده است. بنابراین در این جا بیان چرخش‌های محورهای متصل به جسمی که چرخیده است، برحسب چرخش‌های محورهای ثابت در فضا، مطلوب است. به‌علاوه یک رابطه‌ی بسیار ساده، به‌شکل زیر نیز وجود دارد:

$$R_{y'}(\beta) = R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z^{-1}(\alpha) \quad (۳-۱۶)$$

معنی سمت راست عبارت فوق در ادامه آمده است. نخست، محور متصل به جسم y در شکل ۳-۴ الف (یعنی همان محور y') را با یک چرخش در جهت عقربه‌های ساعت (چرخش ساعتگرد از دید ناظری است که از جهت مثبت محور z ها نگاه می‌کند) حول محور z و به‌اندازه‌ی زاویه‌ی α به محور ابتدایی ثابت در فضا بازمی‌گردانیم. سپس آن را حول محور y به‌اندازه‌ی زاویه‌ی β می‌چرخانیم. در آخر، با چرخاندن محور متصل به جسم y حول محور ثابت در فضای z (نه حول محور z') به‌اندازه‌ی زاویه‌ی α ، این محور را در جهت محور y' بازمی‌گردانیم. معادله‌ی (۳-۱۶) به ما می‌گوید که اثر کلی این شبکه‌ی چرخشی یک چرخش تنها حول محور y' به‌اندازه‌ی β است.

برای تأیید این حکم، بگذارید تا به اثر دو طرف رابطه‌ی (۳-۱۶) بر دیسک دایره‌ای شکل ۳-۴ الف، دقیق‌تر نگاه کنیم. واضح است که جهت محور متصل به جسم y در هر دو حالت بدون تغییر، یعنی در جهت y' باقی می‌ماند. به‌علاوه، جهت نهایی محور متصل به جسم z چه تحت تأثیر $R_{y'}(\beta)$ و چه تحت $R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z^{-1}(\alpha)$ قرار گیرد، یکسان خواهد بود. در هر دو حالت زاویه‌ی قطبی محور z متصل به جسم با محور z ثابت (که با حالت ابتدایی یکسان است) برابر با β خواهد بود و زاویه‌ی سمتی، که در سیستم مختصات ثابت اندازه گرفته می‌شود، تنها به‌اندازه‌ی α است. به‌عبارت دیگر، محور z متصل به جسم نهایی، نظیر محور z' در شکل ۳-۴ ب خواهد بود. به‌طور مشابه، می‌توان اثبات کرد که:

$$R_{z'}(\gamma) = R_{y'}(\beta) R_z(\gamma) R_{y'}^{-1}(\beta) \quad (۳-۱۷)$$

با استفاده از (۳-۱۶) و (۳-۱۷)، می‌توانیم (۳-۱۵) را دوباره بنویسیم. به‌دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} R_{z'}(\gamma) R_{y'}(\beta) R_z(\alpha) &= R_{y'}(\beta) R_z(\gamma) R_{y'}^{-1}(\beta) R_{y'}(\beta) R_z(\alpha) \\ &= R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z^{-1}(\alpha) R_z(\gamma) R_z(\alpha) \\ &= R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z(\gamma) \end{aligned} \quad (۳-۱۸)$$

که در آخرین قدم از این واقعیت استفاده کردیم که $R_z(\alpha)$ و $R_z(\gamma)$ با هم جابه‌جا می‌شوند. به‌طور خلاصه

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z(\gamma) \quad (19-3-3)$$

که در آن هر سه ماتریس در سمت راست دوران‌هایی هستند که نسبت به محورهای ثابت در فضا سنجیده می‌شوند.

اکنون بگذارید تا این مجموعه عمل‌ها را بر سیستم اسپین $\frac{1}{2}$ در مکانیک کوانتومی اعمال کنیم. متناظر با ضرب ماتریس‌های متعامد در (۱۹-۳-۳) ضرب عملگرهای چرخش در فضای کت سیستم اسپین $\frac{1}{2}$ تحت ملاحظات زیر وجود دارد:

$$\mathcal{D}(\alpha, \beta, \gamma) = \mathcal{D}_z(\alpha) \mathcal{D}_y(\beta) \mathcal{D}_z(\gamma) \quad (20-3-3)$$

نمایش ماتریس 2×2 ی این ضرب به‌صورت زیر است:

$$\begin{aligned} & \exp\left(\frac{-i\sigma_3\alpha}{2}\right) \exp\left(\frac{-i\sigma_2\beta}{2}\right) \exp\left(\frac{-i\sigma_3\gamma}{2}\right) \\ &= \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\beta/2) & -\sin(\beta/2) \\ \sin(\beta/2) & \cos(\beta/2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\gamma/2} & 0 \\ 0 & e^{i\gamma/2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} e^{-i(\alpha+\gamma)/2} \cos(\beta/2) & -e^{-i(\alpha-\gamma)/2} \sin(\beta/2) \\ e^{i(\alpha-\gamma)/2} \sin(\beta/2) & e^{i(\alpha+\gamma)/2} \cos(\beta/2) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (21-3-3)$$

که در نوشتن آن از (۳-۲-۴۴) استفاده کردیم. این ماتریس به‌طور واضح به‌شکل تک‌پیمانه‌ای یکانی است. عام‌ترین شکل ماتریس تک‌پیمانه‌ای یکانی 2×2 را می‌توان به‌شکل زاویه‌ی اوپلری نوشت.

توجه کنید که آرایه‌های ماتریسی چرخش دوم (چرخش میانی) $\exp(-i\sigma_y\phi/2)$ کاملاً حقیقی هستند. اگر همان‌طور که در اکثر کتاب‌های مکانیک کلاسیک آمده است جای چرخش حول محور x با چرخش حول محور y عوض می‌شد این امر میسر نمی‌گشت. در مکانیک کوانتومی، این قرارداد را برمی‌گزینیم چون ترجیح می‌دهیم که آرایه‌های ماتریسی دومین چرخش، که تنها ماتریس چرخشی با آرایه‌های غیرقطری است، کاملاً حقیقی باشند.*

* البته این بستگی به قرارداد ما دارد که در آن آرایه‌های ماتریس \mathcal{D}_y (با به‌طور کلی‌تر \mathcal{D}_j) موهومی محض در نظر گرفته می‌شوند.

به ماتریس 2×2 در (۳-۳-۲۱)، نمایش کاهش‌ناپذیر $j = \frac{1}{2}$ برای عملگر چرخش $\mathcal{D}(\alpha, \beta, \gamma)$ گفته می‌شود. آرایه‌های این ماتریس با $\mathcal{D}_{m'm}^{(1/2)}(\alpha, \beta, \gamma)$ مشخص می‌شوند. برحسب عملگرهای تکانه‌ی زاویه‌ای داریم:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{m'm}^{(1/2)}(\alpha, \beta, \gamma) = & \left\langle j = \frac{1}{2}, m' \left| \exp\left(\frac{-iJ_z\alpha}{\hbar}\right) \right. \right. \\ & \left. \left. \times \exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{-iJ_z\gamma}{\hbar}\right) \right| j = \frac{1}{2}, m \right\rangle \end{aligned} \quad (۳-۳-۲۲)$$

در بخش ۳-۵، نظیر (۳-۳-۲۱) را برای زهای بالاتر به‌طور مبسوط مورد مطالعه قرار می‌دهیم.

۴.۳ عملگرهای چگالی و آنسامبل‌های آمیخته در مقابل آنسامبل‌های خالص

پرتوهای قطبیده در مقابل پرتوهای غیرقطبیده

فرمول‌بندی مکانیک کوانتومی که تا این‌جا شرح و بسط دادیم، می‌تواند پیش‌بینی‌های آماری بر روی یک آنسامبل، یعنی یک مجموعه از سیستم‌های فیزیکی که به‌طور یکسان تهیه شده‌اند را انجام دهد. به‌طور دقیق‌تر، در چنین آنسامبلی هر کدام از اعضاء با کت حالت یکسان $|\alpha\rangle$ مشخص می‌گردند. یک مثال خوب از این مسأله پرتوی اتم نقره است که از دستگاه SG خارج می‌شود. اسپین هر کدام از اتم‌های نقره در این پرتو شبیه به اسپین سایر اتم‌هاست. یعنی در جهتی است که میدان مغناطیسی یکنواخت ابزار فیلترکننده مشخص می‌کند. ما هنوز بحث نکرده‌ایم که چگونه در توصیف کوانتومی یک آنسامبل از سیستم‌های فیزیکی، مثلاً 60% اعضاء با $|\alpha\rangle$ مشخص می‌گردند و 40% باقی‌مانده با کت دیگری مثل $|\beta\rangle$ تعیین می‌شوند.

برای روشن شدن غیرکامل بودن فرمول‌بندی‌ای که تا کنون گسترش داده‌ایم، بگذارید تا اتم‌های نقره‌ای که مستقیماً از یک کوره‌ی داغ خارج می‌شوند را در نظر بگیریم، قبل از این‌که تحت اثر یک دستگاه اشترن گزلاخ قرار بگیرند. بنابر زمینه‌های تقارنی، انتظار داریم که اتم خارج‌شونده جهت‌گیری تصادفی داشته باشد. به عبارت دیگر برای یک چنین آنسامبلی از اتم‌ها، جهت‌گیری برگزیده و ارجحی وجود ندارد. بنابر فرمول‌بندی که تا کنون گسترش داده‌ایم. کلی‌ترین کت حالت برای سیستم اسپین $\frac{1}{2}$ به صورت زیر است:

$$|\alpha\rangle = c_+|+\rangle + c_-|-\rangle \quad (۳-۴-۱)$$

آیا این معادله توانایی توصیف یک مجموعه از اتم‌ها با جهت گیری تصادفی اسپین را دارد؟ جواب، به طور واضح نه است. معادله‌ی (۳-۴-۱) کت حالتی را نشان می‌دهد که اسپین آن را در جهت تعیین شده‌ای قرار دارد. مثلاً در جهت \hat{n} که زوایای قطبی و سمتی آن به ترتیب β و α هستند. این جهت با حل رابطه‌ی زیر به دست می‌آید

$$\frac{c_+}{c_-} = \frac{\cos(\beta/2)}{e^{i\alpha}\sin(\beta/2)} \quad (۲-۴-۳)$$

رابطه‌ی (۳-۲-۵۲) را ببینید.

برای برآمدن از عهده‌ی این گونه وضعیتی، مفهوم جمعیت کسری یا وزن احتمال را معرفی می‌کنیم. یک آنسامبل از اتم‌های نقره با جهت اسپین کاملاً تصادفی را می‌توان به صورت مجموعه‌ای از اتم‌های نقره در نظر گرفت که ۵۰٪ آن‌ها عضو آنسامبلی هستند که با $|+\rangle$ تعیین می‌شوند و ۵۰٪ باقی مانده را $|-\rangle$ مشخص می‌کند. چنین آنسامبلی را با

$$w_+ = 0.5, \quad w_- = 0.5 \quad (۳-۴-۳)$$

مشخص می‌کنیم که در آن w_+ و w_- به ترتیب جمعیت کسری برای اسپین‌های رو به بالا و رو به پایین هستند. از آن‌جا که جهت برگزیده‌ای برای چنین پرتویی وجود ندارد، منطقی است که انتظار داشته باشیم آنسامبل ما تلفیقی ۵۰-۵۰٪ از $|S_x; -\rangle$ و $|S_x; +\rangle$ نیز می‌تواند باشد. فرمول‌بندی ریاضی مورد نیاز برای این مسأله به زودی روشن خواهد شد.

توجه به این نکته بسیار مهم است که ما در این‌جا به طور ساده دو عدد حقیقی w_+ و w_- را معرفی کردیم. در این‌جا هیچ اطلاعاتی از فاز نسبی بین کت اسپین بالا و کت اسپین پایین وجود ندارد. بیشتر اوقات چنین حالتی را یک حالت آمیخته‌ی ناهمدوس از اسپین‌های بالا و پایین می‌دانیم. واضح است که آنچه در این‌جا انجام می‌دهیم می‌بایست باید آنچه برای یک برهم‌نهی خطی همدوس صورت می‌پذیرد، متمایز باشد. برای مثال

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)|+\rangle + \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)|-\rangle \quad (۴-۴-۳)$$

که در آن رابطه‌ی فازی بین $|+\rangle$ و $|-\rangle$ شامل اطلاعات حیاتی از جهت اسپین در صفحه‌ی xy است. که در این مورد در جهت x مثبت است. در حالت کلی، نباید w_+ و w_- را با $|c_+|^2$ و $|c_-|^2$ اشتباه بگیریم. مفهوم احتمالاتی وابسته به w_+ و w_- به آنچه در نظریه‌ی احتمالات کلاسیکی با آن مواجه شده‌اید، بسیار نزدیک‌تر است. وضعیتی که در خروج مستقیم اتم‌های نقره از کوره‌ی داغ، با آن سر و کار داریم با این

مسأله که 50% دانشجویان کلاسی مرد هستند و 50% بقیه زن اند قابل مقایسه است. وقتی یک دانشجو را به طور تصادفی انتخاب می‌کنیم، احتمال آن که دانشجوی خاص مرد (یا زن) باشد 50% است. چه کسی شنیده است که یک دانشجو، یک برهم نهی خطی همدوس از مرد و زن با رابطه‌ی فازی معین است؟

پرتوی نقره‌ای که مستقیماً از یک کوره بیرون می‌آید مثالی از **آنسامبل کاملاً تصادفی** است. از آن جهت به آن **پرتو غیرقطبیده** می‌گویند که هیچ سمت ممتازی برای جهت اسپین وجود ندارد. در مقابل پرتویی که از یک دستگاه اشترن گراخ خارج می‌شود، مثالی از یک **آنسامبل خالص** است. به این **پرتو قطبیده** گفته می‌شود، چون تمام اعضای این آنسامبل، با کت مشترکی مشخص می‌شوند که این کت توصیف‌کننده‌ی حالتی با یک جهت اسپین معین است. برای درک اختلاف یک آنسامبل کاملاً تصادفی و یک آنسامبل خالص، دستگاه اشترن گراخ قابل چرخشی را در نظر می‌گیریم که در آن تنها با چرخاندن دستگاه، جهت میدان غیریکنواخت B تغییر می‌کند. وقتی که پرتوی غیرقطبیده که مستقیماً از کوره خارج شده با چنین دستگاهی برخورد کند، همواره دو پرتو با شدت مساوی ظاهر می‌شوند. در این حالت جهت قرارگیری دستگاه مطرح نیست. در عوض، اگر یک پرتوی قطبیده با چنین دستگاهی مواجه شود، هنگامی که دستگاه چرخانده می‌شود شدت نسبی دو پرتوی ظاهر شده تغییر می‌کند. در این حالت در برخی از جهت‌های خاص نسبت شدت در عمل برابر با صفر و یا یک می‌شود. در واقع فرمول‌بندی‌ای که در فصل ۱ گسترش دادیم به ما می‌گوید که شدت نسبی به‌سادگی برابر با $\cos^2(\beta/2)$ و $\sin^2(\beta/2)$ است که در آن β زاویه‌ی بین جهت اتم و جهت میدان مغناطیسی غیر یکنواخت در دستگاه SG است.

آنسامبل کاملاً تصادفی و آنسامبل خالص را می‌توان به‌عنوان کرانه‌های چیزی به نام **آنسامبل آمیخته** در نظر گرفت. در یک آنسامبل آمیخته یک کسر معین - مثلاً 70% - از اعضاء، با یک کت حالت $|\alpha\rangle$ مشخص می‌شوند و 30% بقیه با $|\beta\rangle$ تعیین می‌گردند. در مورد پرتو گفته می‌شود که پرتو تا اندازه‌ای **قطبیده** است. در این جا لازم نیست $|\alpha\rangle$ و $|\beta\rangle$ متعامد باشند. برای مثال، می‌توانیم 70% اعضاء را با اسپین در جهت مثبت x و 30% بقیه را با اسپین در جهت منفی z فرض کنیم.

متوسط‌های آنسامبلی و عملگر چگالی

اکنون به فرمول‌بندی عملگر چگالی که توسط جی. ون. نیومن در سال ۱۹۲۷ ارائه شد، می‌پردازیم که به طور کلی وضعیت‌های فیزیکی با آنسامبل‌های آمیخته را به‌خوبی آنسامبل‌های خاص توصیف می‌کند. بحث اصلی ما در این جا به سیستم‌های اسپین $\frac{1}{2}$ محدود نمی‌شود، اما برای روشن شدن اهدافمان به‌طور پی در پی به سیستم‌های اسپین $\frac{1}{2}$ باز خواهیم گشت.

بنا به تعریف، آنسامبل خاص، مجموعه‌ای از سیستم‌های فیزیکی متشابه است که هر کدام از اعضای آن با کت یکسان $|\alpha\rangle$ مشخص می‌شود. در عوض، در یک آنسامبل آمیخته، کسری از اعضاء با جمعیت نسبی w_1 با $|\alpha^{(1)}\rangle$ توصیف می‌گردند و کسر دیگر با جمعیت نسبی w_1 با $|\alpha^{(2)}\rangle$ معین می‌شود. به این ترتیب به بیان غیردقیق، یک آنسامبل آمیخته را همان‌طور که از نامش برمی‌آید، به‌عنوان مخلوطی از آنسامبل‌های خالص در نظر می‌گیریم. کسرهای جمعیتی مقیدند که در شرط بهنجارش صدق کنند.

$$\sum_i w_i = 1 \quad (5-4-3)$$

همان‌طور که پیش از این ذکر کردیم لازم نیست که $|\alpha^{(1)}\rangle$ و $|\alpha^{(2)}\rangle$ متعامد باشد. به‌علاوه لازم نیست که تعداد جملات؛ در جمع (۵-۴-۳) برابر با بعد N فضای کت باشد، بلکه می‌تواند بیش از N نیز باشد. برای مثال، برای سیستم‌های اسپین $\frac{1}{2}$ با $N=2$ ، می‌توان فرض کرد که ۴۰٪ اعضاء اسپینی جهت z مثبت داشته باشند، ۳۰٪ دارای اسپینی در جهت x مثبت باشند و اسپین ۳۰٪ بقیه نیز در جهت y منفی قرار گیرد. فرض کنید که اندازه‌گیری در یک آنسامبل روی مشاهده‌پذیر A صورت می‌پذیرد. می‌توان پرسید که مقدار متوسط اندازه‌گیری روی A ، هنگامی که تعداد زیادی اندازه‌گیری انجام شده است، چقدر است؟ جواب با متوسط آنسامبلی به‌دست می‌آید که به‌صورت زیر تعریف می‌گردد:

$$\begin{aligned} [A] &\equiv \sum_i w_i \langle \alpha^{(i)} | A | \alpha^{(i)} \rangle \\ &= \sum_i \sum_{a'} w_i | \langle a' | \alpha^{(i)} \rangle |^2 a' \end{aligned} \quad (6-4-3)$$

که در آن $|a'\rangle$ ویژه‌کت A است. یادآوری می‌کنیم که $\langle \alpha^{(i)} | A | \alpha^{(i)} \rangle$ مقدار انتظاری معمولی کوانتومی A برحسب حالت $|\alpha^{(i)}\rangle$ است. معادله‌ی (۶-۴-۳) به ما می‌گوید که این مقدار انتظاری می‌بایست متناظر با جمعیت‌های نسبی w_i بزرگ‌تر گردد. توجه کنید که چطور دو بار مفاهیم احتمالاتی وارد می‌شوند. نخست در $|\langle a' | \alpha^{(i)} \rangle|^2$ مفهوم احتمالاتی کوانتومی، برای این که $|\alpha^{(i)}\rangle$ در یکی از ویژه‌حالت‌های $|a'\rangle$ پیدا شود و دوم در عامل احتمالاتی w_i ، برای پیدا کردن آنسامبل در حالت کوانتومی خاصی که با $|\alpha^{(i)}\rangle$ توصیف می‌شود.*

* غالباً در متون، متوسط آنسامبلی، مقدار انتظاری خوانده می‌شود. اما در این کتاب، عبارت مقدار انتظاری برای مقدار متوسط اندازه‌گیری شده، هنگامی که اندازه‌گیری روی یک آنسامبل خالص صورت می‌پذیرد، نگاه داشته شده است.

با استفاده از پایه‌های کلی تر می‌توانیم عبارت (۳-۴-۶) را دوباره بنویسیم:

$$\begin{aligned} [A] &= \sum_i w_i \sum_{b'} \sum_{b''} \langle \alpha^{(i)} | b' \rangle \langle b' | A | b'' \rangle \langle b'' | \alpha^{(i)} \rangle \\ &= \sum_{b'} \sum_{b''} \left(\sum_i w_i \langle b'' | \alpha^{(i)} \rangle \langle \alpha^{(i)} | b' \rangle \right) \langle b' | A | b'' \rangle \end{aligned} \quad (۳-۴-۷)$$

تعداد جملات در جمع روی b' یا b'' برابر با بعد فضای کت است. در حالی که تعداد جملات در جمع؛ به چگونگی اختلاط آنسامبل‌های خالصی که آنسامبل آمیخته را می‌سازند، بستگی دارد. توجه کنید که در این شکل نوشتن خاصیت اصلی آنسامبل، که بستگی به مشاهده‌پذیر خالص A ندارد، بیرون آورده شده است.

این امر باعث می‌شود که **عملگر چگالی** ρ را به صورت زیر تعریف کنیم:

$$\rho \equiv \sum_i w_i |\alpha^{(i)}\rangle \langle \alpha^{(i)}| \quad (۳-۴-۸)$$

آرایه‌های متناظر با ماتریس چگالی از شکل زیر تبعیت می‌کنند:

$$\langle b'' | \rho | b' \rangle = \sum_i w_i \langle b'' | \alpha^{(i)} \rangle \langle \alpha^{(i)} | b' \rangle \quad (۳-۴-۹)$$

عملگر چگالی، حاوی همه‌ی اطلاعات مهمی است که می‌توانیم پیرامون آنسامبل مورد سؤال به دست آوریم. به رابطه‌ی (۳-۴-۷) باز می‌گردیم. می‌بینیم که متوسط آنسامبل را می‌توان به شکل زیر نوشت:

$$\begin{aligned} [A] &= \sum_{b'} \sum_{b''} \langle b'' | \rho | b' \rangle \langle b' | A | b'' \rangle \\ &= \text{tr}(\rho A) \end{aligned} \quad (۳-۴-۱۰)$$

از آنجا که رد ماتریس مستقل از نمایش است، می‌توان $\text{tr}(\rho A)$ را در هر پایه‌ی قراردادی محاسبه کرد. به این ترتیب (۳-۴-۱۰) رابطه‌ای قدرتمند است.

دو ویژگی از عملگر چگالی ارزش به‌خاطر سپردن دارد. اول اینکه عملگر چگالی هرمیتی است. این از رابطه‌ی (۳-۴-۸) نتیجه می‌شود. دوم اینکه عملگر چگالی در شرط بهنجارش صدق می‌کند:

$$\begin{aligned} \text{tr}(\rho) &= \sum_i \sum_{b'} w_i \langle b' | \alpha^{(i)} \rangle \langle \alpha^{(i)} | b' \rangle \\ &= \sum_i w_i \langle \alpha^{(i)} | \alpha^{(i)} \rangle \\ &= 1 \end{aligned} \quad (۳-۴-۱۱)$$

به خاطر شرط بهنجارش و هرمیتی بودن عملگر چگالی و متناظر با آن، ماتریس چگالی سیستم اسپین $\frac{1}{2}$ با بعد ۲، این ماتریس با سه عدد حقیقی مستقل مشخص می‌شود. چهار عدد حقیقی ماتریس 2×2 ی هرمیتی را می‌سازند. اما به خاطر شرط بهنجارش تنها به سه عدد مستقل نیاز داریم. این سه عدد عبارتند از: $[S_x]$ و $[S_y]$ و $[S_z]$. خواننده می‌تواند به دست آورد که این سه متوسط آنسامبلی، برای تشکیل عملگر چگالی کافی هستند. روش تشکیل یک آنسامبل آمیخته، نسبتاً پیچیده تر است. برای این کار می‌توانیم آنسامبل‌های خالص را، که با انواع $|\alpha^{(i)}\rangle$ ها مشخص می‌شوند، با w_i های مناسب با یکدیگر مخلوط کنیم. با این حال برای اسپین $\frac{1}{2}$ ، به طور کامل سه عدد حقیقی، آنسامبل مورد سؤال را مشخص می‌کنند. این مسأله به طور اکید بیان می‌کند که به راه‌های زیادی می‌توان، یک آنسامبل آمیخته را به آنسامبل‌های خالص تجزیه کرد. در پایان این فصل، یک مسأله به روشن ساختن این مطلب می‌پردازد.

یک آنسامبل خالص با $w_i = 1$ برای یک کت $|\alpha^{(i)}\rangle$ (مثلاً با $i = n$) و $w_i = 0$ برای سایر کت‌های حالت، مشخص می‌شود. بنابراین عملگر متناظر با چگالی به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$\rho = |\alpha^{(n)}\rangle\langle\alpha^{(n)}| \quad (۱۲-۴-۳)$$

که در آن هیچ جمعی وجود ندارد. واضح است که عملگر چگالی برای یک آنسامبل خالص، خودتوان است، یعنی:

$$\rho^2 = \rho \quad (۱۳-۴-۳)$$

یا به طور معادل:

$$\rho(\rho - 1) = 0 \quad (۱۴-۴-۳)$$

بنابراین برای یک آنسامبل خالص داریم:

$$\text{tr}(\rho^2) = 1 \quad (۱۵-۴-۳)$$

که این خاصیت علاوه بر خاصیت $(۱۱-۴-۳)$ است. ویژه مقادیر در یک آنسامبل خالص، برای عملگر چگالی، صفر یا یک هستند. با افزودن یک مجموعه‌ی کامل از کت‌های پایه، بین ρ و $(\rho - 1)$ در $(۱۴-۴-۳)$ به طوری که عملگر هرمیتی ρ را قطری کنند، می‌توان این موضوع را مشاهده کرد. ماتریس چگالی برای یک آنسامبل خالص، وقتی که قطری شود به شکل صفحه‌ی بعد است:

$$\rho \doteq \begin{pmatrix} 0 & & & & & & & & 0 \\ & 0 & & & & & & & \\ & & \ddots & & & & & & \\ & & & 0 & & & & & \\ & & & & 1 & & & & \\ & & & & & 0 & & & \\ & & & & & & 0 & & \\ & & & & & & & 0 & \\ & & & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & & & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{شکل قطری}) \quad (16-4-3)$$

می‌توان نشان داد که $\text{tr}(\rho^2)$ وقتی که آنسامبل خالص است، بیشینه می‌شود. برای یک آنسامبل آمیخته $\text{tr}(\rho^2)$ یک عدد مثبت کوچک‌تر از یک است.

فرض کنید یک عملگر چگالی داده شده است. بگذارید ببینیم چطور می‌توانیم ماتریس چگالی متناظر با آن را در یک پایه‌ی مشخص تشکیل دهیم. برای رسیدن به این مقصود یادآوری می‌کنیم که:

$$|\alpha\rangle\langle\alpha| = \sum_{b'} \sum_{b''} |b'\rangle\langle b'|\alpha\rangle\langle\alpha|b''\rangle\langle b''| \quad (17-4-3)$$

این نشان می‌دهد که می‌توانیم با ضرب خارجی $|\alpha^{(i)}\rangle\langle\alpha^{(i)}|$ ماتریسی مربعی تشکیل دهیم، که در آن ماتریس ستونی با $\langle b'|\alpha^{(i)}\rangle$ تشکیل می‌شود و ماتریس سطری با $\langle\alpha^{(i)}|b''\rangle$ شکل می‌گیرد. این ماتریس برابر با $\langle b''|\alpha^{(i)}\rangle^*$ است. مرحله‌ی آخر جمع این ماتریس‌های مربعی با عامل‌های وزن w_i آن‌ها، به صورت $(18-4-3)$ است. شکل نهایی در توافق با $(9-4-3)$ است. این همان چیزی است، که انتظار می‌رفت.

آموزنده است که چند مثال که همه مربوط به سیستم‌های اسپین $\frac{1}{2}$ هستند را مطالعه کنیم.

مثال ۱. یک پرتوی کاملاً قطبیده با S_z

$$\begin{aligned} \rho &= |+\rangle\langle+| \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1, 0) \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (18-4-3)$$

مثال ۲. یک پرتوی کاملاً قطبیده با $S_x \pm$

$$\begin{aligned} \rho &= |S_x; \pm\rangle\langle S_x; \pm| = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)(|+\rangle \pm |-\rangle) \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\langle\langle+| \pm \langle-| \\ &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \pm \frac{1}{2} \\ \pm \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (19-4-3)$$

آنسامبل‌ها در مثال‌های ۱ و ۲ هر دو خالص هستند.

مثال ۳. یک پرتو قطبیده. می توان این پرتو را به عنوان یک حالت غیرهمدوس مختلط از آنسامبل اسپین بالا و آنسامبل اسپین پایین با وزنهای برابر (50% برای هر کدام) در نظر گرفت.

$$\rho = \left(\frac{1}{2}\right)|+\rangle\langle +| + \left(\frac{1}{2}\right)|-\rangle\langle -|$$

$$\doteq \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (20-4-3)$$

که دقیقاً برابر با ماتریس واحد تقسیم بر ۲ است. همان طور که قبلاً ذکر کردیم نظیر این آنسامبل را می توان به عنوان یک حالت مخلوط از یک آنسامبل $S_x +$ و یک آنسامبل $S_x -$ با وزنهای برابر، در نظر گرفت. خوشبختانه فرمول بندی ما به طور خودکار آنچه را که انتظار داریم بر آورده می سازد:

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (21-4-3)$$

از مثال ۲ می بینیم که در جمله سمت راست عبارت بالا، ماتریسهای چگالی آنسامبلهای خالص $S_x +$ و $S_x -$ هستند. از آن جا که ρ در این جا، دقیقاً برابر با عملگر واحد تقسیم بر ۲ است (از نظر ابعادی) داریم:

$$\text{tr}(\rho S_x) = \text{tr}(\rho S_y) = \text{tr}(\rho S_z) = 0 \quad (22-4-3)$$

که در آن از این واقعیت استفاده کردیم که رد S_k برابر صفر است. بنابراین برای متوسط آنسامبلی S داریم:

$$[S] = 0 \quad (23-4-3)$$

این نکته منطقی است چون جهت از پیش تعیین شدهای برای اسپین وجود ندارد و سیستم اسپین $\frac{1}{2}$ یک آنسامبل کاملاً تصادفی است.

مثال ۴. به عنوان یک مثال از یک پرتو قطبیده ی پاره ای، بگذارید تا دو آنسامبل خالص را به صورت ۲۵-۷۵ در نظر بگیریم. یکی از دو آنسامبل $S_z +$ و دیگری $S_x +$ است:

$$w(S_z +) = 0.75, \quad w(S_x +) = 0.25 \quad (24-4-3)$$

چگالی متناظر را می توان به شکل زیر نوشت:

$$\rho \doteq \frac{3}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{7}{8} & \frac{1}{8} \\ \frac{1}{8} & \frac{1}{8} \end{pmatrix} \quad (25-4-3)$$

به این ترتیب داریم:

$$[S_x] = \frac{\hbar}{8}, \quad [S_y] = 0, \quad [S_z] = \frac{3\hbar}{8} \quad (۲۶-۴-۳)$$

به‌عنوان یک تمرین بر عهده‌ی خواننده می‌گذاریم که نشان دهد می‌توان این آنسامبل را به راه‌های دیگری غیر از (۲۴-۴-۳) تجزیه کرد.

تحول زمانی آنسامبل

عملگر چگالی ρ به‌صورت تابعی از زمان، چگونه تغییر می‌کند؟ بگذارید تا فرض کنیم که در زمان t_0 عملگر چگالی با رابطه‌ی زیر داده می‌شود:

$$\rho(t_0) = \sum_i w_i |\alpha^{(i)}\rangle \langle \alpha^{(i)}| \quad (۲۷-۴-۳)$$

اگر آنسامبل، بدون اخلاص باقی بماند، نمی‌توانیم کسر جمعیتی w_i را تغییر دهیم. بنابراین تغییر در ρ به‌آرامی و به‌واسطه‌ی تحول زمانی کت‌های حالت $|\alpha^{(i)}\rangle$ تضمین می‌گردد:

$$|\alpha^{(i)}\rangle \text{ at } t_0 \rightarrow |\alpha^{(i)}, t_0; t\rangle \quad (۲۸-۴-۳)$$

با استفاده از این واقعیت که $|\alpha^{(i)}, t_0; t\rangle$ در معادله‌ی شرودینگر صدق می‌کند، داریم:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \sum_i w_i (H |\alpha^{(i)}, t_0; t\rangle \langle \alpha^{(i)}, t_0; t| - |\alpha^{(i)}, t_0; t\rangle \langle \alpha^{(i)}, t_0; t| H) \\ &= -[\rho, H] \end{aligned} \quad (۲۹-۴-۳)$$

این رابطه، شبیه به معادله‌ی حرکت هایزنبرگ است. با این تفاوت که علامت، برعکس است. این نکته خلی به مسأله وارد نمی‌کند چون ρ یک مشاهده‌پذیر دینامیکی در تصویر هایزنبرگ نیست. برعکس ρ بر حسب کت‌ها و براهای تصویر شرودینگر ساخته شده است که این کت‌ها و براها بنا بر معادله‌ی شرودینگر تحول زمانی می‌یابند.

جالب است که رابطه‌ی (۲۹-۴-۳) را به‌عنوان شبیه کوانتومی قضیه‌ی لیوویل در مکانیک کلاسیک در نظر بگیریم.

$$\frac{\partial \rho_{\text{classical}}}{\partial t} = -[\rho_{\text{classical}}, H]_{\text{classical}} \quad (۳۰-۴-۳)$$

که در آن $\rho_{\text{classical}}$ بیان کننده‌ی چگالی نقاط نمایش دهنده در فضای فاز است. * بنابراین نام عملگر چگالی که برای ρ در (۳-۴-۲۹) نهاده شد، نام مناسبی است. مشابه کلاسیکی (۳-۴-۱۰) برای متوسط آنسامبلی مشاهده‌پذیر A با رابطه‌ی زیر داده می‌شود:

$$A_{\text{متوسط}} = \frac{\int \rho_{\text{کلاسیکی}} A(q, p) d\Gamma_{q,p}}{\int \rho_{\text{کلاسیکی}} d\Gamma_{q,p}} \quad (۳۱-۴-۳)$$

که در آن $d\Gamma_{q,p}$ بیان کننده‌ی امان حجم در فضای فاز است.

تعمیم به حالت پیوسته

تاکنون عملگرهای چگالی که مورد بررسی قرار داده‌ایم مربوط به حالت‌هایی بوده‌اند که کت‌های پایه‌ی آن‌ها با ویژه مقادیر گسسته‌ی یک مشاهده‌پذیر تعیین می‌شوند. می‌توان مفهوم ماتریس چگالی را به موردی تعمیم داد که در آن ویژه مقادیر طیف پیوسته دارند. در حالت خاص، بگذارید فضای کتی را در نظر بگیریم که با کت‌های مکان $|x'\rangle$ مشخص می‌شود. شبیه به (۳-۴-۱۰) داریم:

$$[A] = \int d^3x' \int d^3x'' \langle x'' | \rho | x' \rangle \langle x' | A | x'' \rangle \quad (۳۲-۴-۳)$$

ماتریس چگالی در این جا، عملاً تابعی از x' و x'' است. داریم:

$$\begin{aligned} \langle x'' | \rho | x' \rangle &= \langle x'' | \left(\sum_i w_i |\alpha^{(i)}\rangle \langle \alpha^{(i)}| \right) | x' \rangle \\ &= \sum_i w_i \psi_i(x'') \psi_i^*(x') \end{aligned} \quad (۳۳-۴-۳)$$

که در آن ψ_i تابع موج متناظر با کت حالت $|\alpha^{(i)}\rangle$ است. دقت کنید که آرایه‌های قطری (یعنی $x' = x''$) جمع وزنی چگالی احتمال هستند. بار دیگر ملاحظه می‌شود که عبارت ماتریس چگالی، عبارتی مناسب است.

در حالت پیوسته نیز مهم است که به‌خاطر داشته باشیم: آنسامبل‌های آمیخته‌ی یکسان را می‌توان به راه‌های مختلفی به آنسامبل‌های خالص تجزیه کرد. برای نمونه یک پرتو "واقعی" از ذرات را می‌توان هم به‌صورت مخلوطی از حالت‌های موج تخت (حالت‌های ذره‌ی آزاد هم انرژی) و هم به‌صورت مخلوطی از حالت‌های بسته موج در نظر گرفت.

* به‌خاطر داشته باشید که یک حالت کلاسیکی خالص با یک نقطه‌ی متحرک در فضای فاز $(q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f)$ در هر بازه‌ی زمانی ارائه می‌شود. یک حالت آماری کلاسیکی، با یک چگالی غیرمنفی به شکل $\rho_{\text{classical}}(q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f, t)$ نشان داده می‌شود بطوری که احتمال یافتن سیستم در بازه‌ی dq_1, \dots, dq_f در زمان t برابر با $\rho_{\text{classical}} dq_1, \dots, dp_f$ است.

مکانیک آماری کوانتومی

در این بخش به‌طور خلاصه به بحث راجع به ارتباط بین فرمول‌بندی عملگر چگالی و مکانیک آماری می‌پردازیم. بگذارید ابتدا برخی از خواص آنسامبل‌های خالص کاملاً تصادفی را ثبت کنیم. ماتریس چگالی یک آنسامبل کاملاً تصادفی شبیه به ماتریس زیر است:

$$\rho \doteq \frac{1}{N} \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & & 0 \\ & 1 & & & & & & & \\ & & 1 & & & & & & \\ & & & \ddots & & & & & \\ & & & & 1 & & & & \\ & & & & & 1 & & & \\ 0 & & & & & & & & 1 \end{pmatrix} \quad (۳۴-۴-۳)$$

که این طرز نوشتن، در هر نمایشی صادق است /مثال ۳ را با (۳-۴-۲۰) مقایسه کنید/. این نمایش از آن‌جا ناشی می‌شود که تمام حالت‌های متناظر با کت‌های پایه که با توجه به آن‌ها ماتریس چگالی نوشته می‌شود، دارای جمعیت یکسانی هستند. در عوض، در پایه‌ای که ρ قطری است، عبارت (۳-۴-۱۶) را برای نمایش ماتریسی عملگر چگالی یک آنسامبل خالص می‌نویسیم. دو ماتریس قطری (۳-۴-۳۴) و (۳-۴-۱۶)، الزام بهنجارش (۳-۴-۱۱) را برآورده می‌سازند و به این خاطر تفاوت چندانی ندارند. تعریف کمیتی که این اختلاف اندک را نمایان سازد برای ما امری ایده‌آل است.

بنابراین کمیتی تعریف می‌کنیم که به آن σ می‌گوییم:

$$\sigma = -\text{tr}(\rho \ln \rho) \quad (۳۵-۴-۳)$$

لگاریتم عملگر ρ شاید عجیب به نظر برسد، اما اگر از پایه‌ای استفاده کنیم که در آن ρ قطری است معنای (۳۵-۴-۳) کاملاً واضح خواهد شد:

$$\sigma = -\sum_k \rho_{kk}^{(\text{diag})} \ln \rho_{kk}^{(\text{diag})} \quad (۳۶-۴-۳)$$

از آن‌جا که هر کدام از آرایه‌های $\rho_{kk}^{(\text{diag})}$ یک عدد حقیقی بین ۰ و ۱ هستند، σ الزاماً در نیمه‌ی غیرمثبت قرار دارد. برای آنسامبل کاملاً تصادفی (۳-۴-۳۴) داریم:

$$\sigma = -\sum_{k=1}^N \frac{1}{N} \ln\left(\frac{1}{N}\right) = \ln N \quad (۳۷-۴-۳)$$

در مقابل برای یک آنسامبل خالص (۳-۴-۱۶) داریم:

$$\sigma = 0 \quad (۳۸-۴-۳)$$

که در آن از

$$\rho_{kk}^{(\text{diag})} = 0 \quad \text{or} \quad \ln \rho_{kk}^{(\text{diag})} = 0 \quad (39-4-3)$$

برای هر یک از جملات عبارت (۳۶-۴-۳) استفاده کرده‌ایم.

اکنون نشان می‌دهیم که از نظر فیزیکی σ می‌تواند به‌عنوان کمیتی که بی‌نظمی را اندازه می‌گیرد، شمرده شود. یک آنسامبل خالص، آنسامبلی است که فاکتور نظم در آن حداکثر است. چون تمام اعضای آن با یک کت حالت کوانتومی یکسان مشخص می‌گردند. می‌توان این حالت را به رژه‌ی سربازان در یک ارتش کاملاً منظم تشبیه کرد. با توجه به عبارت (۳۸-۴-۳)، σ برای چنین آنسامبلی صفر می‌شود. در طرف دیگر، در یک آنسامبل کاملاً تصادفی تمام حالت‌های کوانتومی شانسی یکسانی دارند. می‌توان این حالت را به سربازان شکست خورده‌ای مانند کرد که هر یک در مسیری تصادفی قدم بر می‌دارند. با توجه به (۳۷-۴-۳) در این حالت σ بزرگ است. بعداً نشان می‌دهیم که $\ln N$ ، مقدار احتمال حداکثر برای σ است. البته به شرطی که شرط بهنجارش زیر برقرار باشد:

$$\sum_k \rho_{kk} = 1 \quad (40-4-3)$$

در ترمودینامیک آموخته‌ایم، کمیتی به نام آنروپی وجود دارد که بی‌نظمی را اندازه می‌گیرد. به این جهت σ ما با آنروپی هر کدام از اعضای تشکیل دهنده آنسامبل که با S نمایش داده می‌شود در ارتباط است:

$$S = k\sigma \quad (41-4-3)$$

که در آن k ثابتی جهانی است که به ثابت بولتزمن معروف است. در واقع (۴۱-۴-۳) را می‌توان به‌عنوان تعریف آنروپی در مکانیک کوانتومی به حساب آورد.

اکنون نشان می‌دهیم که چطور می‌توان عملگر چگالی ρ را برای یک آنسامبل در تعادل گرمایی به دست آورد. فرض اصلی ما آن است که طبیعت در جهت افزایش σ پیش می‌رود با این قید که متوسط آنسامبلی هامیلتونی مقدار از پیش معلوم شده‌ی مشخصی باشد. برای توجیه این فرض باید به این بحث پردازیم که چطور از تعامل سیستم با محیط، تعادل حاصل می‌شود که البته از حوصله‌ی بحث این کتاب خارج است. به هر حال هنگامی که تعادل گرمایی حاصل می‌شود انتظار داریم که:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (42-4-3)$$

باشد. که این رابطه ناشی از (۳-۴-۲۹) است. این عبارت به معنی آن است که می‌توان ρ و H را به‌طور همزمان قطری کرد. بنابراین کت‌های استفاده شده در نوشتن (۳-۴-۳۶) را می‌توان به‌عنوان ویژه‌کت‌های انرژی در نظر گرفت. با این انتخاب، ρ_{kk} بیان‌گر کسر جمعیتی یک ویژه حالت انرژی با ویژه مقدار انرژی E_k است.

اکنون بگذارید σ را با الزام

$$\delta\sigma = 0 \quad (۳-۴-۴۳)$$

بیشینه کنیم. اما باید به این قید نیز توجه داشته باشیم که متوسط آنسامبلی H یک مقدار از پیش تعیین شده است. به زمان مکانیک آماری $[H]$ برابر با انرژی داخلی هر کدام از اجزا تشکیل دهنده است که با U نشان داده می‌شود:

$$[H] = \text{tr}(\rho H) = U \quad (۳-۴-۴۴)$$

به‌علاوه نباید شرط بهنجارش (۳-۴-۴۰) را نیز فراموش کنیم. بنابراین کار اصلی ما این است که الزام (۳-۴-۴۳) را به قید

$$\delta[H] = \sum_k \delta\rho_{kk} E_k = 0 \quad (\text{الف } ۳-۴-۴۵)$$

و

$$\delta(\text{tr}\rho) = \sum_k \delta\rho_{kk} = 0 \quad (\text{ب } ۳-۴-۴۵)$$

اعمال کنیم. می‌توان به‌سرعت و با استفاده از ضرایب لاگرانژ این کار را انجام داد، به‌دست می‌آوریم:

$$\sum_k \delta\rho_{kk} [(\ln \rho_{kk} + 1) + \beta E_k + \gamma] = 0 \quad (۳-۴-۴۶)$$

که برای یک روش دلخواه تنها در صورتی ممکن است که

$$\rho_{kk} = \exp(-\beta E_k - \gamma - 1) \quad (۳-۴-۴۷)$$

برقرار باشد. ثابت γ را می‌توان با استفاده از شرط بهنجارش (۳-۴-۴۰) حذف کرد و نتیجه‌ی نهایی ما برابر خواهد بود با:

$$\rho_{kk} = \frac{\exp(-\beta E_k)}{\sum_l \exp(-\beta E_l)} \quad (۳-۴-۴۸)$$

که مستقیماً جمعیت نسبی یک ویژه حالت انرژی با ویژه مقدار E_k را به دست می دهد. این طور دانسته می شود که مقصود از جمع، جمع روی تمام ویژه حالت های مجزای انرژی است. اگر تهنگنی وجود داشته باشد، می باید روی تمام حالت ها با ویژه مقدار انرژی یکسان جمع ببندیم.

آرایه های ماتریس چگالی (۳-۴-۴۸) با آنچه که در مکانیک آماری آنسامبل کانونیک گفته می شود، متناسب اند. با پیشینه کردن σ ، بدون قید انرژی داخلی (۳-۴-۴۵ الف) رابطه ی زیر به دست می آید:

$$\rho_{kk} = \frac{1}{N}, \quad (k \text{ مستقل از } k) \quad (۳-۴-۴۹)$$

که این عبارت بیانگر ماتریس چگالی مناسب برای یک آنسامبل کاملاً تصادفی است. با مقایسه ی (۳-۴-۴۸) و (۳-۴-۴۹) نتیجه می گیریم که یک آنسامبل کاملاً تصادفی را می توان به عنوان حد $\beta \rightarrow 0$ (از لحاظ فیزیکی در حد دماهای بسیار بالا) یک آنسامبل کانونیک در نظر گرفت.

در مکانیک آماری مخرج (۳-۴-۴۸) را به عنوان تابع پارش

$$Z = \sum_k^N \exp(-\beta E_k) \quad (۳-۴-۵۰)$$

می شناسیم. می توان این عبارت را به صورت زیر هم نوشت:

$$Z = \text{tr}(e^{-\beta H}) \quad (۳-۴-۵۱)$$

با دانستن ρ_{kk} در پایه ی انرژی، می توانیم عملگر چگالی را به صورت زیر بنویسیم:

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Z} \quad (۳-۴-۵۲)$$

این بنیادی ترین معادله ی ماست که از آن به سایر معادله ها نیز خواهیم رسید. می توانیم بلافاصله متوسط آنسامبلی مشاهده پذیر دلخواه A را به دست آوریم:

$$\begin{aligned} [A] &= \frac{\text{tr}(e^{-\beta H} A)}{Z} \\ &= \frac{\left[\sum_k^N \langle A \rangle_k \exp(-\beta E_k) \right]}{\sum_k^N \exp(-\beta E_k)} \end{aligned} \quad (۳-۴-۵۳)$$

در حالت خاص، برای انرژی داخلی هر عضو داریم:

$$U = \frac{\left[\sum_k^N E_k \exp(-\beta E_k) \right]}{\sum_k^N \exp(-\beta E_k)}$$

$$= -\frac{\partial}{\partial \beta} (\ln Z) \quad (۵۴-۴-۳)$$

این رابطه‌ای است که برای هر دانشجوی درس مکانیک آماری، آشنا است. رابطه‌ی زیر برقرار است:

$$\beta = \frac{1}{kT} \quad (۵۵-۴-۳)$$

که در آن k ثابت بولتزمن است. برای متقاعد کردن خودمان به درستی این تساوی، آموزنده است که متوسط آنسامبلی $[H]$ یک نوسان گر هماهنگ ساده را با kT که انرژی داخلی نوسان گر در حد کلاسیکی است، مقایسه کنیم. این مقایسه را به عنوان یک تمرین رها می‌کنیم. پیش‌تر متذکر شدیم که در حد دماهای بسیار بالا یک آنسامبل کانونیک به یک آنسامبل کاملاً تصادفی که در آن جمعیت ویژه حالت‌های انرژی یکسان است، تبدیل می‌شود. در مقابل در حد دماهای بسیار پایین ($\beta \rightarrow \infty$) عبارت (۴۸-۴-۳) به ما می‌گوید که آنسامبل کانونیک به یک آنسامبل خالص با جمعیتی که در حالت پایه قرار دارد، تبدیل می‌گردد.

به عنوان یک مثال ساده‌ی روشن کننده، یک آنسامبل کانونیک را که با سیستم‌های اسپین $\frac{1}{2}$ ساخته شده است، در نظر بگیرید. هر کدام از این سیستم‌ها تکانه‌ی مغناطیسی $e\hbar/2m_e c$ دارند که با یک میدان مغناطیسی یکنواخت در راستای z بر هم کنش می‌کنند. هامیلتونی متناسب با این مسأله قبلاً ارائه شده است [رابطه‌ی (۱۶-۲-۳)] را ببینید. از آن جا که H و S_z جابه‌جا می‌شوند، ماتریس چگالی برای این آنسامبل کانونیک در پایه‌ی S_z قطری است. بنابراین:

$$\rho = \frac{\begin{pmatrix} e^{-\beta\hbar\omega/2} & 0 \\ 0 & e^{\beta\hbar\omega/2} \end{pmatrix}}{Z} \quad (۵۶-۴-۳)$$

که در آن تابع پارش به صورت زیر است:

$$Z = e^{-\beta\hbar\omega/2} + e^{\beta\hbar\omega/2} \quad (۵۷-۴-۳)$$

با استفاده از این رابطه محاسبه می‌کنیم:

$$[S_x] = [S_y] = 0, \quad [S_z] = -\left(\frac{\hbar}{2}\right) \tanh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \quad (58-4-3)$$

متوسط آنسامبلی مؤلفه‌ی تکانه‌ی مغناطیسی برابر با $e/m_e c$ ضربدر $[S_z]$ است. پذیرفتاری پارامغناطیسی χ را می‌توان به شکل زیر محاسبه کرد:

$$\left(\frac{e}{m_e c}\right) [S_z] = \chi B \quad (59-4-3)$$

به این ترتیب به فرمول بریلوئن برای χ خواهیم رسید:

$$\chi = \left(\frac{|e|\hbar}{2m_e c B}\right) \tanh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \quad (60-4-3)$$

۵.۳ ویژه‌مقادیر و ویژه‌حالت‌های تکانه‌ی زاویه‌ای

تا این جا بحث ما به سیستم‌های اسپین $\frac{1}{2}$ با بعد $N=2$ محدود می‌شد. در این بخش و بخش‌های بعدی، حالت‌های کلی‌تر تکانه‌ی زاویه‌ای را مورد مطالعه قرار می‌دهیم. برای رسیدن به این هدف ابتدا ویژه‌مقادیر و ویژه‌حالت‌های \mathbf{J}^2 و J_z را استخراج می‌کنیم و عبارت‌هایی را برای آرایه‌های ماتریسی عملگرهای تکانه‌ی زاویه‌ای به دست می‌آوریم. این عبارت‌ها نخستین بار در سال ۱۹۲۶ در مقاله‌ای از ام. بورن، دبلیو. هایزنبرگ و پی. جُردن عنوان شد.

روابط جابه‌جایی و عملگرهای نردبانی

هرکاری که در این جا بخواهیم انجام دهیم از روابط جابه‌جایی تکانه‌ی زاویه‌ای (۳-۱-۲۰) تبعیت می‌کند، که در آن \mathbf{J} ، به عنوان تولید کننده چرخش بی‌نهایت کوچک شمرده می‌شود. نخستین خاصیت مهمی که از روابط اصلی جا به جایی نتیجه می‌شود، وجود عملگر جدید \mathbf{J}^2 است که به صورت زیر تعریف می‌گردد:

$$\mathbf{J}^2 \equiv J_x J_x + J_y J_y + J_z J_z \quad (1-5-3)$$

که با هر کدام از \mathbf{J}_k ها جابه‌جا می‌شود:

$$[\mathbf{J}^2, J_k] = 0, \quad (k=1,2,3) \quad (2-5-3)$$

برای اثبات این رابطه مورد $k=3$ را در نظر می‌گیریم:

$$\begin{aligned} [J_x J_x + J_y J_y + J_z J_z, J_z] &= J_x [J_x, J_z] + [J_x, J_z] J_x + J_y [J_y, J_z] + [J_y, J_z] J_y \\ &= J_x (-i\hbar J_y) + (-i\hbar J_y) J_x + J_y (i\hbar J_x) + (i\hbar J_x) J_y \\ &= 0 \end{aligned}$$

(۳-۵-۳)

اثبات برای موارد $k=1$ و $k=2$ از جایگشت دوره‌ای $(1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 1)$ اندیس‌ها به دست آید. از آنجا که J_x و J_y و J_z با یکدیگر جابه‌جا نمی‌شوند، تنها می‌توان یکی از آن‌ها را به‌عنوان مشاهده‌پذیری که همزمان با J^2 قطری می‌شود، برگزید. بنا بر قرارداد J_z را برای این کار انتخاب می‌کنیم.

اکنون توجه خود را به‌ویژه کت‌های همزمان J^2 و J_z معطوف می‌کنیم. ویژه‌مقادیر J^2 و J_z را به ترتیب با a و b نمایش می‌دهیم:

$$J^2 |a, b\rangle = a |a, b\rangle \quad (۳-۵-۴ \text{ الف})$$

$$J_z |a, b\rangle = b |a, b\rangle \quad (۳-۵-۴ \text{ ب})$$

برای مشخص کردن مقادیر مجاز a و b به جای J_x و J_y راحت‌تر است که با عملگرهای غیرهرمیتی زیر کار کنیم:

$$J_{\pm} \equiv J_x \pm iJ_y \quad (۳-۵-۵)$$

به این عملگرها، عملگرهای نردبانی گفته می‌شود. این عملگرها در روابط جابه‌جایی زیر صدق می‌کنند:

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z \quad (۳-۵-۶ \text{ الف})$$

و

$$J^2 \equiv J_x J_x + J_y J_y + J_z J_z \quad (۳-۵-۶ \text{ ب})$$

این روابط به راحتی از $(۳-۱-۲)$ به دست می‌آیند. همچنین از $(۳-۵-۲)$ آشکارا نتیجه می‌گیریم که:

$$[J^2, J_{\pm}] = 0 \quad (۳-۵-۷)$$

معنای فیزیکی J_{\pm} چیست؟ برای رسیدن به پاسخ این پرسش، چگونگی اثر J_z بر $|a, b\rangle_{J_{\pm}}$ را می‌آزماییم:

$$\begin{aligned} J_z (J_{\pm} |a, b\rangle) &= ([J_z, J_{\pm}] + J_{\pm} J_z) |a, b\rangle \\ &= (b \pm \hbar) (J_{\pm} |a, b\rangle) \end{aligned} \quad (۳-۵-۸)$$

که در آن از (۳-۵-۶) استفاده کرده‌ایم. به عبارت دیگر اگر J_+ یا (J_-) را بر یک ویژه‌کت J_z اثر دهیم، ویژه‌کت حاصل، هنوز هم یکی از ویژه‌کتهای J_z است و انتظار داریم که ویژه‌مقدار آن به اندازه‌ی واحد \hbar افزایش (یا کاهش) پیدا کرده باشد. اکنون پیدااست که چرا به J_{\pm} که پله‌به‌پله ویژه‌مقادیر J_z را از "نردبانی" بالا (پایین) می‌برد، عملگر نردبانی گفته می‌شود.

اکنون کمی از بحث خارج می‌شویم و بیان می‌کنیم که روابط جابه‌جایی (۳-۵-۶) شبیه برخی از روابط جابه‌جایی است که در فصل‌های پیش‌تر با آن‌ها روبه‌رو شدیم. در بحث عملگر انتقال $\mathcal{F}(l)$ داشتیم:

$$[x, \mathcal{F}(l)] = l, \mathcal{F}(l) \quad (۳-۵-۹)$$

همچنین در بحث نوسان‌گر هماهنگ ساده داشتیم:

$$[N, a^\dagger] = a^\dagger, \quad [N, a] = -a \quad (۳-۵-۱۰)$$

می‌بینیم که دو رابطه‌ی (۳-۵-۹) و (۳-۵-۱۰) ساختاری شبیه به (۳-۵-۶) دارند. تعبیر فیزیکی عملگر انتقال که ویژه‌مقدار عملگر مکان x را به اندازه‌ی l تغییر می‌دهد شبیه به عملگر نردبانی J_+ است که ویژه‌مقدار J_z را به اندازه‌ی واحد \hbar تغییر می‌دهد. به همین صورت عملگر a^\dagger در نوسان‌گر، ویژه‌مقدار عملگر تعداد N را به اندازه‌ی واحد افزایش می‌دهد.

با وجود اینکه J_{\pm} ویژه‌مقدار J_z را به اندازه‌ی واحد \hbar تغییر می‌دهند این عملگرها نمی‌توانند ویژه‌مقدار J^2 را تغییر دهند:

$$\begin{aligned} J^2(J_{\pm}|a, b\rangle) &= J_{\pm}J^2|a, b\rangle \\ &= a(J_{\pm}|a, b\rangle) \end{aligned} \quad (۳-۵-۱۱)$$

برای نوشتن این رابطه از (۳-۵-۷) استفاده کردیم. به طور خلاصه، $J_{\pm}|a, b\rangle$ ویژه‌کتهای همزمان J^2 و J_z با ویژه‌مقادیر a و $b \pm \hbar$ هستند. می‌توان نوشت:

$$J_{\pm}|a, b\rangle = c_{\pm}|a, b \pm \hbar\rangle \quad (۳-۵-۱۲)$$

که در آن ثابت تناسب c_{\pm} را بعداً از شرط بهنجارش ویژه‌کتهای تکانه‌ی زاویه‌ای به دست می‌آوریم.

ویژه‌مقادیر J^2 و J_z

اکنون ابزار لازم برای تولید ویژه‌کتهای تکانه‌ی زاویه‌ای و مطالعه‌ی طیف ویژه‌مقداری آن را در اختیار داریم. فرض کنید J_+ را به طور متوالی و برای n بار؛ بر ویژه‌کت همزمان J^2 و J_z اثر می‌دهیم. سپس

ویژه‌کت دیگر \mathbf{J}^2 و J_z با ویژه مقدار \mathbf{J}_z که به اندازه‌ی $n\hbar$ افزایش یافته است را به دست می‌آوریم. این در حالی است که ویژه مقدار \mathbf{J}^2 همچنان بدون تغییر می‌ماند. اما نمی‌توان این مراحل را بی‌نهایت بار تکرار کرد. یک حد بالا برای b (ویژه مقدار J_z) با یک a مشخص (ویژه مقدار \mathbf{J}^2) وجود خواهد داشت.

$$a \geq b^2 \quad (13-5-3)$$

برای اثبات این فرض ابتدا توجه می‌کنیم که:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2 - J_z^2 &= \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+) \\ &= \frac{1}{2}(J_+ J_+^\dagger + J_+^\dagger J_+) \end{aligned} \quad (14-5-3)$$

اکنون $J_+ J_+^\dagger$ و $J_+^\dagger J_+$ باید ویژه مقادیر غیرمنفی داشته باشند چون:

$$J_+^\dagger |a, b\rangle \stackrel{\text{DC}}{\leftrightarrow} \langle a, b | J_+, \quad J_+ |a, b\rangle \stackrel{\text{DC}}{\leftrightarrow} \langle a, b | J_+^\dagger \quad (15-5-3)$$

بنابراین

$$\langle a, b | (\mathbf{J}^2 - J_z^2) |a, b\rangle \geq 0 \quad (16-5-3)$$

که از آن، (13-5-3) نتیجه می‌شود. بنابراین می‌باید یک b_{\max} وجود داشته باشد، به طوری که:

$$J_+ |a, b_{\max}\rangle = 0 \quad (17-5-3)$$

به بیان دیگر، ویژه مقدار b نمی‌تواند بیشتر از b_{\max} باشد. همچنین می‌توان از (17-5-3) نتیجه گرفت:

$$J_- J_+ |a, b_{\max}\rangle = 0 \quad (18-5-3)$$

اما

$$\begin{aligned} J_- J_+ &= J_x^2 + J_y^2 - i(J_y J_x - J_x J_y) \\ &= \mathbf{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z \end{aligned} \quad (19-5-3)$$

بنابراین

$$(\mathbf{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z) |a, b_{\max}\rangle = 0 \quad (20-5-3)$$

از آن جا که $|a, b_{\max}\rangle$ یک کت صفر نیست، این رابطه تنها وقتی صادق است که:

$$a - b_{\max}^2 - b_{\max} \hbar = 0 \quad (21-5-3)$$

یا

$$a = b_{\max}(b_{\max} + \hbar) \quad (۲۲-۵-۳)$$

از روشی مشابه می‌توان از (۳-۵-۱۳) نتیجه گرفت که باید یک b_{\min} نیز وجود داشته باشد. به طوری که:

$$J_- |a, b_{\min}\rangle = 0 \quad (۲۳-۵-۳)$$

با نوشتن $J_+ J_-$ به شکلی شبیه (۳-۵-۱۹)

$$J_+ J_- = \mathbf{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z \quad (۲۴-۵-۳)$$

نتیجه می‌گیریم که:

$$a = b_{\min}(b_{\min} - \hbar) \quad (۲۵-۵-۳)$$

با مقایسه‌ی (۲۲-۵-۳) با (۲۵-۵-۳) درمی‌یابیم که:

$$b_{\max} = -b_{\min} \quad (۲۶-۵-۳)$$

که b_{\max} مثبت است و مقادیر مجاز b در بازه‌ی زیر قرار دارند:

$$-b_{\max} \leq b \leq b_{\max} \quad (۲۷-۵-۳)$$

واضح است که، باید بتوانیم $|a, b_{\max}\rangle$ را از اعمال متوالی J_+ به $|a, b_{\min}\rangle$ با یک تعداد تکرار محدود به دست آوریم. بنابراین باید داشته باشیم:

$$b_{\max} = b_{\min} + n\hbar \quad (۲۸-۵-۳)$$

که n یک عدد صحیح است. به عنوان یک نتیجه به دست می‌آوریم:

$$b_{\max} = \frac{n\hbar}{2} \quad (۲۹-۵-۳)$$

ساده‌تر است که به جای b_{\max} از J که به صورت b_{\max}/\hbar تعریف می‌شود، استفاده کنیم:

$$j = \frac{n}{2} \quad (۳۰-۵-۳)$$

بیشینه‌ی ویژه مقدار J_z برابر با $\hbar j$ است. که در آن ز عددی صحیح یا نیم صحیح است. معادله‌ی (۲۲-۵-۳) نتیجه می‌دهد که ویژه مقدار J^2 برابر است با:

$$a = \hbar^2 j(j+1) \quad (۳۱-۵-۳)$$

همچنین m را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$b \equiv m\hbar \quad (۳۲-۵-۳)$$

اگر z عددی صحیح باشد، تمام مقادیر m صحیح‌اند. اما اگر z عددی نیم‌صحیح باشد، تمام مقادیر m نیم‌صحیح خواهند بود. مقادیر مجاز m برای یک J مشخص عبارتند از:

$$m = \underbrace{-j, -j+1, \dots, j-1, j}_{\text{حالت } 2j+1} \quad (۳۳-۵-۳)$$

به جای $|a, b\rangle$ که همان ویژه‌کت همزمان J^2 و J_z معرفی شد، نماد مرسوم‌تر $|j, m\rangle$ را استفاده می‌کنیم. اکنون معادلات ویژه مقاداری بنیادین زیر را می‌نویسیم:

$$J^2|j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2|j, m\rangle \quad (۳۴-۵-۳ \text{ الف})$$

و

$$J_z|j, m\rangle = m\hbar|j, m\rangle \quad (۳۴-۵-۳ \text{ ب})$$

که در آن z یک عدد صحیح یا نیم‌صحیح است و m با استفاده از (۳۳-۵-۳) به دست می‌آید. دقت به این نکته بسیار مهم است که ما برای دستیابی به این نتایج فقط از روابط جابه‌جایی استفاده کردیم. کوانتش تکانه‌ی زاویه‌ای که در (۳۴-۵-۳) ذکر شد نتیجه‌ی مستقیمی از روابط جابه‌جایی تکانه‌ی زاویه‌ای است که خود حاصلی از خواص چرخش به اضافه‌ی تعریف J_k به عنوان تولیدکننده‌ی چرخش است.

آرایه‌های ماتریسی عملگرهای تکانه‌ی زاویه‌ای

حال آرایه‌های ماتریسی عملگرهای تکانه‌ی زاویه‌ای مختلف را به دست می‌آوریم. فرض کنید $|j, m\rangle$ بهنجار باشد، آشکارا از (۳۴-۵-۳) داریم:

$$\langle j', m'|J^2|j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2\delta_{j',j}\delta_{m',m} \quad (۳۵-۵-۳ \text{ الف})$$

و

$$\langle j', m'|J_z|j, m\rangle = m\hbar\delta_{j',j}\delta_{m',m} \quad (۳۵-۵-۳ \text{ ب})$$

برای به دست آوردن آرایه‌های ماتریسی J_{\pm} ابتدا فرض می‌کنیم که:

$$\begin{aligned} \langle j, m|J_{\pm}^{\dagger}J_{\pm}|j, m\rangle &= \langle j, m|(J^2 - J_z^2 - \hbar J_z)|j, m\rangle \\ &= \hbar^2[j(j+1) - m^2 - m] \end{aligned} \quad (۳۶-۵-۳)$$

اکنون، صرف نظر از یک ثابت، $J_+ |j, m\rangle$ باید، نظیر $|j, m+1\rangle$ (بهنجار شده) باشد [۳-۵-۱۲] را ببینید]. بنابراین:

$$J_+ |j, m\rangle = c_{jm}^+ |j, m+1\rangle \quad (۳۷-۵-۳)$$

با ترکیب این رابطه و رابطه‌ی (۳-۵-۳۶) نتیجه می‌گیریم که:

$$\begin{aligned} |c_{jm}^+|^2 &= \hbar^2 [j(j+1) - m(m+1)] \\ &= \hbar^2 (j-m)(j+m+1) \end{aligned} \quad (۳۸-۵-۳)$$

بنابراین می‌توانیم c_{jm}^+ را تا حد یک عامل فاز مشخص کنیم. بنا به قرارداد c_{jm}^+ را حقیقی و مثبت در نظر می‌گیریم. بنابراین:

$$J_+ |j, m\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \hbar |j, m+1\rangle \quad (۳۹-۵-۳)$$

همچنین می‌توان به‌دست آورد که:

$$J_- |j, m\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \hbar |j, m-1\rangle \quad (۴۰-۵-۳)$$

در نهایت آرایه‌های ماتریسی J_{\pm} را می‌توان به طریقه‌ی زیر مشخص کرد:

$$\langle j', m' | J_{\pm} |j, m\rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \hbar \delta_{j', j} \delta_{m', m \pm 1} \quad (۴۱-۵-۳)$$

نمایش‌های عملگر چرخش

اکنون با داشتن آرایه‌های ماتریسی J_z و J_{\pm} ، در موقعیتی هستیم که می‌توانیم به مطالعه‌ی آرایه‌های عملگر چرخش $\mathcal{D}(R)$ پردازیم. اگر چرخش R را با \hat{n} و $\hat{\phi}$ مشخص کنیم، می‌توانیم آرایه‌های ماتریس را به‌شکل زیر مشخص کنیم:

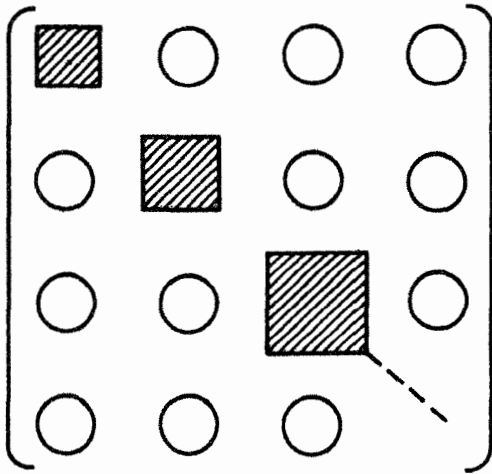
$$\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R) = \langle j, m' | \exp\left(\frac{-i\mathbf{J} \cdot \hat{n}\phi}{\hbar}\right) |j, m\rangle \quad (۴۲-۵-۳)$$

بعد از آنکه ای.پی.ویگنر، نقش پیش‌گامی را در خواص نظریه‌ی گروهی چرخش در مکانیک کوانتومی ایفا کرد گاهی به این آرایه‌های ماتریسی، توابع ویگنر گفته می‌شود. توجه کنید که در کت و برای (۳-۵-۴۲) مقدار z یکسانی ظاهر می‌شود. احتیاجی نداریم که آرایه‌های ماتریسی $\mathcal{D}(R)$ را بین حالت‌های ناشی از مقادیر مختلف z در نظر بگیریم. چون این آرایه‌ها به‌طور بدیهی برابر با صفر هستند. این امر به آن خاطر است که $\mathcal{D}(R)|j, m\rangle$ هنوز یک ویژه‌کت J^2 با ویژه مقدار $j(j+1)\hbar^2$ است:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2 \mathcal{D}(R) |j, m\rangle &= \mathcal{D}(R) \mathbf{J}^2 |j, m\rangle \\ &= j(j+1) \hbar^2 [\mathcal{D}(R) |j, m\rangle] \end{aligned} \quad (۴۳-۵-۳)$$

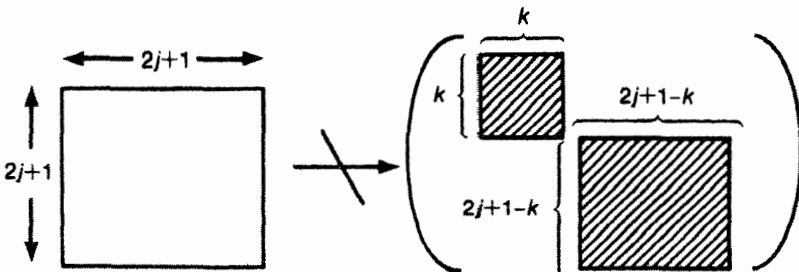
این رابطه مستقیماً از این حقیقت ناشی می‌شود که \mathbf{J}^2 با \mathbf{J}_k (و بنابراین هر تابعی از \mathbf{J}_k) جابه‌جا می‌شود. به بیان ساده، چرخش نمی‌تواند مقدار z را تغییر دهد، که این نتیجه‌ی کاملاً محسوس است.

در اغلب نوشته‌ها به ماتریس $(2j+1) \times (2j+1)$ که از $\mathcal{D}_m^{(j)}(R)$ تشکیل می‌شود، نمایش غیرقابل کاهش $(2j+1)$ بعدی عملگر چرخش $\mathcal{D}(R)$ می‌گویند. به این معنی که ماتریس متناظر با یک چرخش دلخواه در فضای کت، لازم نیست با یک z تک مقدار مشخص شود. می‌توان با انتخاب پایه‌ی مناسب آن را به شکل قطعه‌ای-قطری درآورد:



(۴۴-۵-۳)

که هر کدام از مربع‌های سایه زده یک ماتریس مربعی $(2j+1) \times (2j+1)$ تشکیل یافته از $\mathcal{D}_m^{(j)}$ با مقدار معین z است. علاوه بر آن، نمی‌توان هر ماتریس مربعی را با انتخاب پایه‌ای به قطعه‌های کوچک‌تر:



(۴۵-۵-۳)

ماتریس‌های چرخشی که با یک z معین تشکیل می‌شوند، یک گروه را می‌سازند. نخست این که یکی از اعضاء ماتریس همانی است. چون ماتریس چرخش متناظر با عدم دوران ($\phi = 0$) یک ماتریس همانی $(2j+1) \times (2j+1)$ است. دوم این که یکی از اعضاء نیز ماتریس وارون است. چون به راحتی می‌توانیم زاویه‌ی چرخش را برعکس کنیم ($\phi \rightarrow -\phi$) بدون آنکه تغییری در محور چرخش \hat{n} ایجاد شود. سوم آن که ضرب دو عضو از این گروه، خود عضوی از گروه است. صریحاً داریم:

$$\sum_{m'} \mathcal{D}_{m''m'}^{(j)}(R_1) \mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R_2) = \mathcal{D}_{m''m}^{(j)}(R_1 R_2) \quad (46-5-3)$$

که ضرب $R_1 R_2$ نمایشگر یک چرخش منفرد است. توجه کنید که ماتریس چرخش، اغلب یکانی است. چون عملگر چرخش متناظر با آن یکانی است. صریحاً داریم:

$$\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R^{-1}) = \mathcal{D}_{m'm}^{*(j)}(R) \quad (47-5-3)$$

برای مشخص شدن معنای فیزیکی ماتریس چرخش حالتی را در نظر می‌گیریم که در ابتدا با $|j, m\rangle$ نشان داده می‌شود. اکنون می‌توانیم آن را بچرخانیم:

$$|j, m\rangle \rightarrow \mathcal{D}(R)|j, m\rangle \quad (48-5-3)$$

در خلال این عمل چرخش، مقدار z تغییری نمی‌کند. به طور کلی، حالت‌هایی را به دست می‌آوریم که به جای مقدار اصلی m ، شامل m مقدار باشند. برای پیدا کردن دامنه‌ی یافتن حالت اولیه در $|j, m'\rangle$ ، حالت چرخیده را به صورت زیر نشان می‌دهیم:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(R)|j, m\rangle &= \sum_{m'} |j, m'\rangle \langle j, m' | \mathcal{D}(R) |j, m\rangle \\ &= \sum_{m'} |j, m'\rangle \mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R) \end{aligned} \quad (49-5-3)$$

که در آن ضمن استفاده از رابطه‌ی تمامیت، از این مزیت استفاده کردیم که $\mathcal{D}(R)$ تنها حالت‌هایی را به هم ارتباط می‌دهد که z یکسان داشته باشد. بنابراین وقتی که حالت نچرخیده‌ی ابتدایی ما با $|j, m\rangle$ نشان داده می‌شود، آرایه‌های ماتریسی $\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R)$ نشان‌دهنده‌ی دامنه‌ی این هستند که حالت چرخیده در $|j, m'\rangle$ قرار گیرد.

در بخش ۳-۳ دیدیم که چطور می‌توان از زوایای اویلر در تشکیل کلی‌ترین شکل چرخش استفاده کرد. اکنون نمایش ماتریسی (۳-۳-۲۰) را برای یک مقدار z اختیاری (و نه الزاماً $\frac{1}{2}$) در نظر می‌گیریم:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) &= \langle j, m' | \exp\left(\frac{-iJ_z\alpha}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{-iJ_z\gamma}{\hbar}\right) | j, m \rangle \\ &= e^{-i(m'\alpha+m\gamma)} \langle j, m' | \exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right) | j, m \rangle \end{aligned}$$

(۵۰-۵-۳)

توجه کنید که تنها قسمت غیربدیهی چرخش میانی حول محور y است که مقادیر مختلف m را در هم می‌آمیزد. بنا به قرارداد، ماتریس جدید $d^{(j)}(\beta)$ را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$d_{m'm}^{(j)}(\beta) \equiv \langle j, m' | \exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right) | j, m \rangle \quad (۵۱-۵-۳)$$

در پایان چند مثال را از نظر می‌گذرانیم. مورد $j = \frac{1}{2}$ که قبلاً در بخش ۳-۳ به دست آمد، یکی از این مثال‌هاست. ماتریس میانی (۲۱-۳-۳) را ببینید:

$$d^{(1/2)} = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) & -\sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) \end{pmatrix} \quad (۵۲-۵-۳)$$

مثال ساده‌ی دوم مربوط به مورد $j=1$ است که آن را با جزئیات بررسی می‌کنیم. واضح است که ابتدا باید نمایش ماتریس 3×3 J_y را به دست آوریم:

$$J_y = \frac{(J_+ - J_-)}{2i} \quad (۵۳-۵-۳)$$

این رابطه از تعریف (۵-۵-۳) برای J_{\pm} به دست آمد. اکنون می‌توانیم (۴۱-۵-۳) را برای به دست آوردن رابطه‌ی زیر به کار ببریم:

$$J_y^{(j=1)} = \left(\frac{\hbar}{2}\right) \begin{pmatrix} m=1 & m=0 & m=-1 \\ 0 & -\sqrt{2}i & 0 \\ \sqrt{2}i & 0 & -\sqrt{2}i \\ 0 & \sqrt{2}i & 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} m'=1 \\ m'=0 \\ m'=-1 \end{matrix} \quad (۵۴-۵-۳)$$

کار بعدی به دست آوردن بسط تیلور $\exp(-iJ_y\beta/\hbar)$ است. برخلاف مورد $j = \frac{1}{2}$ و $[J_y^{(j=1)}]^2$ مستقل از I و $J_y^{(j=1)}$ است. به این ترتیب به سادگی به دست می‌آید:

$$\left(\frac{J_y^{(j=1)}}{\hbar}\right)^3 = \frac{J_y^{(j=1)}}{\hbar} \quad (۵۵-۵-۳)$$

در نتیجه تنها برای $j = 1$ z منطقی است که جایگذاری زیر را انجام دهیم:

$$\exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right) \rightarrow 1 - \left(\frac{J_y}{\hbar}\right)^2 (1 - \cos\beta) - i\left(\frac{J_y}{\hbar}\right) \sin\beta \quad (۵۶-۵-۳)$$

که خواننده می تواند با جزییات آن را به دست آورد. صراحتاً داریم:

$$d^{(1)}(\beta) = \begin{pmatrix} \left(\frac{1}{2}\right)(1 + \cos\beta) & -\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\sin\beta & \left(\frac{1}{2}\right)(1 - \cos\beta) \\ \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\sin\beta & \cos\beta & -\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\sin\beta \\ \left(\frac{1}{2}\right)(1 - \cos\beta) & \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\sin\beta & \left(\frac{1}{2}\right)(1 + \cos\beta) \end{pmatrix} \quad (۵۷-۵-۳)$$

پیداست که این روش برای زهای بزرگ بسیار وقت گیر است. در بخش ۳-۸ روش ساده تری برای به دست آوردن $d_{mm'}^{(j)}(\beta)$ برای هر زای را خواهیم آموخت.

۶.۳ تکانه‌ی زاویه‌ای مداری

بحث در مورد مفهوم تکانه زاویه‌ای مداری را با تعریف آن به عنوان تولیدکننده‌ی چرخش بسیار کوچک آغاز می کنیم. وقتی که تکانه‌ی زاویه‌ای اسپین صفر و یا قابل صرف نظر باشد راه دیگری برای برخورد با تکانه‌ی زاویه‌ای وجود دارد. تکانه‌ی زاویه‌ای z برای یک ذره‌ی آزاد همانند تکانه‌ی زاویه‌ای مداری است که با رابطه‌ی زیر تعریف می شود:

$$\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p} \quad (۱-۶-۳)$$

در این بخش به بیان ارتباط بین این دو دستاورد می پردازیم.

تکانه‌ی زاویه‌ای مداری به عنوان تولیدکننده‌ی چرخش

ابتدا به این نکته دقت می کنیم که عملگر تکانه‌ی زاویه‌ای که در (۱-۶-۳) تعریف شده است، در روابط جابه‌جایی تکانه‌ی زاویه‌ای صدق می کند:

$$[L_i, L_j] = i\epsilon_{ijk}\hbar L_k \quad (۲-۶-۳)$$

این رابطه به خاطر برقرار بودن روابط جابه‌جایی بین مؤلفه‌های x و p حاصل می‌شود. می‌توان این رابطه را به سادگی به شکل زیر اثبات کرد:

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] \\ &= [yp_z, zp_x] + [zp_y, xp_z] \\ &= yp_x [p_z, z] + p_y x [z, p_z] \\ &= i\hbar(xp_y - yp_x) \\ &= i\hbar L_z \\ &: \end{aligned} \quad (۳-۶-۳)$$

سپس قرار می‌دهیم:

$$1 - i\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)L_z = 1 - i\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)(xp_y - yp_x) \quad (۴-۶-۳)$$

برای آزمودن این مسأله که می‌توان تکانه‌ی زاویه‌ای را به عنوان تولیدکننده‌ی چرخش حول محور Z به اندازه‌ی $\delta\phi$ انگار کرد، عملگر بالا را به ویژه کت مکان $|x', y', z'\rangle$ اعمال می‌کنیم. با استفاده از این واقعیت که تکانه تولیدکننده‌ی انتقال است، به دست می‌آوریم [(۳۲-۶-۱)] را ببینید:

$$\begin{aligned} \left[1 - i\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)L_z\right]|x', y', z'\rangle &= \left[1 - i\left(\frac{p_y}{\hbar}\right)(\delta\phi x') + i\left(\frac{p_x}{\hbar}\right)(\delta\phi y')\right]|x', y', z'\rangle \\ &= |x' - y'\delta\phi, y' + x'\delta\phi, z'\rangle \end{aligned} \quad (۵-۶-۳)$$

این دقیقاً همان چیزی است که اگر L_z تولیدکننده چرخش بی‌نهایت کوچک حول محور Z بود، از آن انتظار داشتیم. بنابراین نشان دادیم که اگر p تولیدکننده‌ی انتقال باشد، آنگاه L تولیدکننده‌ی چرخش است.

فرض کنید تابع موج یک حالت فیزیکی اختیاری برای یک ذره‌ی بدون اسپین به شکل $\langle x', y', z' | \alpha \rangle$ داده شده باشد. پس از یک چرخش بی‌نهایت کوچک حول محور Z ، تابع موج حالت چرخیده برابر است با:

$$\langle x', y', z' | \left[1 - i\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)L_z\right] | \alpha \rangle = \langle x' + y'\delta\phi, y' - x'\delta\phi, z' | \alpha \rangle \quad (۶-۶-۳)$$

در عمل بهتر است که پایه مختصات را به شکل زیر تغییر دهیم:

$$\langle x', y', z' | \alpha \rangle \rightarrow \langle r, \theta, \phi | \alpha \rangle \quad (۷-۶-۳)$$

برای حالت چرخیده، مطابق (۳-۶-۶) داریم:

$$\begin{aligned}\langle r, \theta, \phi | \left[1 - i \left(\frac{\delta\phi}{\hbar} \right) L_z \right] | \alpha \rangle &= \langle r, \theta, \phi - \delta\phi | \alpha \rangle \\ &= \langle r, \theta, \phi | \alpha \rangle - \delta\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \langle r, \theta, \phi | \alpha \rangle\end{aligned}\quad (۳-۶-۸)$$

از آن جا که $\langle r, \theta, \phi |$ یک ویژه کت اختیاری مکان است، تعریف می کنیم:

$$\langle \mathbf{x}' | L_z | \alpha \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \quad (۳-۶-۹)$$

که از نتایج معروف در مکانیک موجی است. با وجود اینکه می توانیم این رابطه را به سادگی و با استفاده از نمایش مکانی عملگر تکانه به دست آوریم؛ اما این طرز استنتاج بر نقش L_z به عنوان تولید کننده ی چرخش تأکید دارد.

در گام بعدی، چرخش حول محور x به اندازه ی زاویه ای $\delta\phi_x$ را در نظر می گیریم. در مقایسه با (۳-۶-۶) داریم:

$$\langle x', y', z' | \left[1 - i \left(\frac{\delta\phi_x}{\hbar} \right) L_x \right] | \alpha \rangle = \langle x', y' + z' \delta\phi_x, z' - y' \delta\phi_x | \alpha \rangle \quad (۳-۶-۱۰)$$

با بیان x', y' و z' در مختصات کروی می توانیم نشان دهیم که:

$$\langle \mathbf{x}' | L_x | \alpha \rangle = -i\hbar \left(-\sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \quad (۳-۶-۱۱)$$

به همین صورت

$$\langle \mathbf{x}' | L_y | \alpha \rangle = -i\hbar \left(\cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \quad (۳-۶-۱۲)$$

با استفاده از (۳-۶-۱۱) و (۳-۶-۱۲) برای به دست آوردن عملگر نردبانی L_{\pm} که در (۳-۵-۵) تعریف شده است، داریم:

$$\langle \mathbf{x}' | L_{\pm} | \alpha \rangle = -i\hbar e^{\pm i\phi} \left(\pm i \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \quad (۳-۶-۱۳)$$

در نهایت می‌توانیم با استفاده از

$$\mathbf{L}^2 = L_z^2 + \left(\frac{1}{2}\right)(L_+ L_- + L_- L_+) \quad (۱۴-۶-۳)$$

و رابطه‌های (۹-۶-۳) و (۱۳-۶-۳)، $\langle \mathbf{x}' | \mathbf{L}^2 | \alpha \rangle$ را به صورت زیر بنویسیم:

$$\langle \mathbf{x}' | \mathbf{L}^2 | \alpha \rangle = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \quad (۱۵-۶-۳)$$

جدای از $1/r^2$ ، عملگر دیفرانسیلی که در این جا ظاهر شده است مشخصاً همان قسمت زاویه‌ای لاپلاسیان در مختصات کروی می‌باشد.

به دست آوردن این ارتباط بین عملگر \mathbf{L}^2 و قسمت زاویه‌ای لاپلاسی به روشی دیگر و با استفاده از بررسی مستقیم عملگر انرژی جنبشی، حاوی نکاتی آموزنده است. ابتدا باید یک اتحاد عملگری مهم را به خاطر آوریم:

$$\mathbf{L}^2 = \mathbf{x}^2 \mathbf{p}^2 - (\mathbf{x} \cdot \mathbf{p})^2 + i\hbar \mathbf{x} \cdot \mathbf{p} \quad (۱۶-۶-۳)$$

که در آن \mathbf{x}^2 همان عملگر $\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}$ است، همان طوری که \mathbf{p}^2 نیز برابر با $\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}$ می‌باشد. اثبات عبارت فوق سراسر است:

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 &= \sum_{ijklmk} \varepsilon_{ijk} x_i p_j \varepsilon_{lmk} x_l p_m \\ &= \sum_{ijlm} (\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}) x_i p_j x_l p_m \\ &= \sum_{ijlm} [\delta_{il} \delta_{jm} x_i (x_l p_j - i\hbar \delta_{jl}) p_m - \delta_{im} \delta_{jl} x_i p_j (p_m x_l + i\hbar \delta_{lm})] \\ &= \mathbf{x}^2 \mathbf{p}^2 - i\hbar \mathbf{x} \cdot \mathbf{p} - \sum_{ijlm} \delta_{im} \delta_{jl} [x_i p_m (x_l p_j - i\hbar \delta_{jl}) + i\hbar \delta_{lm} x_i p_j] \\ &= \mathbf{x}^2 \mathbf{p}^2 - (\mathbf{x} \cdot \mathbf{p})^2 + i\hbar \mathbf{x} \cdot \mathbf{p} \end{aligned} \quad (۱۷-۶-۳)$$

قبل از قرارداد عبارت بالا بین $\langle \mathbf{x}' |$ و $|\alpha\rangle$ ابتدا باید توجه کنیم که:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}' | \mathbf{x} \cdot \mathbf{p} | \alpha \rangle &= \mathbf{x}' \cdot (-i\hbar \nabla) \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \\ &= -i\hbar r \frac{\partial}{\partial r} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \end{aligned} \quad (۱۸-۶-۳)$$

به همین صورت:

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{x}' | (\mathbf{x} \cdot \mathbf{p})^2 | \alpha \rangle &= -\hbar^2 r \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \right) \\ &= -\hbar^2 \left(r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle + r \frac{\partial}{\partial r} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \right)\end{aligned}\quad (۱۹-۶-۳)$$

بنابراین:

$$\langle \mathbf{x}' | \mathbf{L}^2 | \alpha \rangle = r^2 \langle \mathbf{x}' | \mathbf{p}^2 | \alpha \rangle + \hbar^2 \left(r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle + 2r \frac{\partial}{\partial r} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \right)\quad (۲۰-۶-۳)$$

بر حسب انرژی جنبشی $\mathbf{p}^2/2m$ داریم:

$$\begin{aligned}\frac{1}{2m} \langle \mathbf{x}' | \mathbf{p}^2 | \alpha \rangle &= - \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla'^2 \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \\ &= - \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle - \frac{1}{\hbar^2 r^2} \langle \mathbf{x}' | \mathbf{L}^2 | \alpha \rangle \right)\end{aligned}\quad (۲۱-۶-۳)$$

دو جمله‌ی اول در خط آخر، تنها شامل قسمت شعاعی لاپلاسی هستند که روی $\langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle$ عمل می‌کنند. پس آخرین جمله باید قسمت زاویه‌ای لاپلاسی باشد که روی $\langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle$ عمل می‌کند. این موضوع کاملاً با (۱۵-۶-۳) در توافق است.

هماهنگ‌های کروی

یک ذره‌ی بدون اسپین را در نظر می‌گیریم که با یک پتانسیل متقارن کروی بر هم کنش دارد. پیداست که معادله‌ی موج در مختصات کروی جدا شدنی است و ویژه توابع انرژی را می‌توان به شکل زیر نوشت:

$$\langle \mathbf{x}' | n, l, m \rangle = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi)\quad (۲۲-۶-۳)$$

که در آن بردار مکان \mathbf{x}' با مختصه‌های کروی r ، θ و ϕ مشخص می‌شود و n بیانگر عدد کوانتومی دیگری به غیر از l و m است. برای مثال این عدد برابر با عدد کوانتومی شعاعی برای مسأله‌های حالت مقید یا انرژی موج کروی یک ذره‌ی آزاد است. همان‌طور که در بخش ۳-۱۰ مشخص خواهد شد، این شکل را می‌توان به عنوان نتیجه‌ای مستقیم از ناوردایی چرخشی مسأله قلمداد کرد. وقتی که هامیلتونی دارای تقارن کروی باشد، H با L_z و L^2 جابه‌جا می‌شود و انتظار می‌رود که ویژه کت‌های انرژی، ویژه کت‌های L_z

و L^2 نیز باشند. از آن جا که L_k با $k=1,2,3$ در روابط جابه‌جایی تکانه‌ی زاویه‌ای صدق می‌کند، انتظار داریم که ویژه مقادیر L^2 و L_z برابر با $l(l+1)\hbar^2$ و $l\hbar$ باشد.

چون وابستگی زاویه‌ای در تمام مسائلی که تقارن کروی دارند، مشترک است، می‌توان این وابستگی را جدا کرد و فرض نمود که:

$$\langle \hat{n}|l, m\rangle = Y_l^m(\theta, \phi) = Y_l^m(\hat{n}) \quad (۲۳-۶-۳)$$

که در آن ویژه‌کت راستا $|\hat{n}\rangle$ را تعریف کردیم. از این نقطه نظر، $Y_l^m(\theta, \phi)$ دامنه‌ی این است که حالت مشخص شده با l و m ، در راستای \hat{n} که با θ و ϕ معین می‌شوند، یافت شود.

فرض کنید روابطی داریم که ویژه‌کت‌های تکانه زاویه‌ای را در بر می‌گیرند. بلافاصله می‌توانیم روابط متناظری بنویسیم که هارمونیک‌های کروی را در بر داشته باشند. برای مثال، معادله ویژه مقادری زیر را در نظر بگیرید:

$$L_z|l, m\rangle = m\hbar|l, m\rangle \quad (۲۴-۶-۳)$$

با ضرب $|\hat{n}\rangle$ از سمت چپ و استفاده از (۳-۶-۹) داریم:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \langle \hat{n}|l, m\rangle = m\hbar \langle \hat{n}|l, m\rangle \quad (۲۵-۶-۳)$$

این معادله را به صورت زیر دوباره نویسی می‌کنیم:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} Y_l^m(\theta, \phi) = m\hbar Y_l^m(\theta, \phi) \quad (۲۶-۶-۳)$$

که نتیجه می‌دهد، وابستگی به تابع $Y_l^m(\theta, \phi)$ باید شبیه $e^{im\phi}$ رفتار کند. به همین صورت، متناظر با:

$$L^2|l, m\rangle = l(l+1)\hbar^2|l, m\rangle \quad (۲۷-۶-۳)$$

داریم [(۳-۶-۱۵) را ببینید]:

$$\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + l(l+1) \right] Y_l^m = 0 \quad (۲۸-۶-۳)$$

که این معادله‌ی دیفرانسیل جزئی است که خود Y_l^m در آن صدق می‌کند. شرط تعامد:

$$\langle l', m'|l, m\rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (۲۹-۶-۳)$$

نتیجه می‌دهد:

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos\theta) Y_l^{m'}(\theta, \phi) Y_l^m(\theta, \phi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (30-6-3)$$

که در آن از رابطه‌ی تمامیت برای ویژه‌کتهای مکان استفاده شده است:

$$\int d\Omega_{\hat{n}} |\hat{n}\rangle \langle \hat{n}| = 1 \quad (31-6-3)$$

برای به‌دست آوردن خود Y_l^m ها، می‌توانیم از مورد $m=l$ شروع کنیم. داریم:

$$L_+ |l, l\rangle = 0 \quad (32-6-3)$$

که با توجه به (3-6-13) از آن نتیجه می‌شود:

$$-i\hbar e^{i\phi} \left[i \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right] \langle \hat{n}|l, l\rangle = 0 \quad (33-6-3)$$

به یاد می‌آوریم که وابستگی ϕ تابع ما رفتاری به‌شکل $e^{i\ell\phi}$ دارد. به راحتی می‌توان نشان داد که عبارت زیر در معادله دیفرانسیل جزئی ما صدق می‌کند:

$$\langle \hat{n}|l, l\rangle = Y_l^l(\theta, \phi) = c_l e^{i\ell\phi} \sin^l \theta \quad (34-6-3)$$

که در آن c_l همان ضریب بهنجارش است و با توجه به رابطه‌ی (3-6-30) به‌دست می‌آید*:

$$c_l = \left[\frac{(-1)^l}{2^l l!} \right] \sqrt{\frac{[(2l+1)(2l)!]}{4\pi}} \quad (35-6-3)$$

با شروع از (3-6-34) می‌توانیم با ثابت نگه داشتن l تمام Y_l^m ها را با استفاده از روش زیر به‌دست

آوریم:

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}|l, m-1\rangle &= \frac{\langle \hat{n}|L_-|l, m\rangle}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)} \hbar} \\ &= \frac{1}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)}} e^{-i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \langle \hat{n}|l, m\rangle \end{aligned}$$

(36-6-3)

* شرط تعامد (3-6-30) فاز c_l را مشخص نمی‌کند. عامل $(-1)^l$ طوری وارد می‌شود که وقتی برای رسیدن به حالت $m=0$ به طور متوالی از L_-

استفاده می‌کنیم، Y_l^0 را با همان علامت چند جمله‌ای‌های لژاندر $P_l(\cos\theta)$ به‌دست آوریم که فاز آن‌ها با $P_l(1)=1$ ثابت می‌شود [3-6-39]

از آن جا که در بسیاری از متون مقدماتی مکانیک کوانتومی، این کار انجام شده است در این جا از به دست آوردن جزییات خودداری می‌کنیم. نتیجه برای $m \geq 0$ به صورت

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi(l-m)!}} e^{im\phi} \frac{1}{\sin^m \theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l} \quad (37-6-3)$$

است و Y_l^{-m} را به شکل زیر تعریف می‌کنیم:

$$Y_l^{-m}(\theta, \phi) = (-1)^m [Y_l^m(\theta, \phi)]^* \quad (38-6-3)$$

صرف نظر از این که m مثبت یا منفی باشد، قسمت وابسته‌ی θ تابع $Y_l^m(\theta, \phi)$ عبارت است از ضرب $m = 0$ در یک چندجمله‌ای از $\cos \theta$ ، که بالاترین توان آن برابر با $l - |m|$ است. برای $m = 0$ داریم:

$$Y_l^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta) \quad (39-6-3)$$

از نقطه نظر روابط جابه‌جایی تکانه‌ی زاویه‌ای، به تنهایی، واضح نیست که چرا l نمی‌تواند نیم صحیح باشد. دلیل‌های زیادی می‌تواند در رد مقادیر l نیم صحیح ارائه شود. نخست این که برای l نیم صحیح و بنابراین m نیم صحیح، تحت یک چرخش 2π یک علامت منفی پشت تابع موج ظاهر می‌شود:

$$e^{im(2\pi)} = -1 \quad (40-6-3)$$

در نتیجه، تابع موج تک مقدار نخواهد بود. اما در بخش ۲-۴ نشان دادیم که تابع موج باید تک مقدار باشد، تک مقدار بودن تابع موج، به خاطر این الزام است که بسط یک کت حالت بر حسب ویژه کت‌های مکان، منحصراً بر فرد است. می‌توانیم اثبات کنیم که اگر L ، که به شکل $\mathbf{x} \times \mathbf{p}$ تعریف می‌شود، به عنوان تولیدکننده‌ی چرخش در نظر گرفته شود، آنگاه تحت یک چرخش 2π تابع موج علامت مثبت می‌گیرد. این مسأله از این واقعیت ناشی می‌شود که تابع موج حالت 2π چرخیده، بدون هیچ تغییر علامتی همان تابع موج ابتدایی است:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}' | \exp\left(\frac{-iL_z 2\pi}{\hbar}\right) | \alpha \rangle &= \langle x' \cos 2\pi + y' \sin 2\pi, y' \cos 2\pi - x' \sin 2\pi, z' | \alpha \rangle \\ &= \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \end{aligned}$$

که در آن از (۳-۶-۶) برای زوایای متناهی استفاده کردیم. در ادامه بگذارید فرض کنیم که $Y_l^m(\theta, \phi)$ با مقادیر نیم صحیح l نیز ممکن است. جهت مشخص شدن مسأله، ساده ترین مورد $l = m = \frac{1}{2}$ را انتخاب می کنیم. مطابق با (۳-۶-۳۴) داریم:

$$Y_{1/2}^{1/2}(\theta, \phi) = c_{1/2} e^{i\phi/2} \sqrt{\sin \theta} \quad (۳-۶-۴۲)$$

از خاصیت L_- [۳-۶-۳۶] را ببینید] می توانیم به دست آوریم:

$$\begin{aligned} Y_{1/2}^{-1/2}(\theta, \phi) &= e^{-i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) (c_{1/2} e^{i\phi/2} \sqrt{\sin \theta}) \\ &= -c_{1/2} e^{-i\phi/2} \cot \theta \sqrt{\sin \theta} \end{aligned} \quad (۳-۶-۴۳)$$

این عبارت منطقی نیست، چون در $\theta = 0, \pi$ تکیه است. اما آنچه اشتباه تر است، این است که از معادله دیفرانسیل جزئی:

$$\begin{aligned} \left\langle \hat{n} | L_- | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= -i\hbar e^{-i\phi} \left(-i \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \left\langle \hat{n} | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ &= 0 \end{aligned} \quad (۳-۶-۴۴)$$

مستقیماً به دست می آید:

$$Y_{1/2}^{-1/2} = c'_{1/2} e^{-i\phi/2} \sqrt{\sin \theta} \quad (۳-۶-۴۵)$$

که شدیداً با (۳-۶-۴۳) در تناقض است. سرانجام از قضیه ی اشتروم-لیوویل در معادلات دیفرانسیل می دانیم که جواب (۳-۶-۲۸) با l صحیح یک مجموعه ی کامل را شکل می دهد. یک تابع اختیاری از θ و ϕ را می توان برحسب Y_l^m ، تنها با l و m صحیح بسط داد. به خاطر تمام این دلایل انتظار می رود که تکانه ی زاویه ای مداری با مقادیر نیم صحیح l بی معنی باشد.

هماهنگ های کروی به عنوان ماتریس های چرخش

با بحث روی هماهنگ های کروی از نقطه نظر ماتریس های چرخش که در بخش پیش معرفی شد، این بخش تکانه ی زاویه ای مداری را به انجام می رسانیم. به سرعت می توان روابط دلخواه بین دو دستاورد یاد شده را با تشکیل کلی ترین کت راستا $|\hat{n}\rangle$ و با اعمال عملگر چرخش مناسب روی $|\hat{z}\rangle$ ، که همان ویژه کت راستا در جهت مثبت z است، به دست آورد. می خواهیم $\mathcal{D}(R)$ را طوری بیابیم که:

$$|\hat{n}\rangle = \mathcal{D}(R) |\hat{z}\rangle \quad (۳-۶-۴۶)$$

باشد. می‌توانیم به همان ترتیبی که برای تشکیل ویژه اسپینور $\sigma \cdot \hat{n}$ در بخش ۳-۲ رفتار کردیم، عمل نماییم. ابتدا باید چرخشی حول محور Y به اندازه‌ی θ انجام می‌دهیم و سپس حول محور Z به اندازه ϕ چرخش دیگری انجام می‌شود؛ شکل ۳-۳ را با تبدیل $\theta \rightarrow \beta$ و $\phi \rightarrow \alpha$ ببینید. در نمادگذاری زوایای اوایلر داریم:

$$\mathcal{D}(R) = \mathcal{D}(\alpha = \phi, \beta = \theta, \gamma = 0) \quad (۴۷-۶-۳)$$

با نوشتن (۴۶-۶-۳) به شکل:

$$|\hat{n}\rangle = \sum_l \sum_m \mathcal{D}(R) |l, m\rangle \langle l, m | \hat{z} \rangle \quad (۴۸-۶-۳)$$

می‌بینیم که $|\hat{n}\rangle$ وقتی برحسب $|l, m\rangle$ بسط داده می‌شود، تمام مقادیر ممکن l را شامل می‌شود. با این وجود وقتی این معادله را از سمت چپ در $\langle l, m' |$ ضرب می‌کنیم، فقط یک جمله از جمع l باقی می‌ماند. داریم:

$$\langle l, m' | \hat{n} \rangle = \sum_m \mathcal{D}_{m' m}^{(l)}(\alpha = \phi, \beta = \theta, \gamma = 0) \langle l, m | \hat{z} \rangle \quad (۴۹-۶-۳)$$

اکنون $\langle l, m | \hat{z} \rangle$ تنها یک عدد است. در واقع این عبارت دقیقاً با $Y_l^{m*}(\theta, \phi)$ در $\theta = 0$ و ϕ نامعین برابر است. در $\theta = 0$ ، می‌دانیم که برای Y_l^m ، $m \neq 0$ صفر می‌شود. این مسأله را می‌توان مستقیماً از این واقعیت به دست آورد که $|\hat{z}\rangle$ یک ویژه کت L_z (معادل با $xp_y - yp_x$) با ویژه مقدار صفر می‌باشد، بنابراین می‌نویسیم:

$$\begin{aligned} \langle l, m | \hat{z} \rangle &= Y_l^{m*}(\theta = 0, \phi \text{ نامعین}) \delta_{m0} \\ &= \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}} P_l(\cos \theta) \Big|_{\cos \theta = 1} \delta_{m0} \\ &= \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}} \delta_{m0} \end{aligned} \quad (۵۰-۶-۳)$$

بازگشت به (۴۹-۶-۳) نشان می‌دهد که:

$$Y_l^{m*}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}} \mathcal{D}_{m0}^{(l)}(\alpha = \phi, \beta = \theta, \gamma = 0) \quad (۵۱-۶-۳)$$

یا

$$\mathcal{D}_{m0}^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma = 0) = \sqrt{\frac{4\pi}{(2l+1)}} Y_l^{m*}(\theta, \phi) \Big|_{\theta = \beta, \phi = \alpha} \quad (۵۲-۶-۳)$$

توجه کنید که مورد $m = 0$ به طور خاص دارای اهمیت است:

$$d_{00}^{(l)}(\beta) \Big|_{\beta = \theta} = P_l(\cos \theta) \quad (۵۳-۶-۳)$$

۷.۳ جمع تکانه‌های زاویه‌ای

جمع تکانه‌ی زاویه‌ای در تمام محدودهای فیزیکی جدید- از طیف‌سنجی اتمی گرفته تا برخوردهای ذرات و هسته‌ها- نقش مهمی دارد. به‌علاوه، مطالعه‌ی جمع تکانه‌ی زاویه‌ای فرصت خوبی ایجاد می‌کند تا مفهوم تغییر پایه که به‌طور مبسوط در فصل ۱ مورد بحث قرار گرفت را روشن کنیم.

مثال‌های ساده جمع تکانه‌ی زاویه‌ای

قبل از مطالعه‌ی کلی نظریه‌ی جمع تکانه‌ی زاویه‌ای مطالعه‌ی دو مثال ساده ارزشمند است، که خواننده ممکن است با آن‌ها آشنا باشد: (۱) چطور می‌توان تکانه‌ی زاویه‌ای مدارِی و تکانه‌ی زاویه‌ای اسپین را با هم جمع کرد و (۲) چطور می‌توان تکانه‌ی زاویه‌ای اسپین دو ذره با اسپین $\frac{1}{2}$ را با هم جمع کرد. پیش از این، سیستم‌های اسپین $\frac{1}{2}$ را بدون در نظر گرفتن تمام درجات آزادی کوانتومی غیر از اسپین - مانند مکان و تکانه - مطالعه کرده‌ایم. در واقع ذرات کوانتوم مکانیکی را با در نظر گرفتن درجات آزادی فضایی (مانند مکان و تکانه) مطالعه کرده‌ایم، اما از درجات آزادی داخلی آن‌ها (مانند اسپین) صرف‌نظر کرده‌ایم. توصیف واقعی ذره‌ای با اسپین، وقتی صورت می‌گیرد که هم درجه آزادی فضایی و هم درجات آزادی داخلی را به حساب آوریم. می‌توان کت پایه‌ی یک ذره با اسپین $\frac{1}{2}$ را با ضرب کردن کت فضا (که در فضای بی‌نهایت بعدی در نظر گرفته می‌شود)، در فضای دو بعدی اسپین به‌دست آورد. کت فضا، با ویژه‌کت‌های مکان $\{|x'\rangle\}$ مشخص می‌شوند و کت‌های دو بعدی اسپین با $|+\rangle$ و $|-\rangle$ معین می‌گردند. به این ترتیب برای کت پایه داریم:

$$|x', \pm\rangle = |x'\rangle \otimes |\pm\rangle \quad (1-7-3)$$

که در آن هر عملگری در فضای $\{|x'\rangle\}$ با هر عملگری در فضای دو بعدی $|\pm\rangle$ جابه‌جا می‌شود.

عملگر چرخش هنوز به‌شکل $\exp(-i\mathbf{J}\cdot\hat{\mathbf{n}}\phi/\hbar)$ است اما \mathbf{J} ، که همان تولیدکننده‌ی چرخش است، اکنون از دو قسمت ساخته شده است. داریم:

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (2-7-3)$$

در عمل (۲-۷-۳) را به‌صورت زیر می‌نویسیم:

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} \otimes 1 + 1 \otimes \mathbf{S} \quad (3-7-3)$$

که در آن $1 \otimes \mathbf{L}$ نشان‌دهنده‌ی عملگر همانی در فضای اسپین است، در حالی که $1 \otimes \mathbf{S}$ بیان‌کننده‌ی عملگر همانی در فضای کت بی‌نهایت بُعدی ویژه‌کت‌های مکان است. از آن‌جا که \mathbf{L} و \mathbf{S} جابه‌جا می‌شوند، می‌توانیم بنویسیم:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(R) &= \mathcal{D}^{(\text{orb})}(R) \otimes \mathcal{D}^{(\text{spin})}(R) \\ &= \exp\left(\frac{-i\mathbf{L} \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{\hbar}\right) \otimes \exp\left(\frac{-i\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{\hbar}\right) \end{aligned} \quad (۴-۷-۳)$$

تابع موج برای یک ذره با اسپین را می‌توان به شکل زیر نوشت:

$$\langle \mathbf{x}', \pm | \alpha \rangle = \psi_{\pm}(\mathbf{x}') \quad (۵-۷-۳)$$

دو مؤلفه‌ی ψ_{\pm} اغلب در یک ماتریس ستونی به شکل زیر قرار می‌گیرند:

$$\begin{pmatrix} \psi_{+}(\mathbf{x}') \\ \psi_{-}(\mathbf{x}') \end{pmatrix} \quad (۶-۷-۳)$$

که در آن $|\psi_{\pm}(\mathbf{x}')|^2$ چگالی احتمال یافتن ذره در \mathbf{x}' با اسپین بالا یا پایین است. به‌جای استفاده از $|\mathbf{x}'\rangle$ به‌عنوان قسمت فضایی کت می‌توانیم از $|n, l, m\rangle$ استفاده کنیم که ویژه‌کت \mathbf{L}^2 و L_z به ترتیب با ویژه مقادیر $\hbar^2 l(l+1)$ و $m\hbar$ است. برای قسمت اسپینی، $|\pm\rangle$ ویژه‌کت‌های \mathbf{S}^2 و S_z هستند که به ترتیب ویژه مقادیر $3\hbar^2/4$ و $\pm\hbar/2$ را دارند. با این حال همان‌طور که بعداً نشان خواهیم داد، غالباً می‌توانیم از کت‌های پایه‌ای استفاده کنیم که ویژه‌کت‌های \mathbf{J}^2 ، \mathbf{J}_z ، \mathbf{L}^2 و \mathbf{S}^2 هستند. به عبارت دیگر، می‌توانیم کت حالت یک ذره با اسپین را برحسب ویژه‌کت‌های همزمان \mathbf{L}^2 ، \mathbf{S}^2 ، L_z و S_z یا برحسب ویژه‌کت‌های همزمان \mathbf{J}^2 ، \mathbf{J}_z ، \mathbf{L}^2 و \mathbf{S}^2 بسط دهیم. چگونگی ارتباط این تعبیرها را با جزئیات مطالعه می‌کنیم.

به‌عنوان مثال دوم دو ذره با اسپین $\frac{1}{2}$ ، مثلاً دو الکترون را، بدون در نظر گرفتن درجه آزادی مداری، در نظر بگیرید. معمولاً عملگر اسپین مجموع را به شکل زیر می‌نویسند:

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 \quad (۷-۷-۳)$$

اما این رابطه همانند قبل به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$\mathbf{S}_1 \otimes 1 + 1 \otimes \mathbf{S}_2 \quad (۸-۷-۳)$$

که 1 در اولین (دومین) جمله‌ی عبارت، نشان‌دهنده‌ی عملگر همانی در فضای اسپین الکترون 2 (۱) است. البته:

$$[S_{1x}, S_{2y}] = 0 \quad (۹-۷-۳)$$

و عبارت‌های نظیر آن نیز برقرارند. در فضای الکترون ۱ (۲) روابط معمولی جابه‌جایی برقرارند.

$$[S_{1x}, S_{1y}] = i\hbar S_{1z}, [S_{2x}, S_{2y}] = i\hbar S_{2z}, \dots \quad (۱۰-۷-۳)$$

به‌عنوان نتیجه‌ی مستقیم (۳-۷-۹) و (۳-۷-۱۰) داریم:

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z \quad (۱۱-۷-۳)$$

و روابط نظیر این رابطه که همه برای عملگر اسپین مجموع برقرارند.

ویژه مقادیر عملگرهای مختلف اسپین به‌شکل زیر تعریف می‌شود:

$$S^2 = (S_1 + S_2)^2: s(s+1)\hbar^2$$

$$S_z = S_{1z} + S_{2z} : m\hbar$$

$$S_{1z} : m_1\hbar$$

$$S_{2z} : m_2\hbar \quad (۱۲-۷-۳)$$

دوباره می‌توانیم کت متناظر با حالت اختیاری اسپین دو الکترون را برحسب هر کدام از ویژه‌کت‌های S^2 و S_z یا S_{1z} و S_{2z} بسط دهیم. دو امکان، به‌صورت زیر، وجود دارند:

۱- نمایش $\{m_1, m_2\}$ بر پایه‌ی ویژه‌کت‌های S_{1z} و S_{2z} :

$$|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle \text{ و } |--\rangle \quad (۱۳-۷-۳)$$

که در آن $|+-\rangle$ برای حالت $m_1 = \frac{1}{2}$ و $m_2 = -\frac{1}{2}$ هستند و به‌همین صورت.

۲- نمایش $\{s, m\}$ (یا نمایش یگانه-سه‌گانه) بر پایه‌ی ویژه‌کت‌های S^2 و S_z :

$$|s=1, m=\pm 1, 0\rangle, |s=0, m=0\rangle \quad (۱۴-۷-۳)$$

که در آن $s=1$ یا $(s=0)$ مربوط به حالت سه‌گانه یا یگانه است.

توجه کنید که در هر کدام از مجموعه‌ها ۴ کت پایه وجود دارد. ارتباط بین این دو مجموعه کت‌های

پایه به‌شکل زیر است:

$$|s=1, m=1\rangle = |++\rangle \quad (۱۵-۷-۳ \text{ الف})$$

$$|s=1, m=0\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)(|+-\rangle + |-+\rangle) \quad (۱۵-۷-۳ \text{ ب})$$

$$|s=1, m=-1\rangle = |--\rangle \quad (۱۵-۷-۳ \text{ ج})$$

$$|s=0, m=0\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)(|+-\rangle - |-+\rangle) \quad (۱۵-۷-۳ \text{ د})$$

سمت راست معادله‌ی (۳-۷-۱۵ الف) به ما می‌گوید که ما دو الکترون با اسپین رو به بالا داریم. این وضعیت تنها وقتی برقرار است که $m = 1$ و $s = 1$ باشد. با اعمال عملگر نردبانی (۳-۷-۱۵ ب) را از (۳-۷-۱۵ الف) به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} S_- &\equiv S_{1-} + S_{2-} \\ &= (S_{1x} - iS_{1y}) + (S_{2x} - iS_{2y}) \end{aligned} \quad (۳-۷-۱۶)$$

البته باید این عملگر را به دو طرف (۳-۷-۱۵ الف) اعمال کنیم. باید به خاطر بسپاریم که عملگر مربوط به الکترون ۱ مثلاً S_{1-} تنها روی اولین عضو $\langle ++ \rangle$ اثر می‌کند و به همین صورت می‌توانیم بنویسیم:

$$S_- |s=1, m=1\rangle = (S_{1-} + S_{2-}) |++\rangle \quad (۳-۷-۱۷)$$

به طوری که:

$$\begin{aligned} \sqrt{(1+1)(1-1+1)} |s=1, m=0\rangle &= \sqrt{\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} + 1\right)} \times |-\rangle + \\ &+ \sqrt{\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} + 1\right)} |+-\rangle \end{aligned} \quad (۳-۷-۱۸)$$

که بلافاصله به (۳-۷-۱۵ ب) منجر می‌شود. به همین صورت، با اعمال مجدد (۳-۷-۱۶) بر معادله‌ی (۳-۷-۱۵ ب) می‌توانیم $|s=1, m=-1\rangle$ را به دست آوریم. در پایان با به کار بردن الزام متعامد بودن کت حاضر در (۳-۷-۱۵ د) بر سه کت دیگر، به ویژه کت (۳-۷-۱۵ ب)، می‌توان رابطه‌ی (۳-۷-۱۵ د) را به دست آورد.

ضرایبی که در سمت راست عبارت (۳-۷-۱۵) ظاهر شدند، ساده‌ترین نمونه‌ها از ضرایب کلبش-گوردن هستند که بعداً به آن‌ها خواهیم پرداخت. این ضرایب آرایه‌های معمولی ماتریس گذاری هستند که پایه‌ی $\{m_1, m_2\}$ را بر پایه‌ی $\{s, m\}$ وصل می‌کند. به دست آوردن این ضرایب از راهی دیگر آموخته است. فرض کنید ماتریسی 4×4 در پایه‌ی (m_1, m_2) ، متناظر با عبارت زیر می‌نویسیم:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}^2 &= \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \\ &= \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2S_{1z}S_{2z} + S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+} \end{aligned} \quad (۳-۷-۱۹)$$

پیدا است که این ماتریس مربعی قطری نیست. چون عملگرهایی همچون S_{1+} کت‌های $\langle -+ \rangle$ و $\langle ++ \rangle$ را به هم مربوط می‌کند. ماتریس یکانی قطری کننده‌ی این ماتریس، ماتریسی است که پایه‌های $\langle m_1, m_2 \rangle$ و $\langle s, m \rangle$ را به هم وصل می‌کند. آرایه‌های این ماتریس یکانی، دقیقاً همان ضرایب کلبش-گوردن در این مسأله‌اند. به خواننده توصیه می‌شود که این مسأله را با تمام جزئیات به دست آورد.

نظریه کلی جمع تکانه‌ی زاویه‌ای

حال با داشتن یک دید کلی که ناشی از حل چند مسأله‌ی ساده بود، در موقعیتی هستیم که نظریه‌ی کلی جمع تکانه‌ی زاویه‌ای را به‌طور همه‌جانبه‌تر بررسی کنیم. دو عملگر تکانه زاویه‌ای \mathbf{J}_1 و \mathbf{J}_2 را در دو زیرفضاهای متفاوت در نظر بگیرید. مؤلفه‌های \mathbf{J}_1 (\mathbf{J}_2) در روابط معمولی جابه‌جایی تکانه‌ی زاویه‌ای صدق می‌کنند:

$$[J_{1i}, J_{1j}] = i\hbar \varepsilon_{ijk} J_{1k} \quad (\text{الف } ۲۰-۷-۳)$$

$$[J_{2i}, J_{2j}] = i\hbar \varepsilon_{ijk} J_{2k} \quad (\text{ب } ۲۰-۷-۳)$$

با وجود این، رابطه‌ی

$$[J_{1k}, J_{2l}] = 0 \quad (۲۱-۷-۳)$$

بین هر جفت عملگری که در زیرفضاهای متفاوت عمل می‌کنند، برقرار است.

عملگر چرخش بی‌نهایت کوچک که هم بر روی زیرفضای ۱ و هم بر زیرفضای ۲ عمل می‌کند به‌شکل زیر نوشته می‌شود:

$$\left(1 - \frac{i\mathbf{J}_1 \cdot \hat{\mathbf{n}} \delta\phi}{\hbar}\right) \otimes \left(1 - \frac{i\mathbf{J}_2 \cdot \hat{\mathbf{n}} \delta\phi}{\hbar}\right) = 1 - \frac{i(\mathbf{J}_1 \otimes 1 + 1 \otimes \mathbf{J}_2) \cdot \hat{\mathbf{n}} \delta\phi}{\hbar} \quad (۲۲-۷-۳)$$

تکانه‌ی زاویه‌ای کل را به‌شکل زیر تعریف می‌کنیم:

$$\mathbf{J} \equiv \mathbf{J}_1 \otimes 1 + 1 \otimes \mathbf{J}_2 \quad (۲۳-۷-۳)$$

که به‌طور عام‌تر به‌شکل زیر نوشته می‌شود:

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2 \quad (۲۴-۷-۳)$$

رابطه‌ی (۲۲-۷-۳) برای زوایای متناهی به‌شکل زیر است:

$$\mathcal{D}_1(R) \otimes \mathcal{D}_2(R) = \exp\left(\frac{-i\mathbf{J}_1 \cdot \hat{\mathbf{n}} \phi}{\hbar}\right) \otimes \exp\left(\frac{-i\mathbf{J}_2 \cdot \hat{\mathbf{n}} \phi}{\hbar}\right) \quad (۲۵-۷-۳)$$

توجه کنید که محور چرخش و زاویه‌ی چرخش برابرند.

توجه به اینکه \mathbf{J} کل در روابط جابه‌جایی تکانه‌ی زاویه‌ای:

$$[J_i, J_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} J_k \quad (۲۶-۷-۳)$$

که این نتیجه‌ی مستقیمی از (۲۰-۷-۳) و (۲۱-۷-۳) است. به عبارت دیگر \mathbf{J} به‌عنوان یک تکانه‌ی زاویه‌ای، که در بخش ۳-۱ معرفی شد، می‌باشد. از نظر فیزیکی نیز این منطقی به‌نظر می‌رسد، چون \mathbf{J} تولیدکننده‌ای برای کل سیستم است. هر آنچه که در بخش ۳-۵ خواندیم - برای مثال، طیف ویژه مقدری \mathbf{J}^2 و J_z و آرایه‌های ماتریسی عملگرهای نردبانی - برای عملگر \mathbf{J} کل نیز صادق است.

برای انتخاب کت‌های پایه دو امکان وجود دارد:

امکان الف: ویژه‌کت‌های همزمان \mathbf{J}_1^2 ، \mathbf{J}_2^2 ، J_{1z} و J_{2z} که با $|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$ نشان داده می‌شوند. واضح است که این چهار عملگر با هم جابه‌جا می‌شوند. معادله‌های تعریف‌کننده عبارتند از:

$$\mathbf{J}_1^2 |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle = j_1(j_1 + 1)\hbar^2 |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \quad (\text{الف } ۲۷-۷-۳)$$

$$J_{1z} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle = m_1 \hbar |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \quad (\text{ب } ۲۷-۷-۳)$$

$$\mathbf{J}_2^2 |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle = j_2(j_2 + 1)\hbar^2 |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \quad (\text{ج } ۲۷-۷-۳)$$

$$J_{2z} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle = m_2 \hbar |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \quad (\text{د } ۲۷-۷-۳)$$

امکان ب: ویژه‌کت‌های همزمان \mathbf{J}^2 ، \mathbf{J}_1^2 ، \mathbf{J}_2^2 و J_z . ابتدا دقت کنید که این عملگرها دو به دو با هم جابه‌جا می‌شوند. به‌خصوص داریم:

$$[\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_1^2] = 0 \quad (۲۸-۷-۳)$$

که می‌توان با نوشتن \mathbf{J}^2 به‌شکل زیر آن را سریعاً به‌دست آورد:

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{J}_1^2 + \mathbf{J}_2^2 + 2J_{1z}J_{2z} + J_{1+}J_{2-} + J_{1-}J_{2+} \quad (۲۹-۷-۳)$$

برای نشان دادن کت حالت در امکان ب $|j_1, j_2; jm\rangle$ را تعریف می‌کنیم:

$$\mathbf{J}_1^2 |j_1 j_2; jm\rangle = j_1(j_1 + 1)\hbar^2 |j_1 j_2; jm\rangle \quad (\text{الف } ۳۰-۷-۳)$$

$$\mathbf{J}_2^2 |j_1 j_2; jm\rangle = j_2(j_2 + 1)\hbar^2 |j_1 j_2; jm\rangle \quad (\text{ب } ۳۰-۷-۳)$$

$$\mathbf{J}^2 |j_1 j_2; jm\rangle = j(j + 1)\hbar^2 |j_1 j_2; jm\rangle \quad (\text{ج } ۳۰-۷-۳)$$

$$J_z |j_1 j_2; jm\rangle = m\hbar |j_1 j_2; jm\rangle \quad (\text{د } ۳۰-۷-۳)$$

معمولاً J_1 و J_2 را دانسته انگار می‌کنیم و کت‌های پایه را به‌طور مختصر به صورت $\langle j, m |$ می‌نویسیم. بسیار مهم است که توجه کنیم با این که:

$$[\mathbf{J}^2, J_z] = 0 \quad (۳۱-۷-۳)$$

برقرار است، داریم:

$$[\mathbf{J}^2, J_{1z}] \neq 0, \quad [\mathbf{J}^2, J_{2z}] \neq 0 \quad (۳۲-۷-۳)$$

خواننده می‌تواند با به‌کار بستن (۲۹-۷-۳)، این رابطه را اثبات کند. این نشان می‌دهد که نمی‌توانیم \mathbf{J}^2 را به مجموعه عملگرهای امکان‌الف بیافزاییم. به همین صورت نمی‌توانیم J_{1z} و یا J_{2z} را به مجموعه عملگرهای امکان‌ب اضافه کنیم. ما دو مجموعه‌ی ممکن از کت‌هایی را تشکیل داده‌ایم که متناظر با دو مجموعه از حداکثر مشاهده‌پذیرهایی هستند که به‌طور متقابل با هم سازگار می‌باشند.

حال تبدیل یکانی را، همان‌طور که در بخش ۱-۵ داشتیم، در نظر می‌گیریم. این تبدیل دو پایه را به هم مربوط می‌کند:

$$|j_1 j_2; jm\rangle = \sum_{m_1 m_2} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm\rangle \quad (۳۳-۷-۳)$$

که در آن از

$$\sum_{m_1 m_2} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2| = 1 \quad (۳۴-۷-۳)$$

استفاده کرده‌ایم. طرف راست این عبارت، عملگر یکانی در فضای کت داده شده برای J_1 و J_2 است. آرایه‌های ماتریس $\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm\rangle$ ضرایب کلبش-گوردن هستند. ضرایب کلبش-گوردن خواص بسیار مهمی دارند که اکنون آمادگی مطالعه‌ی آن‌ها را داریم، اولین خاصیت آن‌ست که آن‌ها صفر هستند مگر

$$m = m_1 + m_2 \quad (۳۵-۷-۳)$$

برای اثبات این رابطه ابتدا باید توجه کرد که:

$$(J_z - J_{1z} - J_{2z}) |j_1 j_2; jm\rangle = 0 \quad (۳۶-۷-۳)$$

اگر این رابطه را از سمت چپ در $\langle j_1 j_2; m_1 m_2 |$ ضرب کنیم، داریم:

$$(m - m_1 - m_2) \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm\rangle = 0 \quad (۳۷-۷-۳)$$

که ادعای ما را اثبات می‌کند. قدرت نمادگذاری دیراک ظاهر شد! به همین خاطر بود که ضرایب کلبش-گوردن را به شکل گروه‌ی دیراک نوشتیم.

خاصیت دوم اینکه این ضرایب فقط در صورتی غیر صفرند که:

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \quad (38-7-3)$$

این خاصیت را می‌توان با استفاده از مدل برداری جمع تکانه‌ی زاویه‌ای نشان داد. در این مدل \mathbf{J} کل را به صورت جمع برداری J_1 و J_2 در نظر می‌گیریم. می‌توان درستی رابطه (38-7-3) را به این صورت بررسی نمود که اگر این رابطه برقرار باشد در این صورت بعد فضاهایی که توسط $\{|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$ و $\{|j_1 j_2; jm\rangle$ جاروب می‌شوند، یکسان خواهند بود. از راه شمارش (m_1, m_2) ، به دست می‌آوریم:

$$N = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \quad (39-7-3)$$

زیرا برای یک j_1 مشخص، به تعداد $2j_1 + 1$ مقدار ممکن برای m_1 وجود دارد. این گفته برای تکانه‌ی زاویه‌ای دیگر j_2 نیز برقرار است. برای شمارش از طریق (j, m) ، توجه می‌کنیم که به ازای هر مقدار j ، به اندازه‌ی $2j + 1$ حالت وجود دارند و بنابر (38-7-3)، خود j از $j_1 - j_2$ تا $j_1 + j_2$ مقدار می‌گیرد. در این جا بدون از دست دادن کلیت مسأله $j_1 \geq j_2$ را در نظر گرفته‌ایم. بنابراین به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} N &= \sum_{j=j_1-j_2}^{j_1+j_2} (2j+1) \\ &= \frac{1}{2} [\{2(j_1 - j_2) + 1\} + \{2(j_1 + j_2) + 1\}] (2j_2 + 1) \\ &= (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \end{aligned} \quad (40-7-3)$$

از آن جا که هر دو راه شمارش مقدار N یکسانی را خواهد داد، می‌بینیم که (38-7-3) کاملاً سازگار است.*

ضرایب کلبش-گوردن یک ماتریس یکانی را تشکیل می‌دهند. به علاوه آرایه‌های ماتریس بنا به قرارداد حقیقی در نظر گرفته می‌شوند. یک نتیجه‌ی بلادرنگ این مسأله آن است که معکوس ضریب $\langle j_1 j_2; jm | j_1 j_2; m_1 m_2 \rangle$ برابر با $\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle$ می‌باشد. هر ماتریس یکانی حقیقی، متعامد است. بنابراین شرط تعامد به صورت:

$$\sum_j \sum_m \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle \langle j_1 j_2; m'_1 m'_2 | j_1 j_2; jm \rangle = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2}$$

(۴۱-۷-۳)

را داریم. این رابطه از متعامد بودن $\{|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle\}$ بر همدیگر و حقیقی بودن ضرایب کلبش-گوردن واضح می‌باشد. به همین ترتیب داریم:

$$\sum_{m_1 m_2} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j' m' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \quad (۴۲-۷-۳)$$

به‌عنوان یک حالت خاص، می‌توانیم قرار دهیم $j' = j$ و $m' = m = m_1 + m_2$. در نتیجه به‌دست می‌آوریم:

$$\sum_{m_1 m_2} |\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle|^2 = 1 \quad (۴۳-۷-۳)$$

این رابطه همان شرط بهنجارش برای $\langle j_1 j_2; jm |$ است.

برخی از نویسندگان از نمادگذاری متفاوتی برای ضرایب کلبش-گوردن استفاده می‌کنند. گاهی به جای $\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle$ می‌بینیم که از $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle$ ، $C(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m)$ ، $C_{j_1 j_2}(jm; m_1 m_2)$ و غیره استفاده شده است. همچنین می‌توان این ضرایب را برحسب نماد ویگنر-3 نوشت که در بعضی از مقالات این طرز نوشتن

$$\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle = (-1)^{j_1 - j_2 + m} \sqrt{2j+1} \begin{pmatrix} j_1 j_2 j \\ m_1 m_2 - m \end{pmatrix} \quad (۴۴-۷-۳)$$

یافت می‌شود.

روابط بازگشتی ضرایب کلبش-گوردن*

با j_1 ، j_2 و j ثابت، ضرایب با m_1 و m_2 مختلف، با روابط بازگشتی به یکدیگر مرتبطند. از رابطه‌ی زیر شروع می‌کنیم:

$$J_{\pm} |j_1 j_2; jm\rangle = (J_{1\pm} + J_{2\pm}) \sum_{m_1 m_2} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle \quad (۴۵-۷-۳)$$

با استفاده از (۳-۵-۳۹) و (۳-۵-۴۰) به‌دست می‌آوریم (با $m_1 \rightarrow m'_1$ و $m_2 \rightarrow m'_2$)

* جزئیات بیشتر در مورد ضرایب کلبش-گوردن و ضرایب راخا، بازجفت‌شدگی و نظایر آن‌ها برای نمونه در کتاب آ.آ.آرادموندس ۱۹۶۰ آمده است.

$$\begin{aligned} & \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} |j_1 j_2; j, m \pm 1\rangle \\ &= \sum_{m'_1 m'_2} \left(\sqrt{(j_1 \mp m'_1)(j_1 \pm m'_1 + 1)} |j_1 j_2; m'_1 \pm 1, m'_2\rangle \right. \\ & \quad \left. + \sqrt{(j_2 \mp m'_2)(j_2 \pm m'_2 + 1)} |j_1 j_2; m'_1, m'_2 \pm 1\rangle \right) \\ & \times \langle j_1 j_2; m'_1 m'_2 | j_1 j_2; jm \rangle \end{aligned} \quad (۴۶-۷-۳)$$

مرحله‌ی بعدی، ضرب از سمت چپ در $\langle j_1 j_2; m_1 m_2 |$ و استفاده از شرط تعامد است. در نتیجه این عمل، تنها سهم غیرصفر در طرف راست برای جمله‌ی اول وقتی است که

$$m_1 = m'_1 \pm 1, \quad m_2 = m'_2 \quad (۴۷-۷-۳)$$

است و برای جمله‌ی دوم وقتی است که

$$m_1 = m'_1, \quad m_2 = m'_2 \pm 1 \quad (۴۸-۷-۳)$$

باشد. با این روش روابط بازگشتی مورد نظر را به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} & \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j, m \pm 1\rangle \\ &= \sqrt{(j_1 \mp m_1 + 1)(j_1 \pm m_1)} \langle j_1 j_2; m_1 \mp 1, m_2 | j_1 j_2; jm \rangle \\ & \quad + \sqrt{(j_2 \mp m_2 + 1)(j_2 \pm m_2)} \langle j_1 j_2; m_1, m_2 \mp 1 | j_1 j_2; jm \rangle \end{aligned} \quad (۴۹-۷-۳)$$

از آن‌جا که عملگرهای J_{\pm} مقادیر m را تغییر می‌دهند، توجه به این نکته حائز اهمیت است که شرط غیرصفر بودن (۳-۷-۳) برای ضرایب کلبش-گوردن به رابطه‌ی زیر می‌انجامد (البته موقعی که بر را بر (۴۹-۷-۳) اثر کند):

$$m_1 + m_2 = m \pm 1 \quad (۵۰-۷-۳)$$

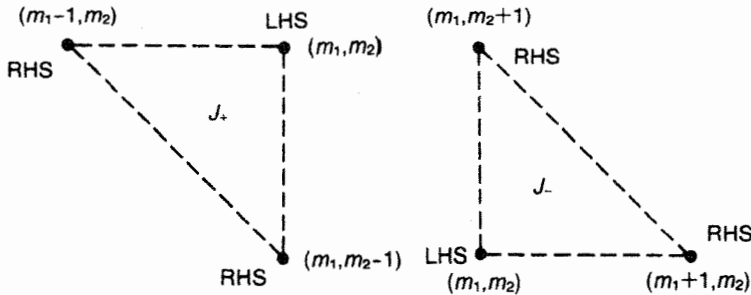
با نگاه به رابطه‌ی (۴۹-۷-۳) در صفحه‌ی $m_1 m_2$ به اهمیت رابطه‌ی بازگشتی پی می‌بریم. همان‌طور که در شکل ۳-۵ الف نشان داده شده است رابطه‌ی بازگشتی J_+ (علامت بالا) به ما می‌گوید که ضریب مربوط به (m_1, m_2) به ضریب‌های $(m_1 - 1, m_2)$ و $(m_1, m_2 - 1)$ وابسته است. به همین صورت رابطه‌ی بازگشتی J_- (علامت پایین) سه ضریب را با m_1 و m_2 مشخص، همانند شکل ۳-۵ ب به هم مرتبط می‌سازد.

رابطه‌ی بازگشتی (۴۹-۷-۳) به همراه شرط بهنجارش (۳-۷-۴) غالباً ضرایب کلبش-گوردن را به طوری تقریباً یکتا مشخص می‌کند (می‌گوییم تقریباً یکتا چون هنوز قراردادمان برای تعیین علامت

مشخص نشده است). روشی که پی خواهیم گرفت به این صورت است: بار دیگر به صفحه‌ی $m_1 m_2$ با j_1 ، j_2 و j مشخص بازمی‌گردیم و حدود مجازمان را رسم می‌کنیم. این حدود با

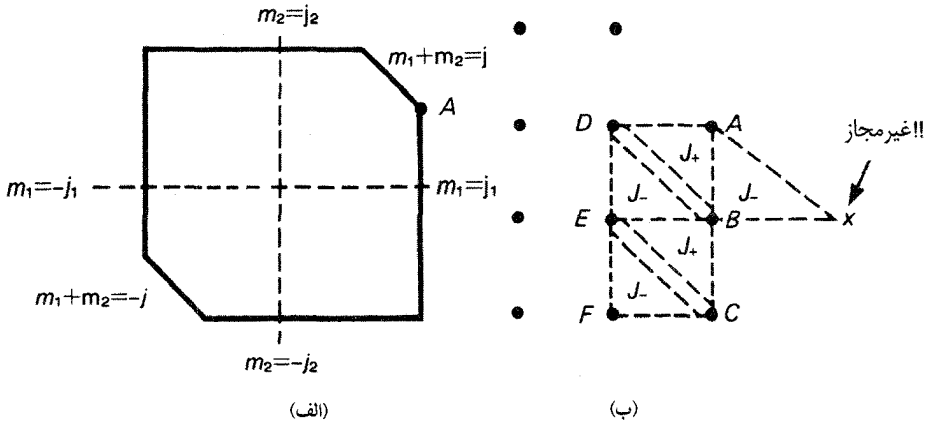
$$|m_1| \leq j_1, \quad |m_2| \leq j_2, \quad -j \leq m_1 + m_2 \leq j \quad (۵۱-۷-۳)$$

مشخص می‌شوند.



شکل ۳-۵: صفحه‌ی $m_1 m_2$ ضرایب کلیش-گوردن را نشان می‌دهد. ضرایب با رابطه‌ی بازگشتی (۴۹-۷-۳) به هم مربوطند.

شکل ۳-۵ الف را ببینید. از گوشه سمت راست بالا آغاز کرده و آن را با A مشخص می‌کنیم. از آن جا که نقطه‌ی شروع ما در نزدیکی A است. شکل دقیق‌تر در ۳-۶ ب نشان داده شده است. رابطه‌ی بازگشتی J_- (۴۹-۷-۳) (با علامت پایین) را با متناظر گرفتن $(m_1, m_2 + 1)$ با A به کار می‌بریم. حال مشاهده می‌شود که رابطه‌ی بازگشتی A را تنها به B وصل می‌کند. چون نقطه‌ی متناظر با $(m_1 + 1, m_2)$ به خاطر شرط $m_1 \leq j_1$ غیرمجاز است. به عنوان یک نتیجه می‌توانیم ضریب کلیش-گوردن B را برحسب ضریب A بنویسیم. سپس سه ضلعی J_+ را با A ، B و D تشکیل می‌دهیم. این کار ما را قادر می‌سازد تا ضریب D را برحسب ضریب A مشخص کنیم. به این ترتیب می‌توانیم کار را ادامه دهیم. با دانستن B و D می‌توان E را به دست آورد، با داشتن B و E ، مقدار C حاصل می‌شود و به همین ترتیب با پشتکار کافی می‌توان ضریب کلیش-گوردن را برای هر نقطه، وقتی که از نقطه‌ی A آغاز کرده باشیم، به دست آوریم. برای بهنجارش کلی از (۴۳-۷-۳) استفاده می‌کنیم. علامت کلی نهایی نیز بنا به قرارداد ثابت نگه داشته می‌شود (مثال زیر را ببینید):



شکل ۳-۶: استفاده از رابطه‌ی بازگشتی برای به‌دست آوردن ضرایب کلبش-گوردن

به‌عنوان یک مثال کاربردی مهم، موردی را در نظر می‌گیریم که در آن تکانه‌ی زاویه‌ای مداری و اسپین یک ذره با اسپین $\frac{1}{2}$ با هم جمع می‌شوند داریم:

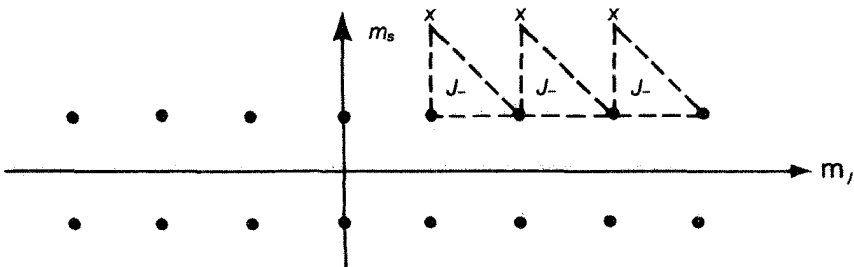
$$j_1 = l \text{ (integer), } m_1 = m_l,$$

$$j_2 = s = \frac{1}{2}, \quad m_2 = m_s = \pm \frac{1}{2} \quad (۵۲-۷-۳)$$

مقادیر مجاز j با رابطه‌های زیر مشخص می‌شوند:

$$j = l \pm \frac{1}{2}, \quad l > 0; \quad j = \frac{1}{2}, \quad l = 0 \quad (۵۳-۷-۳)$$

بنابراین برای هر l دو مقدار ممکن j وجود دارد. برای مثال برای $l = 1$ (حالت p) در نمادگذاری طیف‌سنجی، $p_{3/2}$ و $p_{1/2}$ موجودند که شاخص پایین نشان‌دهنده‌ی j است. این مسأله به‌ویژه در صفحه‌ی $m_1 m_2$ یا بهتر بگوییم در صفحه‌ی $m_l m_s$ ساده است. نقاط مجاز دو سطر را تشکیل می‌دهند. سطر بالایی مربوط به $m_s = \frac{1}{2}$ است و سطر پایینی به $m_s = -\frac{1}{2}$ مربوط است.



شکل ۷-۳: روابط بازگشتی مورد استفاده برای به‌دست آوردن ضرایب کلبش-گوردن برای $j_1 = 1$ و $j_2 = 1$

شکل ۳-۷ را ببینید. به طور ویژه مورد $z = l + \frac{1}{2}$ را بررسی می‌کنیم. از آنجا که m_s نمی‌تواند از $\frac{1}{2}$ بیشتر شود، می‌توانیم طوری از رابطه‌ی بازگشتی J_- استفاده کنیم که همواره در سطر بالا بمانیم ($m_2 = m_s = \frac{1}{2}$) در حالی که مقدار m_l هر بار که ما یک سه ضلعی جدید J_- را در نظر می‌گیریم به اندازه‌ی یک واحد تغییر می‌کند. با حذف $j_1 = 1$ و $j_1 = 1/2$ در نوشتن ضرایب کلبش-گوردن، از (۳-۷-۴۹) (علامت پایینی) به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} & \sqrt{(l + \frac{1}{2} + m + 1)(l + \frac{1}{2} - m)} \langle m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, m \rangle \\ &= \sqrt{(l + m + \frac{1}{2})(l - m + \frac{1}{2})} \langle m + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, m + 1 \rangle \end{aligned} \quad (۵۴-۷-۳)$$

که در آن از

$$m_1 = m_l = m - \frac{1}{2}, \quad m_2 = m_s = \frac{1}{2} \quad (۵۵-۷-۳)$$

استفاده کرده‌ایم. به این صورت می‌توانیم به اندازه‌ی یک واحد و در جهت افقی حرکت کنیم:

$$\begin{aligned} \left\langle m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2}, m \right\rangle &= \sqrt{\frac{l + m + \frac{1}{2}}{l + m + \frac{3}{2}}} \left\langle m + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2}, m + 1 \right\rangle \\ & \quad (۵۶-۷-۳) \end{aligned}$$

می‌توانیم $\langle m + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, m + 1 \rangle$ را بر حسب $\langle m + \frac{3}{2}, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, m + 2 \rangle$ بنویسیم و به همین ترتیب واضح است که این روند آنقدر ادامه پیدا می‌کند تا در m_l بیشینه مقدار ممکن گردد:

$$\begin{aligned} \left\langle m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2}, m \right\rangle &= \sqrt{\frac{l + m + \frac{1}{2}}{l + m + \frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{l + m + \frac{3}{2}}{l + m + \frac{5}{2}}} \left\langle m + \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2}, m + 2 \right\rangle \\ &= \sqrt{\frac{l + m + \frac{1}{2}}{l + m + \frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{l + m + \frac{3}{2}}{l + m + \frac{5}{2}}} \sqrt{\frac{l + m + \frac{5}{2}}{l + m + \frac{7}{2}}} \\ &\quad \times \left\langle m + \frac{5}{2}, \frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2}, m + 3 \right\rangle \\ &\quad \vdots \\ &= \sqrt{\frac{l + m + \frac{1}{2}}{2l + 1}} \left\langle l, \frac{1}{2} \middle| l + \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2} \right\rangle \end{aligned} \quad (۵۷-۷-۳)$$

آرایی را برای تکانه زاویه‌ای طوری در نظر می‌گیریم که m_l و m_s هر دو بیشینه هستند یعنی به ترتیب برابر با l و $\frac{1}{2}$ باشند. m کل $m = m_l + m_s$ برابر است با $l + \frac{1}{2}$ ، که تنها برای $z = l + \frac{1}{2}$ ممکن است و برای $z = l - \frac{1}{2}$ امکان ندارد. بنابراین، تا حد یک عامل فاز، کت $\langle m_l = l, m_s = \frac{1}{2} \rangle$ با

$|j = l + \frac{1}{2}, m = l + \frac{1}{2}\rangle$ بنا به قرارداد عامل فاز را حقیقی و مثبت در نظر می‌گیریم. با این انتخاب داریم:

$$\langle l, \frac{1}{2} | l + \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2} \rangle = 1 \quad (58-7-3)$$

با بازگشت به (57-7-3) سرانجام به دست می‌آوریم:

$$\left\langle m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| l + \frac{1}{2}, m \right. \right\rangle = \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}} \quad (59-7-3)$$

اما این تنها یک چهارم ماجراست. هنوز باید مقدار علامت‌های سؤال در رابطه‌ی زیر مشخص شوند:

$$\begin{aligned} \left| j = l + \frac{1}{2}, m \right\rangle &= \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}} \left| m_l = m - \frac{1}{2}, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle \\ &+ ? \left| m_l = m + \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2} \right\rangle, \\ \left| j = l - \frac{1}{2}, m \right\rangle &= ? \left| m_l = m - \frac{1}{2}, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle + ? \left| m_l = m + \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2} \right\rangle \end{aligned} \quad (60-7-3)$$

به‌خاطر تعامد، انتظار می‌رود که ماتریس تبدیل با m ثابت؛ از پایه (m_l, m_s) به پایه (j, m) شکل زیر را داشته باشد:

$$\begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \quad (61-7-3)$$

مقایسه با (60-7-3) نشان می‌دهد که $\cos \alpha$ خود (59-7-3) است. بنابراین می‌توانیم $\sin \alpha$ را تا حد دقت یک علامت به شکل زیر مشخص کنیم:

$$\sin^2 \alpha = 1 - \frac{(l+m+\frac{1}{2})}{(2l+1)} = \frac{(l-m+\frac{1}{2})}{(2l+1)} \quad (62-7-3)$$

اکنون ادعا می‌کنیم که $\langle m_l = m + \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2} | j = l + \frac{1}{2}, m \rangle$ باید مثبت باشد چون تمام حالت‌های $j = l + \frac{1}{2}$ با اعمال پی در پی عملگر J_- بر $| j = l + \frac{1}{2}, m = l + \frac{1}{2} \rangle$ به دست می‌آیند و بنا بر قرارداد آرایه‌های ماتریس J_- همواره مثبت هستند. بنابراین ماتریس گذار 2×2 در رابطه‌ی (61-7-3) تنها باید برابر با:

$$\begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}} & \sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}} \\ -\sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}} & \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}} \end{pmatrix} \quad (۶۳-۷-۳)$$

باشد.

توابع زاویه‌ای اسپین دومؤلفه‌ای را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$\begin{aligned} \psi_{j=l\pm 1/2, m} &= \pm \sqrt{\frac{l\pm m+\frac{1}{2}}{2l+1}} Y_l^{m-1/2}(\theta, \phi) \chi_+ \\ &+ \sqrt{\frac{l\mp m+\frac{1}{2}}{2l+1}} Y_l^{m+1/2}(\theta, \phi) \chi_- \\ &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \pm \sqrt{l\pm m+\frac{1}{2}} Y_l^{m-1/2}(\theta, \phi) \\ \sqrt{l\mp m+\frac{1}{2}} Y_l^{m+1/2}(\theta, \phi) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (۶۴-۷-۳)$$

با توجه به ساختار این توابع آن‌ها را ویژه توابع همزمان \mathbf{J}^2 ، \mathbf{S}^2 ، \mathbf{L}^2 و \mathbf{J}_z می‌دانیم. همچنین این توابع، ویژه توابع $\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$ نیز هستند. اما $\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$ به شکل زیر است:

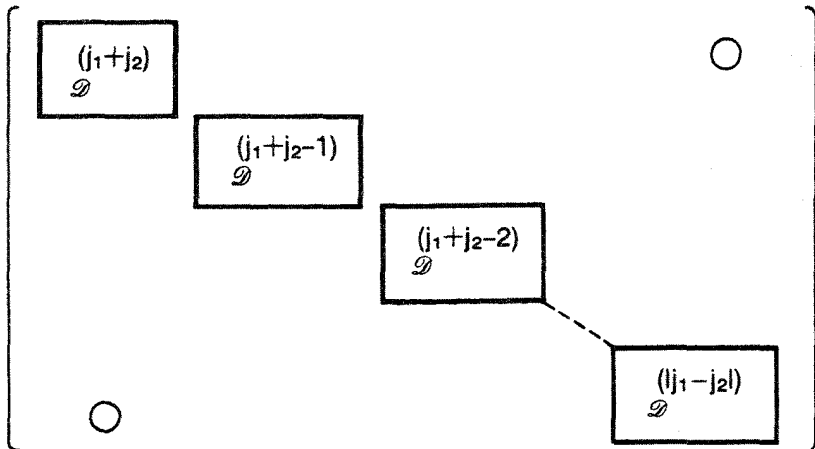
$$\mathbf{L}\cdot\mathbf{S} = \left(\frac{1}{2}\right)(\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2) \quad (۶۵-۷-۳)$$

و مستقل از عملگرهای قبل نیست. ویژه مقادیر را می‌توان به سادگی به شکل زیر به دست آورد:

$$\left(\frac{\hbar^2}{2}\right) \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] = \begin{cases} \frac{l\hbar^2}{2} & \text{برای } j = l + \frac{1}{2} \\ -\frac{(l+1)\hbar^2}{2} & \text{برای } j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \quad (۶۶-۷-۳)$$

ضرایب کلبش - گوردن و ماتریس چرخش

می‌توان بحث تکانه‌ی زاویه‌ای را از نقطه نظر ماتریس چرخش مورد بررسی قرارداد. عملگر چرخش $\mathcal{D}^{(j_1)}(R)$ را در فضای کت، که با ویژه کت‌های تکانه‌ی زاویه‌ای و ویژه مقادیر j_1 تعیین می‌گردد، در نظر بگیرد. $\mathcal{D}^{(j_2)}(R)$ را نیز به همین صورت فرض کنید. ضرب $\mathcal{D}^{(j_1)} \otimes \mathcal{D}^{(j_2)}$ کاهش یافتنی است. یعنی پس از انتخاب مناسب کت‌های پایه، نمایش ماتریسی آن را می‌توان به شکل صفحه‌ی بعد نوشت:



(۶۷-۷-۳)

با نماد گذاری مرسوم در نظریه‌ی گروه، این ضرب به شکل زیر نوشته می شود:

$$\mathcal{D}^{(j_1)} \otimes \mathcal{D}^{(j_2)} = \mathcal{D}^{(j_1+j_2)} \oplus \mathcal{D}^{(j_1+j_2-1)} \oplus \dots \oplus \mathcal{D}^{(|j_1-j_2|)} \quad (۶۸-۷-۳)$$

بسط مهمی برحسب آرایه‌های ماتریس چرخش وجود دارد که به سری کلبش-گوردن معروف است:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{m_1 m_1'}^{(j_1)}(R) \mathcal{D}_{m_2 m_2'}^{(j_2)}(R) &= \sum_j \sum_m \sum_{m'} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle \\ &\times \langle j_1 j_2; m_1' m_2' | j_1 j_2; jm' \rangle \mathcal{D}_{mm'}^{(j)}(R) \end{aligned} \quad (۶۹-۷-۳)$$

که جمع روی j از $|j_1 - j_2|$ تا $j_1 + j_2$ است. اثبات این رابطه در ادامه می آید. ابتدا توجه کنید که سمت چپ رابطه‌ی (۶۹-۷-۳) برابر است با:

$$\begin{aligned} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | \mathcal{D}(R) | j_1 j_2; m_1' m_2' \rangle &= \langle j_1 m_1 | \mathcal{D}(R) | j_1 m_1' \rangle \langle j_2 m_2 | \mathcal{D}(R) | j_2 m_2' \rangle \\ &= \mathcal{D}_{m_1 m_1'}^{(j_1)}(R) \mathcal{D}_{m_2 m_2'}^{(j_2)}(R) \end{aligned} \quad (۷۰-۷-۳)$$

اما همین آرایه‌های ماتریسی با وارد کردن یک مجموعه‌ی کامل از حالت‌ها در پایه‌ی (j, m) قابل محاسبه است. بنابراین:

$$\begin{aligned}
& \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | \mathcal{D}(R) | j_1 j_2; m'_1 m'_2 \rangle \\
&= \sum_j \sum_m \sum_{j'} \sum_{m'} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle \langle j_1 j_2; jm | \mathcal{D}(R) | j_1 j_2; j'm' \rangle \\
&\quad \times \langle j_1 j_2; j'm' | j_1 j_2; m'_1 m'_2 \rangle \\
&= \sum_j \sum_m \sum_{j'} \sum_{m'} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle \mathcal{D}_{mm'}^{(j)}(R) \delta_{jj'} \\
&\quad \times \langle j_1 j_2; m'_1 m'_2 | j_1 j_2; j'm' \rangle,
\end{aligned} \tag{۷۱-۷-۳}$$

که این دقیقاً شبیه به سمت راست (۶۹-۷-۳) است.

به عنوان کاربردی جالب از (۶۹-۷-۳)، برای انتگرالی که شامل هماهنگ‌های کروی است، فرمول مهمی را به دست می‌آوریم. ابتدا به یاد می‌آوریم که ارتباط بین $\mathcal{D}_{m0}^{(l)}$ و Y_l^{m*} با (۵۲-۶-۳) به دست می‌آید. با قراردادن $j_1 \rightarrow l_1$ و $j_2 \rightarrow l_2$ و $m'_1 \rightarrow 0$ و $m'_2 \rightarrow 0$ (بنابراین $m' \rightarrow 0$) در (۶۹-۷-۳) پس از مزدوج مختلط گرفتن به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned}
Y_{l_1}^{m_1}(\theta, \phi) Y_{l_2}^{m_2}(\theta, \phi) &= \frac{\sqrt{(2l_1+1)(2l_2+1)}}{4\pi} \sum_{l'} \sum_{m'} \langle l_1 l_2; m_1 m_2 | l_1 l_2; l'm' \rangle \\
&\quad \times \langle l_1 l_2; 00 | l_1 l_2; l'0 \rangle \sqrt{\frac{4\pi}{2l'+1}} Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi)
\end{aligned} \tag{۷۲-۷-۳}$$

دو طرف رابطه‌ی بالا را در $Y_l^{m*}(\theta, \phi)$ ضرب می‌کنیم و روی زوایای فضایی انتگرال می‌گیریم. به خاطر خاصیت تعامد هماهنگ‌های کروی جمع‌ها از بین می‌روند و به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned}
& \int d\Omega Y_l^{m*}(\theta, \phi) Y_{l_1}^{m_1}(\theta, \phi) Y_{l_2}^{m_2}(\theta, \phi) \\
&= \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l+1)}} \langle l_1 l_2; 00 | l_1 l_2; l0 \rangle \langle l_1 l_2; m_1 m_2 | l_1 l_2; lm \rangle
\end{aligned} \tag{۷۳-۷-۳}$$

ضریب جذری و ضریب کلبش-گوردن، مستقل از امتدادها هستند. یعنی مستقل از m_1 و m_2 می‌باشند. دومین ضریب کلبش-گوردن برای جمع l_1 و l_2 در به دست آوردن l کل مناسب است. معادله‌ی (۷۳-۷-۳) مورد خاصی از قضیه‌ی ویگنر-اکارت است که در بخش ۳-۱۰ به آن پرداختیم. این فرمول در محاسبه‌ی ضرب آرایه‌های ماتریسی در طیف‌سنجی مولکولی و اتمی بسیار مفید است.

۸.۳ مدل نوسان گر شوینگر برای تکانه‌ی زاویه‌ای

تکانه‌ی زاویه‌ای و نوسان گرهای جفت نشده

رابطه‌ی جالبی بین جبر تکانه‌ی زاویه‌ای و جبر دو نوسان گر مستقل (یعنی جفت نشده) وجود دارد که توسط جی. شوینگر به دست آمد [نظریه‌ی کوانتومی تکانه‌ی زاویه‌ای نوشته ال. سی. بیدنهارن و اچ. وان دام. انتشارات press (۱۹۶۵) و صفحه‌ی ۲۲۹ را ببینید]. دو نوسان گر هماهنگ ساده که به آن‌ها نوع مثبت و نوع منفی می‌گوییم را در نظر می‌گیریم. عملگرهای فنا و خلق a_+ و a_+ را برای نوسان گر مثبت و عملگرهای a_- و a_-^\dagger را برای نوسان گر منفی مشخص می‌کنیم. همچنین نوسان گر تعداد N_+ و N_- را به شکل زیر تعریف می‌کنیم:

$$N_+ \equiv a_+^\dagger a_+, \quad N_- \equiv a_-^\dagger a_- \quad (1-8-3)$$

روابط معمولی جابه‌جایی بین a و a^\dagger نوسان گرهای هم نوع برقرار است (بخش ۲-۳ را ببینید):

$$[a_+, a_+^\dagger] = 1, \quad [a_-, a_-^\dagger] = 1 \quad (2-8-3 \text{ الف})$$

$$[N_+, a_+] = -a_+, \quad [N_-, a_-] = -a_- \quad (2-8-3 \text{ ب})$$

$$[N_+, a_+^\dagger] = a_+^\dagger, \quad [N_-, a_-^\dagger] = a_-^\dagger \quad (2-8-3 \text{ ج})$$

در عین حال فرض می‌کنیم که روابط جابه‌جایی بین نوسان گرهای متفاوت برابر صفر است:

$$[a_+, a_-^\dagger] = [a_-, a_+^\dagger] = 0 \quad (3-8-3)$$

و به همین صورت این گفته به آن معنی است که دو نوسان گر جفت نشده هستند.

از آن جا که N_+ و N_- با توجه به (۳-۸-۳) جابه‌جا می‌شوند می‌توانیم ویژه کت‌های همزمان N_+ و N_- را به ترتیب با ویژه مقادیر n_+ و n_- نشان دهیم. بنابراین روابط ویژه مقدراری زیر برای N_\pm برقرار است:

$$N_+ |n_+, n_-\rangle = n_+ |n_+, n_-\rangle, \quad N_- |n_+, n_-\rangle = n_- |n_+, n_-\rangle \quad (4-8-3)$$

کاملاً شبیه به (۲-۳-۱۶) و (۲-۳-۱۷)، عملگرهای فنا و a_\pm^\dagger و a_\pm روی $|n_+, n_-\rangle$ به شکل زیر عمل می‌کنند:

$$a_+^\dagger |n_+, n_-\rangle = \sqrt{n_+ + 1} |n_+ + 1, n_-\rangle, \quad a_-^\dagger |n_+, n_-\rangle = \sqrt{n_- + 1} |n_+, n_- + 1\rangle \quad (5-8-3 \text{ الف})$$

$$a_+ |n_+, n_-\rangle = \sqrt{n_+} |n_+ - 1, n_-\rangle, \quad a_- |n_+, n_-\rangle = \sqrt{n_-} |n_+, n_- - 1\rangle \quad (5-8-3 \text{ ب})$$

می‌توانیم کلی‌ترین ویژه‌کت N_+ و N_- را با اعمال پی در پی a_+^\dagger و a_-^\dagger بر کت خلاء که به شکل زیر تعریف می‌شود به دست آوریم:

$$a_+ |0, 0\rangle = 0, \quad a_- |0, 0\rangle = 0 \quad (6-8-3)$$

به این ترتیب داریم:

$$|n_+, n_-\rangle = \frac{(a_+^\dagger)^{n_+} (a_-^\dagger)^{n_-}}{\sqrt{n_+!} \sqrt{n_-!}} |0, 0\rangle \quad (7-8-3)$$

سپس تعریف می‌کنیم:

$$J_+ \equiv \hbar a_+^\dagger a_-, \quad J_- \equiv \hbar a_-^\dagger a_+ \quad (8-8-3 \text{ الف})$$

$$J_z \equiv \left(\frac{\hbar}{2}\right) (a_+^\dagger a_+ - a_-^\dagger a_-) = \left(\frac{\hbar}{2}\right) (N_+ - N_-) \quad (8-8-3 \text{ ب})$$

به سرعت می‌توان به دست آورد که این عملگرها در شکل معمولی روابط جابه‌جایی تکانه زاویه‌ای صدق می‌کنند:

$$[J_z, J_\pm] = \pm \hbar J_\pm \quad (9-8-3 \text{ الف})$$

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z \quad (9-8-3 \text{ ب})$$

برای مثال، (9-8-3 ب) را به شکل زیر محاسبه می‌کنیم:

$$\begin{aligned} \hbar^2 [a_+^\dagger a_-, a_-^\dagger a_+] &= \hbar^2 a_+^\dagger a_- a_-^\dagger a_+ - \hbar^2 a_-^\dagger a_+ a_+^\dagger a_- \\ &= \hbar^2 a_+^\dagger (a_-^\dagger a_- + 1) a_+ - \hbar^2 a_-^\dagger (a_+^\dagger a_+ + 1) a_- \\ &= \hbar^2 (a_+^\dagger a_+ - a_-^\dagger a_-) = 2\hbar J_z \end{aligned} \quad (10-8-3)$$

N مجموع را به شکل زیر تعریف می‌کنیم:

$$N \equiv N_+ + N_- = a_+^\dagger a_+ + a_-^\dagger a_- \quad (11-8-3)$$

همچنین می‌توانیم اثبات کنیم که:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2 &\equiv J_z^2 + \left(\frac{1}{2}\right) (J_+ J_- + J_- J_+) \\ &= \left(\frac{\hbar^2}{2}\right) N \left(\frac{N}{2} + 1\right) \end{aligned} \quad (12-8-3)$$

که به عنوان یک تمرین رها می‌شود.

تعبیر فیزیکی چیزهایی که گفتیم چیست؟ اسپین بالا ($m = \frac{1}{2}$) را به هر حالت کوانتومی نوسان‌گر نوع مثبت و اسپین پایین ($m = -\frac{1}{2}$) را به هر حالت کوانتومی نوسان‌گر نوع منفی نسبت می‌دهیم. اگر دوست داشته باشید می‌توانید تصور کنید که یک ذره با اسپین $\frac{1}{2}$ بالا (یا پایین) با هر واحد کوانتومی نوسان‌گر نوع مثبت (یا منفی) متناظر است. ویژه مقادیر n_+ و n_- دقیقاً برابر با تعداد اسپین‌های بالا یا پایین است. کار J_+ آن است که مؤلفه‌ی z تکانه‌ی زاویه‌ای اسپین پایین را به اندازه $-\hbar/2$ از بین ببرد و مؤلفه‌ی z تکانه‌ی زاویه‌ای اسپین بالا را به اندازه‌ی $+\hbar/2$ بسازد. به این ترتیب مؤلفه‌ی z تکانه‌ی زاویه‌ای به اندازه‌ی \hbar افزایش می‌یابد. به همین صورت J_- یک واحد از اسپین بالا را از بین می‌برد و یک واحد برای اسپین پایین خلق می‌کند. بنابراین مؤلفه‌ی z تکانه‌ی زاویه‌ای را به اندازه‌ی \hbar کاهش می‌دهد. همین طور عملگر J_z برابر با ضرب $\hbar/2$ در اختلاف بین n_+ و n_- است که این برابر با مؤلفه‌ی z تکانه‌ی زاویه‌ای کل است. با توجه به (۳-۸-۵) به سادگی می‌توان دید که J_\pm و J_z چطور روی $|n_+, n_-\rangle$ عمل می‌کنند:

$$J_+ |n_+, n_-\rangle = \hbar a_+^\dagger a_- |n_+, n_-\rangle = \sqrt{n_-(n_++1)} \hbar |n_++1, n_- - 1\rangle \quad (۳-۸-۱۳ \text{ الف})$$

$$J_- |n_+, n_-\rangle = \hbar a_-^\dagger a_+ |n_+, n_-\rangle = \sqrt{n_+(n_--1)} \hbar |n_+ - 1, n_- + 1\rangle \quad (۳-۸-۱۳ \text{ ب})$$

$$J_z |n_+, n_-\rangle = \left(\frac{\hbar}{2}\right)(N_+ - N_-) |n_+, n_-\rangle = \left(\frac{1}{2}\right)(n_+ - n_-) \hbar |n_+, n_-\rangle \quad (۳-۸-۱۳ \text{ ج})$$

دقت کنید که در تمام این عملیات جمع $n_+ n_-$ که متناظر با تعداد کل ذرات با اسپین $\frac{1}{2}$ است، بدون تغییر باقی می‌ماند.

اکنون می‌بینیم که (۳-۸-۱۳ الف)، (۳-۸-۱۳ ب) و (۳-۸-۱۳ ج) منجر به رابطه‌ی آشنایی برای J_\pm و J_z می‌شوند که در بخش ۳-۵ آن‌ها را به دست آوردیم. برای تحقق این مطلب باید

$$n_+ \rightarrow j + m, \quad n_- \rightarrow j - m \quad (۳-۸-۱۴)$$

و جمله‌ی رادیکالی در (۳-۸-۱۳ الف) و (۳-۸-۱۳ ب) به صورت زیر تغییر یابد:

$$\begin{aligned} \sqrt{n_-(n_++1)} &\rightarrow \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \\ \sqrt{n_+(n_--1)} &\rightarrow \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \end{aligned} \quad (۳-۸-۱۵)$$

این‌ها دقیقاً همان جملات رادیکالی هستند که در $(۳-۵-۳۹)$ و $(۳-۵-۴۱)$ ظاهر شده‌اند. همچنین توجه کنید که ویژه مقدار عملگر J^2 که به شکل $(۳-۸-۱۲)$ تعریف می‌شود به صورت زیر تغییر می‌کند:

$$\left(\frac{\hbar^2}{2}\right)(n_+ + n_-) \left[\frac{(n_+ + n_-)}{2} + 1 \right] \rightarrow \hbar^2 j(j+1) \quad (۳-۸-۱۶)$$

شاید تمام روابطی که به دست آوردیم تازگی چندانی نداشته باشند. چون پیش‌تر عملگرهای J_{\pm} و J^2 را برای تشکیل عملگرهای نوسان‌گر ساخته‌ایم که در روابط جابه‌جایی معمولی تکانه‌ی زاویه‌ای صدق می‌کردند. اما یافتن یک ارتباط بی‌پرده بین آرایه‌های ماتریسی نوسان‌گر و آرایه‌های ماتریسی تکانه‌ی زاویه‌ای دارای اهمیت آموزشی است. به هر حال طبیعی است که از:

$$j \equiv \frac{(n_+ + n_-)}{2}, \quad m \equiv \frac{(n_+ - n_-)}{2} \quad (۳-۸-۱۷)$$

به جای n_+ و n_- برای مشخص کردن ویژه‌کت‌های همزمان J^2 و J_z استفاده کنیم. مطابق $(۳-۸-۱۱۳)$ الف) با عمل J_+ مقدار n_+ به n_- تغییر می‌یابد و n_- به $n_- - 1$ می‌رسد که یعنی j بدون تغییر خواهد بود و m به $m + 1$ خواهد رسید. به همین صورت می‌بینیم که عملگر J_- که n_+ را به $n_+ + 1$ و n_- را به $n_- + 1$ تغییر می‌داد، بدون تغییر دادن j یک واحد از m می‌کاهد. حال می‌توانیم مطابق $(۳-۸-۷)$ برای کلی‌ترین ویژه‌کت N_+ و N_- بنویسیم:

$$|j, m\rangle = \frac{(a_+^\dagger)^{j+m} (a_-^\dagger)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}} |0\rangle \quad (۳-۸-۱۸)$$

که در آن از $|0\rangle$ به عنوان کت تهی استفاده می‌کنیم. این کت را قبل‌تر با $|0, 0\rangle$ نشان داده بودیم. حالت خاص $(۳-۸-۱۸)$ جذاب است. بگذارید تا $m = j$ باشد. این از نظر فیزیکی به این معنا است که J_z بزرگ‌ترین مقدار ممکن j را بگیرد. داریم:

$$|j, j\rangle = \frac{(a_+^\dagger)^{2j}}{\sqrt{(2j)!}} |0\rangle \quad (۳-۸-۱۹)$$

این حالت را می‌توانیم به این صورت متصور شویم که $2j$ ذره با اسپین $\frac{1}{2}$ که همگی در جهت مثبت z است، داریم.

در مجموع توجه می‌کنیم که یک مورد پیچیده با j بزرگ را می‌توان طوری در نظر گرفت که از ذراتی با اسپین $\frac{1}{2}$ ساخته شده باشد. $m + j$ از این ذرات، اسپین بالا و $m - j$ باقیمانده اسپین پایین دارند. با اینکه به وضوح نمی‌توان موردی از تکانه‌ی زاویه‌ای j را به عنوان سیستم پیچیده‌ای از ذرات اسپین $\frac{1}{2}$ در نظر گرفت، اما این تصویر بسیار مناسب است. چیزی که می‌خواهیم بگوییم این است که؛ تا هنگامی که

خصوصیت تبدیل، تحت چرخش، ناوردا باقی بماند می‌توانیم نشان دهیم که موردی با تکانه زاویه‌ای J_z ، از سیستم مرکبی با J_z ذره با اسپین $\frac{1}{2}$ و به شکل (۳-۸-۱۸)، تشکیل می‌شود.

از نقطه نظر جمع تکانه‌ی زاویه‌ای که در بخش قبل آن را گسترش دادیم؛ می‌توانیم اسپین‌های J_z ذره با اسپین $\frac{1}{2}$ را برای به دست آوردن حالت‌هایی با تکانه‌ی زاویه‌ای $J_z - 1$ و $J_z - 2$ و به دست آوریم. به عنوان یک مثال ساده می‌توانیم برای به دست آوردن تکانه‌ی زاویه‌ای کل صفر، دو ذره با اسپین $\frac{1}{2}$ را با هم جمع کنیم. در طرح نوسان گر شوینگر وقتی که با J_z ذره با اسپین $\frac{1}{2}$ شروع می‌کنیم، تنها حالت‌هایی با تکانه‌ی زاویه‌ای J_z را به دست می‌آوریم. به زبان تقارنی جایگشتی که در فصل ۶ به آن پرداخته خواهد شد، در این روش تنها حالت‌های کاملاً متقارن ساخته خواهند شد. ذرات اولیه با اسپین $\frac{1}{2}$ در این جا عملاً بزون هستند. اگر مقصود ما، بدون پرسش در مورد اینکه چه حالت‌هایی در ابتدا ساخته شده‌اند، تنها آزمودن خواص حالت‌های مشخص شده با J_z و m ، تحت چرخش باشد، این روش کاملاً بسنده خواهد کرد.

ممکن است خواننده آشنا به ایزواسپین در فیزیک هسته‌ای و ذرات، توجه کرده باشد که آنچه ما در این جا انجام می‌دهیم منظر جدیدی در فرمول‌بندی ایزواسپین (یا اسپین ایزوتوپی) ایجاد می‌کند. عملگر J_+ که یک واحد از نوع منفی می‌کاهد و یک واحد برای نوع مثبت خلق می‌کند کاملاً شبیه عملگر نردبانی ایزو اسپین T_+ (گاهی آن را با I_+ نشان می‌دهند) است که یک نوترون (ایزواسپین پایین) را از بین می‌برد و یک پروتون (ایزواسپین بالا) می‌سازد. به این صورت مؤلفه‌ی Z ایزواسپین را یک واحد افزایش می‌دهد. به همین صورت J_z نظیر T_z است که به بیان ساده اختلاف بین تعداد پروتون‌ها و نوترون‌ها در هسته را مشخص می‌کند.

فرمول صریح برای ماتریس‌های چرخش

به روش بسیار ساده‌ای، طرح شوینگر را می‌توان برای استخراج فرمول جمع و جووری جهت ماتریس‌های چرخش به کار برد. این روش (نه دقیقاً این روش) نخستین بار توسط ای. پی. شوینگر مورد استفاده قرار گرفت. عملگر چرخش $\mathcal{D}(R)$ را، همان‌طور که در (۳-۸-۱۸) نوشته شده است، بر $|j, m\rangle$ اعمال می‌کنیم. در نمادگذاری زاویه‌ای اویلر تنها چرخش غیربدیهی، دومین چرخش حول محور Y است. بنابراین توجه خود را به:

$$\mathcal{D}(R) = \mathcal{D}(\alpha, \beta, \gamma)|_{\alpha=\gamma=0} = \exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right) \quad (۳-۸-۲۰)$$

سوق می دهیم. داریم:

$$\mathcal{D}(R)|j, m\rangle = \frac{[\mathcal{D}(R)a_+^\dagger \mathcal{D}^{-1}(R)]^{j+m} [\mathcal{D}(R)a_-^\dagger \mathcal{D}^{-1}(R)]^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}} \mathcal{D}(R)|0\rangle \quad (21-8-3)$$

اکنون با اثر $\mathcal{D}(R)$ بر $|0\rangle$ همان $|0\rangle$ حاصل می شود چون با توجه با (۳-۸-۶) در بسط نمایی (۳-۸-۲۰) تنها جمله ۱ سهم دارد. بنابراین:

$$\mathcal{D}(R)a_\pm^\dagger \mathcal{D}^{-1}(R) = \exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right) a_\pm^\dagger \exp\left(\frac{iJ_y\beta}{\hbar}\right) \quad (22-8-3)$$

بنابراین می توانیم از فرمول (۲-۳-۴۷) استفاده کنیم. قرار می دهیم:

$$G \rightarrow \frac{-J_y}{\hbar}, \quad \lambda \rightarrow \beta \quad (23-8-3)$$

در (۲-۳-۴۷) تشخیص می دهیم که روابط جابه جایی زیادی همچون روابط زیر را مد نظر قرار دهیم:

$$\begin{aligned} \left[\frac{-J_y}{\hbar}, a_+^\dagger\right] &= \left(\frac{1}{2i}\right)[a_-^\dagger a_+, a_+^\dagger] = \left(\frac{1}{2i}\right)a_-^\dagger \\ \left[\frac{-J_y}{\hbar}, \left[\frac{-J_y}{\hbar}, a_+^\dagger\right]\right] &= \left[\frac{-J_y}{\hbar}, \frac{a_-^\dagger}{2i}\right] = \left(\frac{1}{4}\right)a_+^\dagger \end{aligned} \quad (24-8-3)$$

و به همین صورت واضح است که همیشه a_+^\dagger یا a_-^\dagger را به دست می آوریم. با نگاه به تمام جملات داریم:

$$\mathcal{D}(R)a_+^\dagger \mathcal{D}^{-1}(R) = a_+^\dagger \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) + a_-^\dagger \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \quad (25-8-3)$$

به همین صورت

$$\mathcal{D}(R)a_-^\dagger \mathcal{D}^{-1}(R) = a_-^\dagger \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) - a_+^\dagger \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \quad (26-8-3)$$

این تابع در عمل هیجان انگیز نیست. پس از همه ی این گفته ها می دانیم که حالت اسپین بالا را می توان تحت تبدیل چرخشی حول محور Y به صورت زیر فرض کرد:

$$a_+^\dagger|0\rangle \rightarrow \cos\left(\frac{\beta}{2}\right)a_+^\dagger|0\rangle + \sin\left(\frac{\beta}{2}\right)a_-^\dagger|0\rangle \quad (27-8-3)$$

با قراردادن (۳-۸-۲۵) و (۳-۸-۲۶) در (۳-۸-۲۱) و با استفاده از بسط دوجمله‌ای

$$(x+y)^N = \sum_k \frac{N! x^{N-k} y^k}{(N-k)! k!} \quad (۳-۸-۲۸)$$

به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\alpha=0, \beta, \gamma=0|j, m) &= \sum_k \sum_l \frac{(j+m)!(j-m)!}{(j+m-k)! k! (j-m-l)! l!} \\ &\times \frac{[a_+^\dagger \cos(\beta/2)]^{j+m-k} [a_-^\dagger \sin(\beta/2)]^k}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}} \\ &\times [-a_+^\dagger \sin(\beta/2)]^{j-m-l} [a_-^\dagger \cos(\beta/2)]^l |0\rangle \end{aligned} \quad (۳-۸-۲۹)$$

می‌توانیم (۳-۸-۲۹) را با رابطه‌ی زیر مقایسه کنیم:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\alpha=0, \beta, \gamma=0|j, m) &= \sum_{m'} |j, m'\rangle d_{m'm}^{(j)}(\beta) \\ &= \sum_{m'} d_{m'm}^{(j)}(\beta) \frac{(a_+^\dagger)^{j+m'} (a_-^\dagger)^{j-m'}}{\sqrt{(j+m')!(j-m')!}} |0\rangle \end{aligned} \quad (۳-۸-۳۰)$$

با مساوی قرار دادن ضرایب توان‌های a_+^\dagger در (۳-۸-۲۹) و (۳-۸-۳۰) می‌توانیم شکل صریحی برای $d_{m'm}^{(j)}(\beta)$ به دست آوریم. به‌ویژه می‌خواهیم a_+^\dagger به توان $j+m'$ در (۳-۸-۳۰) را با a_+^\dagger به توان $2j-k-l$ مقایسه کنیم. بنابراین داریم:

$$l = j - k - m' \quad (۳-۸-۳۱)$$

ما در پی $d_{m'm}^{(j)}(\beta)$ با m' ثابت می‌گردیم. جمع روی k و جمع روی l در (۳-۸-۲۹) مستقل از یکدیگرند. با استفاده از رابطه‌ی سودمند (۳-۸-۳۱) می‌توانیم l را حذف کرده و آن را برحسب k بنویسیم. توجه می‌کنیم که وقتی (۳-۸-۳۱) در نظر گرفته شود، برای توان‌های a_-^\dagger به‌طور خودکار، a_-^\dagger به توان $j-m'$ در (۳-۸-۳۰) با a_-^\dagger به توان $k+1$ در (۳-۸-۲۹) برابر می‌شود. آخرین مرحله، تعیین معادلات توان‌های $\cos(\beta/2)$ ، $\sin(\beta/2)$ و (-1) است که به ترتیب برابرند با:

$$j + m - k + l = 2j - 2k + m - m' \quad (\text{الف } ۳۲-۸-۳)$$

$$k + j - m - l = 2k - m + m' \quad (\text{ب } ۳۲-۸-۳)$$

$$j - m - l = k - m + m' \quad (\text{ج } ۳۲-۸-۳)$$

که در این روابط از (۳-۸-۳۱) برای حذف l استفاده کرده‌ایم. به این ترتیب فرمول ویگنر را برای $d_{m'm}^{(j)}(\beta)$ به دست می‌آوریم:

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

(۳-۸-۳۳)

که در آن جمع روی k هایی انجام می‌شود که هیچ کدام از فاکتوریل‌های مخرج را منفی نکنند.

۹.۳ اندازه‌گیری همبستگی اسپین و نامساوی بل

همبستگی در حالت‌های اسپین یگانه

ساده‌ترین مثال جمع تکانه‌ی زاویه‌ای که در بخش ۳-۷ مورد بررسی قرار گرفت سیستم مرکبی، ساخته شده از ذراتی با اسپین $\frac{1}{2}$ بود. در این بخش از این سیستم برای شرح یکی از تعجب برانگیزترین نتایج در مکانیک کوانتومی استفاده می‌کنیم.

یک سیستم دو الکترونی در حالت اسپین یگانه را در نظر بگیرید. حالت اسپین یگانه، حالتی است که مجموع اسپین در آن برابر صفر است. قبلاً دیده‌ایم که این کت حالت را می‌توان به صورت زیر نوشت [۳-۷-۱۵] را ببینید:

$$|\text{اسپین یگانه}\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)(|\uparrow+\rangle - |\downarrow-\rangle)$$

(۳-۹-۱)

که در آن به صراحت کوانتش جهت مشخص شده است. به یاد می‌آوریم که $|\uparrow+\rangle$ به این معنی است که الکترون ۱ در حالت اسپین بالا و الکترون ۲ در حالت اسپین پایین است. به $|\downarrow-\rangle$ نیز می‌توان از چنین دیدی نگریست.

فرض کنید که یک اندازه‌گیری را روی مؤلفه‌ی اسپینی یک الکترون انجام می‌دهیم. واضح است که شانس بروز هر یک از حالت‌های پایین و بالا $50^\circ-50^\circ$ است چون سیستم مرکب ما با احتمالات یکسانی می‌تواند در $|\uparrow+\rangle$ یا $|\downarrow-\rangle$ باشد، اما اگر معین شود که یکی از اسپین‌ها در جهت بالا است، الکترون دیگر باید الزاماً حالت اسپین پایین را اتخاذ کند و برعکس. وقتی که مؤلفه‌ی اسپین الکترون ۱ در جهت بالا دیده شود دستگاه اندازه‌گیری، اولین جمله از (۳-۹-۱)، یعنی $|\uparrow+\rangle$ را اتخاذ کرده است.

اندازه‌گیری دیگر درست پس از اندازه‌گیری نخست روی الکترون ۲ نیز باید نشان دهد که کت حالت سیستم مرکب، $(-2; +2)$ است.

این مسأله از آن جهت مهم است که این نوع از همبستگی حتی وقتی که دو ذره بسیار از هم دور می‌شوند نیز برقرار است و حتی در موقعی که دیگر بر هم کنشی بین دو ذره انجام نمی‌شود تغییری در حالت‌های اسپین آن‌ها رخ نمی‌دهد. این دقیقاً شبیه به موردی است که در آن سیستمی با $J=0$ به‌طور خود به‌خود به دو ذره با اسپین $\frac{1}{2}$ تجزیه شود به‌طوری که این ذرات تکانه‌ی زاویه‌ای مدارای نسبی با هم نداشته باشند. چون پایستگی تکانه‌ی زاویه‌ای باید در تمام مراحل تجزیه شدن حفظ شود. یک مثال از این مورد واپاشی نادر η (به جرم $549 \text{ MeV}/c^2$) به یک جفت



است. که متأسفانه نسبت انشعابی این واپاشی فقط چیزی در حدود 6×10^{-6} است. مثال واقعی‌تر، پراکندگی پروتون-پروتون در انرژی جنبشی کم است. اصل پاؤلی که در فصل ۶ مورد بررسی قرار می‌گیرد، پروتون‌های بر هم کنش‌کننده را مجبور می‌کند که در حالت 1S_0 (تکانه‌ی زاویه‌ای مدارای 0 و حالت اسپین یگانه) قرار گیرند و حتی وقتی که پروتون‌ها با فواصل ماکروسکوپی از هم متفرق می‌شوند، حالت‌های اسپینی پروتون‌های پراکنده شده باید به‌شکلی که در (۳-۹-۱) مشخص شد همبسته باقی بمانند.

برای به تصور کشیدن بیشتر این ماجرا همانند شکل ۳-۸ سیستمی با دو ذره‌ی اسپین $\frac{1}{2}$ را در نظر بگیرید که این ذرات در جهات مخالف هم در حرکتند. مشاهده‌گر A می‌تواند ذره‌ی ۱ (ذره‌ای که به سمت راست می‌رود) را اندازه بگیرد و مشاهده‌گر B می‌تواند ذره‌ی ۲ (ذره‌ای که به سمت چپ می‌رود) را اندازه‌گیری کند. بگذارید فرض کنیم که مشاهده‌گر A برای ذره‌ی ۱ مقدار مثبت S_z را به دست می‌آورد. این مشاهده‌گر حتی قبل از آنکه مشاهده‌گر B هیچ‌گونه اندازه‌گیری انجام دهد، با اطمینان خروجی اندازه‌گیری مشاهده‌گر B را می‌داند: مشاهده‌گر B باید برای ذره‌ی ۲ مقدار منفی S_z را به دست آورد. به عبارت دیگر اگر A اندازه‌گیری انجام ندهد، B شانس $50-50$ برای به دست آوردن $S_z +$ یا $S_z -$ دارد.

خود این مطلب ممکن است عجیب نباشد. ممکن است بگوییم: این حالت درست شبیه موردی است که بدانیم، کیسه‌ای داریم که حاوی یک توپ سیاه و یک توپ سفید است. وقتی که یک توپ را از کیسه درمی‌آوریم شانس سفید یا سیاه بودن $50-50$ است. اما اگر توپ اول سیاه باشد با قطعیت پیش‌بینی می‌کنیم که توپ دوم سفید خواهد بود.

این مقایسه بسیار ساده‌انگارانه است. وضعیت واقعی در مکانیک کوانتومی بسیار مبهم‌تر از این است؛ به این خاطر که مشاهده‌گرها می‌توانند به‌جای اندازه‌گیری S_x یا S_y را اندازه بگیرند. یک جفت "توپ کوانتومی" یکسان را می‌توان هم برحسب سیاه و سفید و هم برحسب آبی و قرمز تحلیل کرد!



شکل ۳-۸: همبستگی اسپینی در حالت اسپین یگانه

اکنون یادآوری می‌کنیم که برای یک سیستم با تک اسپین $\frac{1}{2}$ ، ویژه‌کت‌های S_x و S_y را می‌توان به‌صورت زیر نوشت:

$$|\hat{x} \pm\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)(|\hat{z} +\rangle \pm |\hat{z} -\rangle), \quad |\hat{z} \pm\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)(|\hat{x} +\rangle \pm |\hat{x} -\rangle) \quad (۳-۹-۳)$$

باز به سیستم مرکب خود بازمی‌گردیم. با انتخاب جهت x به‌عنوان محور کوانتش می‌توانیم کت اسپینی یگانه‌ی (۳-۹-۱) را بازنویسی کنیم:

$$|\text{اسپین یگانه}\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)(|\hat{z} +; \hat{z} -\rangle - |\hat{z} -; \hat{z} +\rangle) \quad (۴-۹-۳)$$

صرف‌نظر از یک علامت کلی که به هر حال بنا بر قراردادی مشخص می‌شود، می‌توانستیم مستقیماً از (۳-۹-۱) این جواب را حدس بزنیم. چون حالت‌های اسپین یگانه هیچ جهت خاص و برگزیده‌ای در فضا ندارند. حال بگذارید فرض کنیم مشاهده‌گر A با تغییر جهت گیری تحلیل‌گر اسپینی که در اختیار دارد، می‌تواند S_x یا S_y ذره ۱ را اندازه بگیرد. در حالی که مشاهده‌گر A همواره S_x ذره ۱ دوم را تعیین می‌کند. اگر مشاهده‌گر A بتواند S_x ذره ۱ را مثبت اندازه بگیرد، مشاهده‌گر B به‌طور قطع شانس $50\%-50\%$ برای به‌دست آوردن $S_x +$ یا $S_x -$ خواهد داشت. حتی اگر با اطمینان بدانیم که S_x ذره منفی است. باز هم S_x این ذره کاملاً نامعین خواهد بود.

از طرف دیگر بگذارید فرض کنیم که A همواره S_x را اندازه می‌گیرد. اگر مشاهده‌گر A ، S_x ذره ۱ را مثبت اندازه بگیرد، آنگاه بدون شک مشاهده‌گر B ، در اندازه‌گیری S_x ذره ۱، منفی به‌دست خواهد آورد. در نهایت اگر A هیچ اندازه‌گیری انجام ندهد، B شانس $50\%-50\%$ برای به‌دست آوردن $S_x +$ یا $S_x -$ خواهد داشت.

برای جمع کردن بحث بالا:

۱- اگر A مقدار d_x را اندازه بگیرد و B مقدار d_x را اندازه گیری کند، همبستگی کاملاً تصادفی بین دو اندازه گیری وجود خواهد داشت.

۲- اگر A مقدار d_x را اندازه بگیرد و B نیز مقدار d_x را اندازه گیری کند، همبستگی ۱۰۰٪ (با علامت مثبت) بین دو اندازه گیری وجود خواهد داشت.

۳- اگر A اندازه گیری انجام ندهد، اندازه گیری‌های B نتایج تصادفی خواهد داشت.

جدول ۳-۱، وقتی که A و B مجاز به اندازه گیری d_x یا d_z هستند. تمام نتایج ممکن یک چنین اندازه گیری‌هایی را نشان می‌دهد.

جدول ۳-۱: اندازه گیری‌های همبستگی اسپین

نتایج B	مؤلفه‌ی اسپین اندازه گرفته شده توسط B	نتایج A	مؤلفه‌ی اسپین اندازه گرفته شده توسط A
-	z	+	z
+	x	-	z
-	z	-	x
+	z	-	x
-	x	+	z
-	x	+	x
+	x	+	z
+	x	-	x
+	z	-	z
-	x	-	z
+	z	+	x
-	z	+	x

این بررسی‌ها نشان می‌دهد که حاصل اندازه گیری B به نوع تصمیم A برای اندازه گیری بستگی دارد: d_x را اندازه بگیرد؟ d_x را اندازه بگیرد؟ یا اصلاً چیزی را اندازه نگیرد. دوباره توجه کنید که A و B ممکن است بدون هیچ امکان بحث با هم یا بر هم کنشی، مایل‌ها از هم دور باشند. مشاهده گر A می‌تواند تصمیم بگیرد که پس از تفرق دو ذره ابزار تحلیل‌گر اسپین خود را در کدام جهت قرار دهد.

گویا ذره‌ی ۲ "می‌داند" که کدام مؤلفه از ذره‌ی ۱ اندازه گرفته شده است. تفسیر نو و تحول‌گرایانه‌ی مکانیک کوانتومی برای این وضعیت به این صورت است: اندازه گیری یک فرایند انتخاب (یا یک فرآیند فیلتر کردن) است. وقتی که d_x ذره‌ی ۱ مثبت اندازه گرفته می‌شود، مؤلفه‌ی $(-z; +z)$ انتخاب شده است. اندازه گیری متوالی روی d_x ذره‌ی دیگر تنها بر این تأکید دارد که سیستم هنوز در $(-z; +z)$ است. باید بپذیریم که اندازه گیری روی آنچه که قسمتی از یک سیستم به نظر می‌رسد باید به‌عنوان اندازه گیری روی کل سیستم تلقی شود.

اصل موضعی انیشتین و نامساوی بل

بسیاری از فیزیکدانان احساس ناخوشایندی نسبت به این تفسیر نو و تحول‌گرایانه برای اندازه‌گیری همبستگی اسپین دارند. احساس آن‌ها در گفته‌ی زیر از آ. انیشتین، که به اصل موضعی انیشتین معروف است، خلاصه می‌شود: "اما بنابر فرضی، که به عقیده‌ی من کاملاً برقرار است، وقتی که دو سیستم از نظر فضایی کاملاً جدا باشند، وضعیت حقیقی سیستم S_2 مستقل از آن چیزی است که برای S_1 رخ می‌دهد." چون این مسأله نخستین بار در مقاله‌ای در سال ۱۹۳۵ توسط آ. انیشتین، بی. پودولسکی و ان. روزن، مطرح شد، گاهی به آن پارادوکس انیشتین - پودولسکی - روزن* می‌گویند.

برخی معتقدند، مشکلاتی که در این جا با آن‌ها سر و کار داریم، ریشه در تغییر احتمالاتی مکانیک کوانتومی دارند و رفتارهای دینامیکی احتمالاتی که در سطح میکروسکوپی یک ظاهر می‌شوند فقط به خاطر برخی پارامترهای ناشناخته - معروف به مقادیر پنهان - است که تعیین‌شدنی نیستند. در این جا هدف ما این نیست که راجع به نظرات مختلف در مکانیک کوانتومی که بر پایه‌ی مقادیر پنهان یا سایر فرضیات شکل گرفته‌اند، بحث کنیم. به جای آن، بگذارید بپرسیم، آیا این نظریه‌ها، پیش‌بینی‌های متفاوتی را از آنچه مکانیک کوانتومی انجام می‌دهند، ایراد می‌کنند؟ تا سال ۱۹۶۴، این طور فکر می‌شد که نظریه‌های مختلف طوری شکل می‌گیرند که پیش‌بینی‌های آن‌ها با چیزی که توسط مکانیک کوانتومی پیش‌بینی شده و با آزمایش اثبات می‌شود، در تعارض نباشد. آنچه باقی می‌ماند به جای فیزیک متعلق به حیطه‌ی متافیزیک خواهد بود. این جی. اس. بل بود که بیان کرد: نظریه‌های متفاوتی که بر پایه‌ی اصل موضعی انیشتین استوارند، در عمل رابطه‌ی نامساوی قابل آزمایشی را برای آزمایشات همبستگی اسپین پیش‌بینی می‌کنند که با پیش‌بینی‌های مکانیک کوانتومی در تعارض است.

نامساوی بل را در چارچوب یک مثال ساده که توسط ای. پی. ویگنر مطرح شد، استخراج می‌کنیم. این مثال چهره‌های نظریه‌های متفاوتی را در بر دارد. طرفداران این مدل معتقدند که مشخص کردن S_x و S_z به طور همزمان غیرممکن است. هر چند وقتی که تعداد زیادی از ذرات با اسپین $\frac{1}{2}$ داریم، معتقدیم که کسری معینی از آن‌ها خاصیت زیر دارد:

اگر S_z اندازه گرفته شود، مطمئناً علامت مثبت به دست می‌آید.

اگر S_x اندازه گرفته شود، مطمئناً علامت منفی به دست می‌آید.

ذره‌ای که این خاصیت را دارا باشد، به نوع $(- , \mathbf{x} + \mathbf{z})$ متعلق است. دقت کنید، ما ادعا نمی‌کنیم که می‌توانیم S_x و S_z را به طور همزمان، به ترتیب $+$ و $-$ اندازه‌گیری کنیم. وقتی که S_z را اندازه می‌گیریم، S_x

* برای این که دقت تاریخی داشته باشیم، مقاله‌ی اصلی انیشتین - پودولسکی - روزن در مورد اندازه‌گیری \mathbf{x} و \mathbf{p} مطرح شد. استفاده از سیستم مرکب اسپین $1/2$ برای روشن شدن پارادوکس انیشتین - پودولسکی - روزن نخستین بار توسط دی. بوهم آغاز شد.

اندازه گرفته نمی‌شود و برعکس. با اینکه می‌دانیم که فقط یکی از مؤلفه‌ها را در عمل می‌توان اندازه گرفت، مقادیر معین مؤلفه‌های اسپین را در بیش از یک جهت، به این مؤلفه‌ها نسبت می‌دهیم. اگر این دستاورد به‌طور بنیادین با مکانیک کوانتومی تفاوت دارد، پیش‌بینی‌های کوانتومی برای اندازه‌گیری S_x و S_y برای حالت اسپین بالا ($S_z +$) با پیش‌بینی این حالت ما در توافق است به شرطی که به‌همان اندازه ذره، که در نوع $(\hat{z} +, \hat{x} +)$ وجود دارد در $(\hat{z} +, \hat{x} -)$ هم وجود داشته باشد.

اکنون بگذارید توضیح دهیم که چطور این مدل می‌تواند نتایج اندازه‌گیری همبستگی اسپین را برای سیستم‌های مرکب اسپین یگانه محاسبه کند. واضح است که برای یک جفت ذره‌ی خاص، باید به نوعی هماهنگی بین ذره‌ی ۱ و ذره‌ی ۲ وجود داشته باشد که مطمئن شویم تکانه‌ی زاویه‌ای کل صفر است. اگر ذره‌ی ۱ متعلق به نوع $(\hat{z} +, \hat{x} -)$ باشد، آنگاه ذره‌ی ۲ باید به نوع $(\hat{z} -, \hat{x} +)$ تعلق داشته باشد و به همین ترتیب. اگر ذره‌ی ۱ با ذره‌ی ۲ هماهنگی‌های زیر را داشته باشند، نتایج اندازه‌گیری‌های همبستگی نظیر آنچه در جدول ۳-۱ مندرج است، قابل حصول است:

ذره‌ی ۱	ذره‌ی ۲	
$(\hat{z} +, \hat{x} -)$	$(\hat{z} -, \hat{x} +)$	(الف ۵-۹-۳)
$(\hat{z} +, \hat{x} +)$	$(\hat{z} -, \hat{x} -)$	(ب ۵-۹-۳)
$(\hat{z} -, \hat{x} +)$	$(\hat{z} +, \hat{x} -)$	(ج ۵-۹-۳)
$(\hat{z} -, \hat{x} -)$	$(\hat{z} +, \hat{x} +)$	(د ۵-۹-۳)

این حالت‌ها جمعیت یکسان با هم، یعنی ۲۵٪ دارند. فرض بسیار مهمی از این جا به دست می‌آید. فرض کنید یک جفت ذره‌ی خاص متعلق به نوع (الف ۵-۹-۳) باشند و مشاهده‌گر A قادر به انجام اندازه‌گیری روی S_x ذره‌ی ۱ باشد. آنگاه او بی‌توجه به آن که مشاهده‌گر B روی S_x یا S_y اندازه‌گیری انجام می‌دهد، الزاماً علامت مثبت را به دست می‌آورد. یعنی اصل موضعی انیشتین در این مدل لحاظ شده است. نتایج A کاملاً مستقل از انتخاب B برای اندازه‌گیری است.

در مثال‌هایی که تا اینجا در نظر گرفته‌ایم، این مدل در ارائه‌ی پیش‌بینی‌های حاصل از مکانیک کوانتومی موفق است. اکنون وضعیت‌های پیچیده‌تری را در نظر می‌گیریم که در آن این مدل به پیش‌بینی‌هایی غیر از پیش‌بینی‌های مکانیک کوانتومی معمول منجر می‌شود. این بار با سه بردار یک‌ه‌ی \hat{a} ، \hat{b} و \hat{c} آغاز می‌کنیم که در حالت کلی دو به دو بر هم عمود نیستند. فرض می‌کنیم که یکی از ذرات به نوع تعریف شده‌ای همچون $(\hat{a} -, \hat{b} +, \hat{c} +)$ تعلق دارد. به این معنی که اگر $\hat{S} \cdot \hat{a}$ اندازه گرفته شود، با اطمینان علامت منفی حاصل می‌شود، اگر $\hat{S} \cdot \hat{b}$ مورد اندازه‌گیری قرار گیرد مطمئناً علامت مثبت به دست می‌آوریم

و اگر $\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{c}}$ اندازه گرفته شود، علامتی که به دست می آید بی شک علامت مثبت است. مجدداً می باید هماهنگی کاملی وجود داشته باشد یعنی ذره ی دیگر الزاماً باید به نوع $(\hat{\mathbf{a}} +, \hat{\mathbf{b}} -, \hat{\mathbf{c}} -)$ تعلق داشته باشد تا مطمئن شویم که تکانه ی زاویه ای کل صفر است. هر اتفاقی که رخ دهد، همچنان جفت ذره ی مطرح در مسأله باید یکی از هشت نوع مندرج در جدول ۳-۲ باشند. این هشت امکان دو به دو از هم مستقل و غیرقابل جمع هستند. جمعیت هر کدام از این هشت نوع در ستون اول درج شده است.

حال بگذارید فرض کنیم که مشاهده گر A، علامت $\mathbf{S}_1 \cdot \hat{\mathbf{a}}$ را مثبت و مشاهده گر B نیز $\mathbf{S}_2 \cdot \hat{\mathbf{b}}$ را با علامت مثبت به دست آورند. از جدول ۳-۲ پیداست که جفت ذره ی ما متعلق به نوع ۳ یا ۴ هستند، بنابراین تعداد جفت ذرات موجود در این وضعیت برابر با $N_3 + N_4$ خواهد بود. از آن جا که N_i ها در محدوده ی مثبت $P(\hat{\mathbf{a}} +; \hat{\mathbf{b}} +)$ قرار دارند باید رابطه ای نظیر رابطه ی زیر داشته باشیم:

$$N_3 + N_4 \leq (N_2 + N_4) + (N_3 + N_7) \quad (۶-۹-۳)$$

مثبت اندازه بگیرد و مشاهده گر B نیز علامت $\mathbf{S}_2 \cdot \hat{\mathbf{b}}$ را مثبت به دست آورد و به همین ترتیب. احتمال این قرار می دهیم که در یک انتخاب تصادفی، مشاهده گر A، علامت $\mathbf{S}_1 \cdot \hat{\mathbf{a}}$ را

جدول ۳-۲ هماهنگی مؤلفه ی اسپین در نظریه های جایگزین

ذره ی ۲	ذره ی ۱	جمعیت
$(\hat{\mathbf{a}} -, \hat{\mathbf{b}} -, \hat{\mathbf{c}} -)$	$(\hat{\mathbf{a}} +, \hat{\mathbf{b}} +, \hat{\mathbf{c}} +)$	N_1
$(\hat{\mathbf{a}} -, \hat{\mathbf{b}} -, \hat{\mathbf{c}} +)$	$(\hat{\mathbf{a}} +, \hat{\mathbf{b}} +, \hat{\mathbf{c}} -)$	N_2
$(\hat{\mathbf{a}} -, \hat{\mathbf{b}} +, \hat{\mathbf{c}} -)$	$(\hat{\mathbf{a}} +, \hat{\mathbf{b}} -, \hat{\mathbf{c}} +)$	N_3
$(\hat{\mathbf{a}} -, \hat{\mathbf{b}} +, \hat{\mathbf{c}} +)$	$(\hat{\mathbf{a}} +, \hat{\mathbf{b}} -, \hat{\mathbf{c}} -)$	N_4
$(\hat{\mathbf{a}} +, \hat{\mathbf{b}} -, \hat{\mathbf{c}} -)$	$(\hat{\mathbf{a}} -, \hat{\mathbf{b}} +, \hat{\mathbf{c}} +)$	N_5
$(\hat{\mathbf{a}} +, \hat{\mathbf{b}} -, \hat{\mathbf{c}} +)$	$(\hat{\mathbf{a}} -, \hat{\mathbf{b}} +, \hat{\mathbf{c}} -)$	N_6
$(\hat{\mathbf{a}} +, \hat{\mathbf{b}} +, \hat{\mathbf{c}} -)$	$(\hat{\mathbf{a}} -, \hat{\mathbf{b}} -, \hat{\mathbf{c}} +)$	N_7
$(\hat{\mathbf{a}} +, \hat{\mathbf{b}} +, \hat{\mathbf{c}} +)$	$(\hat{\mathbf{a}} -, \hat{\mathbf{b}} -, \hat{\mathbf{c}} -)$	N_8

واضح است که داریم:

$$P(\hat{\mathbf{a}} +; \hat{\mathbf{b}} +) = \frac{(N_3 + N_4)}{\sum_i^8 N_i} \quad (۷-۹-۳)$$

به شیوه ای مشابه به دست می آوریم:

$$P(\hat{\mathbf{a}} +; \hat{\mathbf{c}} +) = \frac{(N_2 + N_4)}{\sum_i^8 N_i} \quad \text{و} \quad P(\hat{\mathbf{c}} +; \hat{\mathbf{b}} +) = \frac{(N_3 + N_7)}{\sum_i^8 N_i} \quad (۸-۹-۳)$$

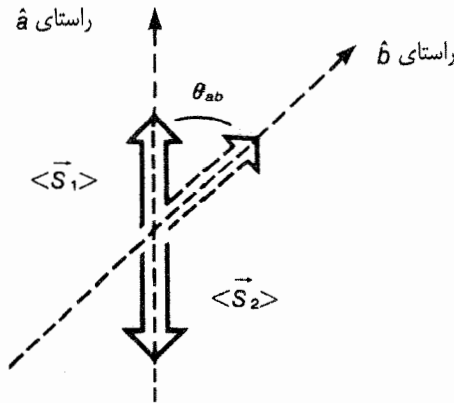
اکنون شرط مثبت بودن (۳-۹-۶) تبدیل می‌شود به:

$$P(\hat{\mathbf{a}}+; \hat{\mathbf{b}}+) \leq P(\hat{\mathbf{a}}+; \hat{\mathbf{c}}+) + P(\hat{\mathbf{c}}+; \hat{\mathbf{b}}+) \quad (۳-۹-۹)$$

این نامساوی بل است که از اصل موضعیت انیشتین سرچشمه می‌گیرد.

مکانیک کوانتومی و نامساوی بل

باز به دنیای مکانیک کوانتومی بازمی‌گردیم. در مکانیک کوانتومی در مورد کسر معینی از جفت ذرات صحبت نمی‌کنیم. مثلاً نمی‌گوییم $N_3 / \sum_i^8 N_i$ به نوع ۳ تعلق دارد. به جای آن تمام سیستم‌ها با حالت اسپینی یگانه را با کتی شبیه (۳-۹-۱) نشان می‌دهیم. به زبان بخش ۳-۴ در این جا با یک آنسامبل خالص سر و کار داریم. با استفاده از این کت و قوانین مکانیک کوانتومی، بدون هیچ ابهامی می‌توان هر کدام از سه جمله‌ی موجود در (۳-۹-۹) را محاسبه کرد.



شکل ۳-۹: محاسبه‌ی $P(\hat{\mathbf{a}}+; \hat{\mathbf{b}}+)$

ابتدا $P(\hat{\mathbf{a}}+; \hat{\mathbf{b}}+)$ را محاسبه می‌کنیم. فرض کنید مشاهده‌گر A علامت $\mathbf{S}_1 \cdot \hat{\mathbf{a}}$ را مثبت به دست می‌آورد. بنابر همبستگی ۱۰۰٪ (علامت مخالف) که پیش‌تر مورد بحث واقع شد، مطمئناً از اندازه‌گیری $\hat{\mathbf{a}} \cdot \mathbf{S}_2$ علامت منفی به دست می‌آید. اما برای محاسبه‌ی $P(\hat{\mathbf{a}}+; \hat{\mathbf{b}}+)$ بایستی محور کوانتش جدید $\hat{\mathbf{b}}$ را در نظر بگیریم که با $\hat{\mathbf{a}}$ زاویه‌ی θ_{ab} را می‌سازد؛ شکل ۳-۹ را ببینید. بنابر فرمول‌بندی بخش ۳-۲، احتمال آن که از اندازه‌گیری $\hat{\mathbf{b}} \cdot \mathbf{S}_2$ علامت + به دست آید، در حالی که بدانیم ذره‌ی ۲ در ویژه‌کت $\hat{\mathbf{a}} \cdot \mathbf{S}_2$ با ویژه مقدار منفی است، به صورت زیر است:

$$\cos^2 \left[\frac{(\pi - \theta_{ab})}{2} \right] = \sin^2 \left(\frac{\theta_{ab}}{2} \right) \quad (۳-۹-۱۰)$$

به عنوان یک نتیجه به دست می آوریم:

$$P(\hat{\mathbf{a}}+; \hat{\mathbf{b}}+) = \left(\frac{1}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\theta_{ab}}{2}\right) \quad (11-9-3)$$

که ضریب $\frac{1}{2}$ بالا به خاطر احتمال اولیه‌ی به دست آوردن $\mathbf{S}_1 \cdot \hat{\mathbf{a}}$ با علامت + است. با استفاده از (۱۱-۹-۳) و تعمیم آن برای دو جمله‌ی دیگر (۹-۹-۳) می توان نامساوی بل را به صورت زیر نوشت:

$$\sin^2\left(\frac{\theta_{ab}}{2}\right) \leq \sin^2\left(\frac{\theta_{ac}}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{\theta_{cb}}{2}\right) \quad (12-9-3)$$

اکنون نشان خواهیم داد که نامساوی (۱۲-۹-۳) از نقطه نظر هندسی همواره ممکن نیست. برای ساده سازی بگذارید تا $\hat{\mathbf{a}}$ ، $\hat{\mathbf{b}}$ و $\hat{\mathbf{c}}$ را در یک صفحه در نظر بگیریم و $\hat{\mathbf{c}}$ را نیم سازه زاویه ساخته شده توسط $\hat{\mathbf{a}}$ و $\hat{\mathbf{b}}$ قرار می دهیم.

$$\theta_{ab} = 2\theta, \quad \theta_{ac} = \theta_{cb} = \theta \quad (13-9-3)$$

به این صورت نامساوی (۱۲-۹-۳) برای مقادیر زیر نقض می شود:

$$0 < \theta < \frac{\pi}{2} \quad (14-9-3)$$

برای مثال، قرار دهید $\theta = \pi/4$ ، سپس به دست می آوریم:

$$0.500 \leq 0.292 \quad ?? \quad (15-9-3)$$

بنابراین پیش بینی های مکانیک کوانتومی با نامساوی بل سازگار نیست. یک مشاهده پذیر حقیقی - یعنی چیزی که به صورت آزمایشی قابل حصول است - وجود دارد که بین مکانیک کوانتومی و نظریه‌ی جایگزینی که با اصل موضعیت انیشتین سازگار است، اختلاف ایجاد می کند.

چندین آزمایش برای آزمودن نامساوی بل انجام شدند. در یکی از این آزمایشات همبستگی های اسپین بین پروتون های نهایی در پراکندگی کم انرژی پروتون - پروتون اندازه گرفته شد. در بقیه‌ی آزمایش ها همبستگی قطبش فوتونی بین یک جفت فوتون در مسیر آبخاری یک اتم برانگیخته (Ca, Hg, ...) مورد بررسی قرار گرفت:

$$(J=0) \xrightarrow{\gamma} (J=1) \xrightarrow{\gamma} (J=0) \quad (16-9-3)$$

این جفت فوتون می توانند در واپاشی یک پوزیترونیم (یک حالت مقید e^+e^- در 1S_0) نیز تولید شود. مطالعه‌ی همبستگی قطبش فوتون با آنچه که در بخش ۱-۱ تحت مطالعه قرار دادیم قابل مقایسه است:

$S_z + \rightarrow \hat{e}$	در جهت x
$S_z - \rightarrow \hat{e}$	در جهت y
$S_x + \rightarrow \hat{e}$	در جهت 45° قطر
$S_x - \rightarrow \hat{e}$	در جهت 135° قطر

نتایج تمام این آزمایشات اخیر نشان دادند که نامساوی بل نقض می‌شود. در یک مورد از آزمایشات ۹ واحد انحراف معیار وجود داشت. به علاوه در تمام این آزمایشات نامساوی بل در حالی نقض می‌شود که پیش‌بینی‌های مکانیک کوانتومی، با در نظر گرفتن حدود خطاهای آزمایش گاهی درست از آب درآمدند. در این مبارزه مکانیک کوانتومی برنده شد.

این واقعیت که تمام پیش‌بینی‌های مکانیک کوانتومی به‌درستی انجامیدند به این معنی نیست که همه‌ی آنچه که گفتیم بی‌اهمیت است. با وجود این آرای آزمایشگاهی، ما هنوز هم درباره‌ی بسیاری جهات در اندازه‌هایی از این دست نگران هستیم. به‌طور خاص فرض کنید: درست پس از اینکه مشاهده‌گر A روی ذره‌ی ۱ اندازه‌گیری انجام داد مشاهده‌گر ۲- که ممکن است چندین سال نوری از ذره‌ی ۱ فاصله داشته باشد- چطور می‌توان بداند که جهت اسپین چگونه است و بنابراین چطور در روابط همبستگی جدول ۳-۱ صدق می‌کند؟ در یکی از آزمایشات که به آزمودن نامساوی بل می‌پرداخت (این آزمایش توسط آ. اسپکت و همکاران انجام شد) چیدمان تحلیل‌گر آنقدر سریع تغییر می‌کرد که چگونگی نتیجه‌ی آزمایش A که با کمتر از سرعت نور می‌توانست مخابره شود، دیرتر از زمان اندازه‌گیری B ، به B می‌رسید.

این بخش را با نشان دادن این نتیجه‌ی عجیب به پایان می‌بریم که ما نمی‌توانیم برای انتقال هیچ‌گونه اطلاعات مفیدی بین دو نقطه متمایز ماکروسکوپی که از اندازه‌گیری همبستگی اسپین استفاده کنیم، به‌ویژه نشان دهیم که ارتباطات فرانوری (با سرعت بالاتر از نور) غیرممکن است.

فرض کنید A و B هر دو توافق کرده‌اند که S_z را اندازه‌گیری کنند. بنابراین بدون پرسیدن از A ، مشاهده‌گر B دقیقاً می‌داند که A چه چیزی به‌دست آورده است. اما این بدان معنا نیست که A و B با یکدیگر در ارتباطند. مشاهده‌گر B تنها یک رشته‌ی تصادفی از علامت‌های مثبت و منفی به‌دست می‌آورد. پیداست که در این رشته اطلاعات مفیدی قرار ندارد. مشاهده‌گر B تنها پس از آنکه نتایج بدست آمده‌ی خود را با A مقایسه کند می‌تواند به‌درستی پیش‌بینی‌های کوانتومی خود پی‌برد.

اگر A یا B بتواند به‌طور ناگهانی جهت ابزار تحلیل‌گر خود را تغییر دهند، می‌توان تصور کرد که A و B در ارتباط با یکدیگرند. بگذارید فرض کنیم که A در ابتدا S_z را اندازه‌گیری می‌کند و B به‌اندازه‌گیری S_x می‌پردازد. نتایج اندازه‌گیری‌های A با نتایج اندازه‌گیری‌های B ، کاملاً غیرهم‌بسته‌اند، بنابراین اطلاعاتی رد و بدل نمی‌شود. اما، فرض کنید که A ناگهان قول خود بشکند و بدون گفتن به B به

اندازه گیری δx بپردازد. اکنون همبستگی کاملی بین نتایج A و نتایج B وجود دارد، هر چند B نمی تواند حدس بزند که A جهت تحلیل گر خود را عوض کرده است. B با نگاه کردن به یادداشتهای خود باز هم یک رشته تصادفی از $+$ ها و $-$ ها خواهد دید. بنابراین مجدداً هیچ گونه اطلاعاتی مبادله نشده است.

۱۰.۳ عملگرهای تانسوری

عملگر برداری

تا به این جا از علامت هایی همچون x, p, S و L استفاده کرده ایم، اما هنوز به طور ساختاری خواص چرخشی آن ها را مورد بحث قرار نداده ایم. این ها عملگرهای برداری اند، اما خواص آن ها تحت چرخش به چه صورتی است؟ در این بخش تعریف کوانتومی دقیقی از عملگرهای برداری ارائه می دهیم که بر پایه ی روابط جابه جایی آن ها با عملگر تکانه ی جابه جایی استوار است. سپس این تعریف را به عملگرهای تانسوری که خواص تبدیلی پیچیده تری دارند تعمیم می دهیم و یک قضیه ی مهم برای آرایه های ماتریسی و عملگرهای برداری و تانسوری ارائه می کنیم.

همه ی ما می دانیم که بردار در فیزیک کلاسیک کمیتی با سه مؤلفه است که بنا بر تعریف، تحت چرخش به شکل $V_i \rightarrow \sum_j R_{ij} V_j$ تبدیل می شود. در مکانیک کوانتومی منطقی است که بخواهیم مقدار انتظاری عملگر برداری V ، تحت تبدیل، شبیه یک بردار کلاسیکی تحت چرخش باشد. به خصوص وقتی که کت حالت تحت چرخش به شکل زیر تغییر کند:

$$|\alpha\rangle \rightarrow \mathcal{D}(R)|\alpha\rangle \quad (۱-۱۰-۳)$$

فرض می شود که مقدار انتظاری V به شکل زیر تغییر کند:

$$\langle \alpha | V_i | \alpha \rangle \rightarrow \langle \alpha | \mathcal{D}^\dagger(R) V_i \mathcal{D}(R) | \alpha \rangle = \sum_j R_{ij} \langle \alpha | V_j | \alpha \rangle \quad (۲-۱۰-۳)$$

این رابطه باید برای کت اختیاری $|\alpha\rangle$ درست باشد. بنابراین:

$$\mathcal{D}^\dagger(R) V_i \mathcal{D}(R) = \sum_j R_{ij} V_j \quad (۳-۱۰-۳)$$

باید همچون یک معادله ی عملگری برقرار باشد که در آن R_{ij} یک ماتریس 3×3 متناظر با چرخش R است.

حال بگذارید حالت خاصی را در نظر بگیریم که در آن یک چرخش بی نهایت کوچک داریم. وقتی چرخش بی نهایت کوچک است. داریم:

$$\mathcal{D}(R) = 1 - \frac{i\varepsilon \mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{n}}}{\hbar} \quad (۴-۱۰-۳)$$

اکنون می‌توانیم (۳-۱۰-۳) را به شکل زیر بنویسیم:

$$V_i + \frac{\varepsilon}{i\hbar} [V_i, \mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{n}}] = \sum_j R_{ij}(\hat{\mathbf{n}}; \varepsilon) V_j \quad (5-10-3)$$

در حالت خاص، وقتی که $\hat{\mathbf{n}}$ در راستای محور z باشد داریم:

$$R(\hat{\mathbf{z}}; \varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 & -\varepsilon & 0 \\ \varepsilon & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (6-10-3)$$

بنابراین:

$$i=1: \quad V_x + \frac{\varepsilon}{i\hbar} [V_x, J_z] = V_x - \varepsilon V_y \quad (7-10-3 \text{ الف})$$

$$i=2: \quad V_y + \frac{\varepsilon}{i\hbar} [V_y, J_z] = \varepsilon V_x + V_y \quad (7-10-3 \text{ ب})$$

$$i=3: \quad V_z + \frac{\varepsilon}{i\hbar} [V_z, J_z] = V_z \quad (7-10-3 \text{ ج})$$

این به معنی آن است که V باید در رابطه‌ی جابه‌جایی زیر صدق کند:

$$[V_i, J_j] = i\varepsilon_{ijk} \hbar V_k \quad (8-10-3)$$

پیداست که رفتار V تحت یک چرخش محدود، با رابطه‌ی جابه‌جایی بالا کاملاً به دست می‌آید. تنها باید فرمول آشنای (۲-۳-۴۷) را در رابطه‌ی زیر اعمال کنیم:

$$\exp\left(\frac{iJ_j\phi}{\hbar}\right) V_i \exp\left(\frac{-iJ_j\phi}{\hbar}\right) \quad (9-10-3)$$

تنها کافی است که عبارت زیر را محاسبه کنید:

$$[J_j, [J_j, [\dots [J_j, V_i] \dots]]] \quad (10-10-3)$$

همانند مورد اسپین در (۳-۲-۷) این رابطه‌ی تو در توی جابه‌جاگری V_i یا V_k ($k \neq i, j$) را به ما می‌دهد.

می‌توانیم (۳-۱۰-۸) را به عنوان خاصیت تعریف‌کننده عملگر برداری به کار ببریم. توجه کنید که

روابط جابه‌جایی تکانه‌ی زاویه‌ای حالت خاصی از (۳-۱۰-۸) هستند و به طوری که در آن $V_i \rightarrow J_i$

$V_k \rightarrow J_k$ ، این روابط به دست می‌آیند. حالت‌های خاص دیگر عبارتند از: $[y, L_z] = i\hbar x$ ،

$[x, L_z] = -i\hbar y$ ، $[p_x, L_z] = i\hbar p_y$ و $[p_y, L_z] = -i\hbar p_x$ این روابط صریحاً اثبات می‌شوند.

تانسورهای دکارتی در برابر تانسورهای غیر قابل تحلیل

در فیزیک کلاسیک مرسوم است که یک تانسور $T_{ijk} \dots$ را به شکل $V_i \rightarrow \sum_j R_{ij} V_j$ تعمیم دهند به طوری که:

$$T_{ijk} \dots \rightarrow \sum_{i'} \sum_{j'} \sum_{k'} \dots R_{ii'} R_{jj'} \dots T_{i'j'k'} \dots \quad (11-10-3)$$

این تانسور تحت چرخشی که با ماتریس 3×3 متعامد R مشخص می‌شود، تعمیم می‌یابد. به تعداد اندیس‌های تانسور رتبه‌ی تانسور می‌گویند. چنین تانسوری به تانسور دکارتی معروف است.

ساده‌ترین مثال از تانسورهای دکارتی، تانسور دکارتی مرتبه ۲ است. این تانسور یک دوتایی و شکل گرفته از ۲ بردار U و V است. به سادگی می‌توان مؤلفه‌ی دکارتی U و مؤلفه‌ی دکارتی V را گرفت و کنار هم گذاشت تا این تانسور ایجاد شود.

$$T_{ij} \equiv U_i V_j \quad (12-10-3)$$

توجه کنید که در اینجا ۹ مؤلفه کنار هم دیگر داریم. پیداست که این مؤلفه‌ها تحت چرخش همانند (۳-۱۱-۱۰) تغییر می‌کنند.

مشکل یک تانسور دکارتی نظیر (۳-۱۲-۱۰) تقلیل پذیر بودن آن است. یعنی می‌توان تحت چرخش آن را به اجزای کوچک‌تری تجزیه کرد که به طور مختلفی تغییر می‌یابند. در حالت خاص برای دوتایی (۳-۱۲-۱۰) داریم:

$$U_i V_j = \frac{\mathbf{U} \cdot \mathbf{V}}{3} \delta_{ij} + \frac{(U_i V_j - U_j V_i)}{2} + \left(\frac{U_i V_j + U_j V_i}{2} - \frac{\mathbf{U} \cdot \mathbf{V}}{3} \delta_{ij} \right) \quad (13-10-3)$$

اولین جمله در سمت راست یعنی $\mathbf{U} \cdot \mathbf{V}$ ، یک ضرب اسکالر است که تحت چرخش ناوردا باقی می‌ماند. جمله‌ی دوم یک تانسور پاد متقارن است که می‌توان آن را به شکل ضرب برداری $\epsilon_{ijk} (\mathbf{U} \times \mathbf{V})_k$ نوشت. روی هم رفته ۳ مؤلفه‌ی مستقل در این جمله وجود دارد. جمله‌ی آخر یک تانسور بدون رد متقارن 3×3 است که $5 (= 6 - 1)$ که ۱ به خاطر شرط بدون رد بودن تانسور کم می‌شود) مؤلفه‌ی مستقل دارد. تعداد مؤلفه‌های مستقل به شکل زیر حاصل می‌شود:

$$3 \times 3 = 1 + 3 + 5 \quad (14-10-3)$$

دقت می‌کنیم، اعدادی که در سمت راست (۳-۱۴-۱۰) ظاهر می‌شوند، به ترتیب برابر با ضرایب جملات تکانه زاویه‌ای $l=0$ ، $l=1$ و $l=2$ هستند. این بیان می‌کند که تانسور دو تایی را می‌توان به تانسورهایی

که همچون هماهنگ‌های کروی با $l=0$ ، $l=1$ و $l=2$ تبدیل می‌شوند، تجزیه کرد. در واقع (۳-۱۰-۱۳) ساده‌ترین مثال غیربدیهی برای نشان دادن این است که تانسور دکارتی به تانسورهای کروی غیرقابل تقلیل تبدیل می‌شود.

قبل از رسیدن به تعریف دقیق تانسور کروی، مثالی از تانسور کروی با رتبه‌ی k می‌آوریم. فرض کنید که یک هماهنگ کروی $Y_l^m(\theta, \phi)$ داریم. قبلاً دیدیم که می‌توان آن را برحسب $Y_l^m(\hat{n})$ نوشت که در آن جهت \hat{n} با e و θ مشخص می‌شود. اکنون \hat{n} را با برداری همچون V جایگزین می‌کنیم. حاصل یک تانسور کروی مرتبه k (به جای l) با عدد کوانتومی مغناطیسی q (به جای m) است. داریم:

$$T_q^{(k)} = Y_{l=k}^{m=q}(\mathbf{V}) \quad (15-10-3)$$

در حالت خاص، وقتی $k=1$ و با جایگذاری V_z به جای $(\hat{n})_z = (z/r)$ هماهنگ‌های کروی $l=1$ را داریم و به همین ترتیب:

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r} \rightarrow T_0^{(1)} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} V_z,$$

$$Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{x \pm iy}{\sqrt{2}r} \rightarrow T_{\pm 1}^{(1)} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \left(\mp \frac{V_x \pm iV_y}{\sqrt{2}} \right) \quad (16-10-3)$$

واضح است که می‌توان این روند را به k های بزرگ‌تر هم تعمیم داد. برای مثال:

$$Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \frac{(x \pm iy)^2}{r^2} \rightarrow T_{\pm 2}^{(2)} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} (V_x \pm iV_y)^2 \quad (17-10-3)$$

تنها اگر Y_l^m غیرقابل تقلیل باشند، $T_q^{(k)}$ غیرقابل تقلیل هستند. به همین خاطر، کار کردن با تانسورهای کروی بسیار رضایت‌بخش‌تر از کار کردن با تانسورهای دکارتی است.

برای بررسی تبدیل تانسورهای کروی که به این روش ساخته می‌شوند، بگذارید ابتدا چگونگی تبدیل Y_l^m تحت چرخش را مرور کنیم. نخست، برای ویژه‌کت راستا داریم:

$$|\hat{n}\rangle \rightarrow \mathcal{D}(R)|\hat{n}\rangle \equiv |\hat{n}'\rangle \quad (18-10-3)$$

که در آن ویژه‌کت چرخیده را با $|\hat{n}'\rangle$ نمایش می‌دهیم. می‌خواهیم بیازماییم که چطور می‌شود $Y_l^m(\hat{n}') = \langle \hat{n}' | l, m \rangle$ را برحسب جملات $Y_l^m(\hat{n})$ نوشت. با شروع از عبارت زیر این مطلب به سادگی دیده خواهد شد:

$$\mathcal{D}(R^{-1})|l, m\rangle = \sum_{m'} |l, m'\rangle \mathcal{D}_{m' m}^{(l)}(R^{-1}) \quad (19-10-3)$$

با وارد کردن $\langle \hat{n} \rangle$ از سمت چپ و استفاده از (۳-۱۰-۱۸) داریم:

$$Y_l^m(\hat{n}') = \sum_{m'} Y_l^{m'}(\hat{n}) \mathcal{D}_{m'm}^{(l)}(R^{-1}) \quad (۳-۱۰-۲۰)$$

اگر عملگری وجود داشته باشد که مانند $Y_l^m(\mathbf{V})$ عمل کند، منطقی است که انتظار داشته باشیم:

$$\mathcal{D}^\dagger(R) Y_l^m(\mathbf{V}) \mathcal{D}(R) = \sum_{m'} Y_l^{m'}(\mathbf{V}) \mathcal{D}_{mm'}^{(l)*}(R) \quad (۳-۱۰-۲۱)$$

که در آن از یکانی بودن عملگر چرخش برای نوشتن $\mathcal{D}_{m'm}^{(l)}(R^{-1})$ استفاده شده است.

همه‌ی این کارها تنها برای تعریف یک تانسور کروی انجام شد. اکنون تانسورهای کروی را در مکانیک کوانتومی در نظر می‌گیریم. با استفاده از (۳-۱۰-۲۱)، عملگر تانسوری کروی از مرتبه‌ی k و با $2k+1$ مؤلفه را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$\mathcal{D}^\dagger(R) T_q^{(k)} \mathcal{D}(R) = \sum_{q'=-k}^k \mathcal{D}_{qq'}^{(k)*}(R) T_{q'}^{(k)} \quad (۳-۱۰-۲۲ \text{ الف})$$

یا معادل با آن:

$$\mathcal{D}(R) T_q^{(k)} \mathcal{D}^\dagger(R) = \sum_{q'=-k}^k \mathcal{D}_{q'q}^{(k)}(R) T_{q'}^{(k)} \quad (۳-۱۰-۲۲ \text{ ب})$$

این تعریف صرف نظر از آنکه $T_q^{(k)}$ را بتوان به صورت $Y_{l=k}^m(\mathbf{V})$ نوشت، مصداق دارد. برای نمونه، یک تانسور کروی $q=+2$ مؤلفه‌ای از مرتبه‌ی ۲ است. هرچند نمی‌توان آن را مانند $(V_x + iV_y)^2$ به صورت $Y_k^q(\mathbf{V})$ نوشت.

تعریف مناسب‌تر تانسور کروی با فرض شکل بی‌نهایت کوچک (۳-۱۰-۲۲) حاصل می‌شود، داریم:

$$\left(1 + \frac{i\mathbf{J} \cdot \hat{n} \epsilon}{\hbar}\right) T_q^{(k)} \left(1 - \frac{i\mathbf{J} \cdot \hat{n} \epsilon}{\hbar}\right) = \sum_{q'=-k}^k T_{q'}^{(k)} \langle kq' | \left(1 + \frac{i\mathbf{J} \cdot \hat{n} \epsilon}{\hbar}\right) | kq \rangle \quad (۳-۱۰-۲۳)$$

یا

$$[\mathbf{J} \cdot \hat{n}, T_q^{(k)}] = \sum_{q'} T_{q'}^{(k)} \langle kq' | \mathbf{J} \cdot \hat{n} | kq \rangle \quad (۳-۱۰-۲۴)$$

با در نظر گرفتن \hat{n} در جهت‌های \hat{z} و $(\hat{x} \pm i\hat{y})$ و استفاده از آرایه‌ی ماتریسی غیرصفر J_z و J_{\pm} (روابط (۳-۵-۳۵) ب) و (۳-۵-۴۱) را ببینید) داریم:

$$[J_z, T_q^{(k)}] = \hbar q T_q^{(k)} \quad (۳-۱۰-۲۵ \text{ الف})$$

و

$$[J_{\pm}, T_q^{(k)}] = \hbar \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} T_{q \pm 1}^{(k)} \quad (۳-۱۰-۲۵ \text{ ب})$$

می‌توان این روابط جابه‌جایی را به‌جای (۳-۱۰-۲۲) به‌عنوان تعریف تانسورهای کروی فرض کرد.

ضرب تانسورها

دیدیم که چطور می‌توان با استفاده از زبان تانسوری از دو بردار، یک کمیت نرده‌ای، یک بردار (یا تانسور پادمقارن) و یک تانسور مقارن بدون رد ساخت. البته، زبان تانسور کروی نیز می‌تواند مورد استفاده قرار گیرد (بایم ۱۹۶۹، فصل ۱۷) برای مثال:

$$\begin{aligned} T_0^{(0)} &= \frac{-\mathbf{U} \cdot \mathbf{V}}{3} = \frac{(U_{+1}V_{-1} + U_{-1}V_{+1} - U_0V_0)}{3} \\ T_q^{(1)} &= \frac{(\mathbf{U} \times \mathbf{V})_q}{i\sqrt{2}} \\ T_{\pm 2}^{(2)} &= U_{\pm 1}V_{\pm 1} \\ T_{\pm 1}^{(2)} &= \frac{U_{\pm 1}V_0 + U_0V_{\pm 1}}{\sqrt{2}} \\ T_0^{(2)} &= \frac{U_{+1}V_{-1} + 2U_0V_0 + U_{-1}V_{+1}}{\sqrt{6}} \end{aligned} \quad (۳-۱۰-۲۶)$$

که در آن U_q مؤلفه‌ی q ام یک تانسور کروی مرتبه ۱، متناظر با بردار U است، خواص تبدیلی ذکر شده را می‌توان از راه مقایسه با Y_l^m و به یاد آوردن $U_{+1} = -(U_x + iU_y)/\sqrt{2}$ و $U_{-1} = (U_x - iU_y)/\sqrt{2}$ و $U_0 = U_z$ آزمود. به‌عنوان نمونه می‌توان $V_{\pm 1,0}$ را آزمایش کرد. به‌عنوان مثال:

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \frac{3z^2 - r^2}{r^2}$$

که در آن $3z^2 - r^2$ را می‌توان به‌شکل زیر نوشت:

$$2z^2 + 2 \left[-\frac{(x+iy)(x-iy)}{\sqrt{2}} \right]$$

بنابراین، Y_2^0 تنها یک مورد کروی از $T_0^{(2)}$ برای $\mathbf{U} = \mathbf{V} = \mathbf{r}$ است.

راه سازمان یافته تر برای تشکیل ضرب تانسوری به شکل زیر به دست می آید. با بیان یک قضیه شروع می کنیم:

قضیه. فرض کنید $X_{q_1}^{(k_1)}$ و $Z_{q_2}^{(k_2)}$ تانسورهای تقلیل نیافتنی از مرتبه k_1 و k_2 هستند.

آنگاه:

$$T_q^{(k)} = \sum_{q_1} \sum_{q_2} \langle k_1 k_2; q_1 q_2 | k_1 k_2; k q \rangle X_{q_1}^{(k_1)} Z_{q_2}^{(k_2)} \quad (۳-۱۰-۲۷)$$

یک تانسور (تقلیل نشدنی) گروهی از مرتبه k است.

اثبات. باید نشان دهیم که $T_q^{(k)}$ تحت چرخش باید طبق (۳-۱۰-۲۲) تبدیل یابد.

$$\begin{aligned} \mathcal{D}^\dagger(R) T_q^{(k)} \mathcal{D}(R) &= \sum_{q_1} \sum_{q_2} \langle k_1 k_2; q_1 q_2 | k_1 k_2; k q \rangle \\ &\quad \times \mathcal{D}^\dagger(R) X_{q_1}^{(k_1)} \mathcal{D}(R) \mathcal{D}^\dagger(R) Z_{q_2}^{(k_2)} \mathcal{D}(R) \\ &= \sum_{q_1} \sum_{q_2} \sum_{q'_1} \sum_{q'_2} \langle k_1 k_2; q_1 q_2 | k_1 k_2; k q \rangle \\ &\quad \times X_{q'_1}^{(k_1)} \mathcal{D}_{q'_1 q_1}^{(k_1)}(R^{-1}) Z_{q'_2}^{(k_2)} \mathcal{D}_{q'_2 q_2}^{(k_2)}(R^{-1}) \\ &= \sum_{k''} \sum_{q_1} \sum_{q_2} \sum_{q'_1} \sum_{q'_2} \sum_{q''} \sum_{q'} \langle k_1 k_2; q_1 q_2 | k_1 k_2; k q \rangle \\ &\quad \times \langle k_1 k_2; q_1 q'_2 | k_1, k_2; k'' q' \rangle \\ &\quad \times \langle k_1 k_2; q_1 q_2 | k_1 k_2; k'' q'' \rangle \mathcal{D}_{q'' q''}^{(k'')} (R^{-1}) X_{q'_1}^{(k_1)} Z_{q'_2}^{(k_2)}. \end{aligned}$$

که در آن از فرمول سری های کلبش - گوردن استفاده کردیم. عبارت قبلی تبدیل می شود به:

$$= \sum_{k''} \sum_{q'_1} \sum_{q'_2} \sum_{q''} \sum_{q'} \delta_{k k''} \delta_{q q''} \langle k_1 k_2; q'_1 q'_2 | k_1 k_2; k'' q' \rangle \mathcal{D}_{q'' q''}^{(k'')} (R^{-1}) X_{q'_1}^{(k_1)} Z_{q'_2}^{(k_2)}$$

که در آن از متعامد بودن ضرایب کلبش - گوردن استفاده شده است. در نهایت این عبارت منجر می شود به:

$$\begin{aligned} &= \sum_{q'} \left(\sum_{q'_1} \sum_{q'_2} \langle k_1 k_2; q'_1 q'_2 | k_1 k_2; k q' \rangle X_{q'_1}^{(k_1)} Z_{q'_2}^{(k_2)} \right) \mathcal{D}_{q' q'}^{(k)} (R^{-1}) \\ &= \sum_{q'} T_{q'}^{(k)} \mathcal{D}_{q' q'}^{(k)} (R^{-1}) = \sum_{q'} \mathcal{D}_{q' q'}^{(k)*} (R) T_{q'}^{(k)} \end{aligned}$$

آنچه تا اینجا بیان کردیم، نشان داد که چطور می توان با ضرب دو عملگر تانسوری، عملگرهای تانسوری با رتبه های بزرگ تر یا کوچک تر تشکیل داد. به علاوه، روش به کار رفته در تشکیل ضرب تانسوری دو تانسور کاملاً شبیه به روشی است که در آن با جمع دو تکانه ای زاویه ای، یک ویژه کت تکانه ای

زاویه‌ای تشکیل می‌دادیم. دقیقاً با قرارداد $m_{1,2} \rightarrow j_{1,2}, q_{1,2} \rightarrow k_{1,2}$ همان ضرایب کلبش - گوردن ظاهر می‌شوند.

آرایه‌های ماتریسی عملگرهای تانسوری، قضیه‌ی ویگنر - اِکارت

در مسأله‌ی برهم کنش یک میدان الکترومغناطیسی با اتم‌ها و هسته، غالباً لازم است که آرایه‌های عملگرهای تانسوری را با توجه به ویژه حالت‌های تکانه‌ی زاویه‌ای محاسبه کنیم. مثال‌های این مسأله را در فصل ۵ خواهیم دید. در حالت کلی، محاسبه‌ی این آرایه‌های ماتریسی کاری دشوار است. اما برخی از خواص این آرایه‌های ماتریسی را می‌توان تنها با استفاده از شرایط هندسی و سینماتیکی به دست آورد که اکنون راجع به آن‌ها بحث می‌کنیم.

نخست، قانون گزینش بسیار ساده‌ای برای m وجود دارد:

قانون گزینش m

$$\langle \alpha', j'm' | T_q^{(k)} | \alpha, jm \rangle = 0, \quad \text{unless } m' = q + m \quad (28-10-3)$$

اثبات: با استفاده از (۳-۱۰-۲۵ الف) داریم:

$$\begin{aligned} \langle \alpha', j'm' | ([J_z, T_q^{(k)}] - \hbar q T_q^{(k)}) | \alpha, jm \rangle &= [(m' - m)\hbar - \hbar q] \\ &\times \langle \alpha', j'm' | T_q^{(k)} | \alpha, jm \rangle = 0 \end{aligned}$$

بنابراین

$$\langle \alpha', j'm' | T_q^{(k)} | \alpha, jm \rangle = 0 \quad \text{unless } m' = q + m$$

روش دیگر برای دیدن این مطلب، توجه به خاصیت تبدیل $T_q^{(k)} | \alpha, jm \rangle$ تحت چرخش است. داریم:

$$\mathcal{D} T_q^{(k)} | \alpha, jm \rangle = \mathcal{D} T_q^{(k)} \mathcal{D}^\dagger \mathcal{D} | \alpha, jm \rangle \quad (29-10-3)$$

اکنون اگر \mathcal{D} را عملگر چرخش حول محور z در نظر بگیریم، داریم (روابط (۳-۱۰-۲۲ ب) و (۳-۱۰-۱۶) را ببینید):

$$\mathcal{D}(\hat{z}, \phi) T_q^{(k)} | \alpha, jm \rangle = e^{-iq\phi} e^{-im\phi} T_q^{(k)} | \alpha, jm \rangle \quad (30-10-3)$$

که بر $|\alpha', j'm'\rangle$ عمود است. مگر اینکه $m' = q + m$ باشد.

اکنون به سراغ اثبات یکی از مهم‌ترین قضایای موجود در مکانیک کوانتومی، یعنی قضیه‌ی

ویگنر - اِکارت می‌رویم.

قضیه‌ی ویگنر-اکارت: آرایه‌های ماتریسی عملگرهای تانسوری نسبت به ویژه‌کت‌های تکانه‌ی زاویه‌ای در رابطه‌ی زیر صدق می‌کنند:

$$\langle \alpha', j'm' | T_q^{(k)} | \alpha, jm \rangle = \langle jk; mq | jk; j'm' \rangle \frac{\langle \alpha' j' || T^{(k)} || \alpha j \rangle}{\sqrt{2j+1}} \quad (۳۱-۱۰-۳)$$

که در آن عنصر ماتریسی دوخطی مستقل از m و m' و q است.

قبل از این که به اثبات این قضیه پردازیم، بگذارید تا در مورد اهمیت آن صحبت کنیم. نخست، می‌بینیم که آرایه‌ی ماتریسی به شکل ضرب دو عامل نوشته شده است. عامل اول: ضریب کلش-گوردن برای جمع j و k است که این جمع به j' منجر می‌شود. این عامل تنها به شرایط هندسی، یعنی جهت گیری سیستم نسبت به محور Z ، وابسته است. این عامل به هیچ وجه به طبیعت خاص عملگر تانسوری بستگی ندارد. عامل دوم وابسته به شرط دینامیکی است. برای مثال، α می‌تواند عدد کوانتومی شعاعی باشد و به این ترتیب محاسبه‌ی آن وابسته به محاسبه‌ی انتگرال شعاعی است. به عبارت دیگر، این عامل کاملاً مستقل از اعداد کوانتومی مغناطیسی m ، m' و q است که جهت گیری سیستم فیزیکی در فضا را تعیین می‌کنند برای محاسبه‌ی $\langle \alpha', j'm' | T_q^{(k)} | \alpha, jm \rangle$ با ترکیب‌های متفاوت از m ، m' و q' تنها کافی است که آن را برای یک m ، m' و q' معین بدانیم. بقیه‌ی آن‌ها وابسته به شرایط هندسی هستند چون آن‌ها بر ضرایب کلش-گوردن عمودند. عامل تناسب مشترک $\langle \alpha' j' || T^{(k)} || \alpha j \rangle$ است که به هیچ نحو به شکل هندسی مسأله مربوط نیست.

سریعاً می‌توان با استفاده از قوانین گزینش جمع تکانه‌ی زاویه‌ای، قوانین گزینش آرایه‌ی ماتریس عملگر تانسوری را به دست آورد. در واقع از این الزام که ضریب کلش-گوردن نمی‌تواند صفر شود، قاعده‌ی گزینش m در (۳-۱۰-۲۸) به سرعت به دست می‌آید. البته قبل از آن رابطه‌ی مثلثی را داریم:

$$|j-k| \leq j' \leq j+k \quad (۳۲-۱۰-۳)$$

اکنون به اثبات قضیه می‌رسیم:

اثبات. با استفاده از (۳-۱۰-۲۵) ب) داریم:

$$(۳۳-۱۰-۳)$$

$$\langle \alpha', j'm' | [J_{\pm}, T_q^{(k)}] | \alpha, jm \rangle = \hbar \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} \langle \alpha', j'm' | T_{q \pm 1}^{(k)} | \alpha, jm \rangle$$

یا با استفاده از (۳-۵-۳۹) و (۳-۵-۴۰) داریم:

$$\begin{aligned} & \sqrt{(j' \pm m')(j' \mp m' + 1)} \langle \alpha', j', m' \mp 1 | T_q^{(k)} | \alpha, jm \rangle \\ &= \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle \alpha', j'm' | T_q^{(k)} | \alpha, j, m \pm 1 \rangle \\ &+ \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} \langle \alpha', j'm' | T_{q \pm 1}^{(k)} | \alpha, jm \rangle \end{aligned} \quad (۳-۱۰-۳۴)$$

این رابطه را با رابطه‌ی بازگشتی ضرایب کلبش - گوردن در (۳-۷-۴۹) مقایسه کنید. توجه کنید که اگر $j \rightarrow j_1$ و $m' \rightarrow m$ و $j \rightarrow j_2$ و $k \rightarrow j_2$ و $q \rightarrow m_2$ باشد، همانندی کاملی بین این دو رابطه برقرار می‌شود. هر دو رابطه‌ی بازگشتی به شکل $\sum_j a_{ij} x_j = 0$ هستند. یعنی به شکل معادلات همگن خطی درجه اول با ضرایب یکسان a_{ij} می‌باشند. به این جهت داریم:

$$\sum_j a_{ij} x_j = 0, \quad \sum_j a_{ij} y_j = 0 \quad (۳-۱۰-۳۵)$$

نمی‌توانیم منحصراً این رابطه را برای x_j (یا y_j) حل کنیم، اما می‌توانیم این روابط را به صورت نسبتی حل کنیم.

$$\frac{x_j}{x_k} = \frac{y_j}{y_k} \quad \text{یا} \quad x_j = c y_j \quad (۳-۱۰-۳۶)$$

که در آن c یک عامل نسبت جهانی است. توجه کنید که $\langle j_1 j_2; m_1, m_2 \pm 1 | j_1 j_2; jm \rangle$ در رابطه‌ی بازگشتی (۳-۷-۴۹) متناظر با $\langle \alpha', j'm' | T_{q \pm 1}^{(k)} | \alpha, jm \rangle$ است. می‌بینیم که:

$$\langle \alpha', j'm' | T_{q \pm 1}^{(k)} | \alpha, jm \rangle = \langle jk; m q \pm 1 | jk; j'm' \rangle \quad (۳-۱۰-۳۷)$$

که اثبات قضیه است.

اکنون اجازه دهید تا به دو مثال ساده از قضیه‌ی ویگنر - اکارت بپردازیم.

مثال ۱. تانسور مرتبه ۰، یعنی کمیت نرده‌ای $T_0^{(0)} = S$ آرایه‌ی ماتریسی یک عملگر اسکالر در رابطه‌ی زیر صدق می‌کند:

$$\langle \alpha', j'm' | S | \alpha, jm \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \frac{\langle \alpha' j' || S || \alpha j \rangle}{\sqrt{2j+1}} \quad (۳-۱۰-۳۸)$$

از آنجا که S روی $|\alpha, jm\rangle$ عمل می‌کند، شبیه به یک جمع تکانه زاویه‌ای صفر است. بنابراین عملگر نرده‌ای نمی‌تواند مقادیر m و j را تغییر دهد.

مثال ۲. عملگر نرده‌ای که در زبان تانسور کروی، یک تانسور مرتبه ۱ است. مؤلفه‌ی کروی V را می‌توان به صورت $V_q = \pm 1, 0$ نوشت. بنابراین قانون گزینش به شکل زیر است:

$$\Delta m \equiv m' - m = \pm 1, 0 \quad \Delta j \equiv j' - j = \left\{ \begin{array}{l} \pm 1 \\ 0 \end{array} \right. \quad (39-10-3)$$

به علاوه گذار $0 \rightarrow 0$ ممنوع است. این قانون گزینش از اهمیتی بنیادین در نظریه‌ی تابش برخوردار است. این همان قانون گزینش دوقطبی به دست آمده برای تابش فوتون‌ها در حد طول موج‌های بلند است.*

قضیه‌ی ویگنر-اِکارت (وقتی برای عملگرهای برداری به کار می‌رود) برای $j' = j$ شکل ساده‌ی خاصی را به دست می‌دهد که به دلایل واضحی اغلب به آن **قضیه‌ی تصویر** می‌گویند.

قضیه‌ی تصویر

$$\langle \alpha', jm | V_q | \alpha, jm \rangle = \frac{\langle \alpha', jm | \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} | \alpha, jm \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle jm | J_q | jm \rangle \quad (40-10-3)$$

که نظیر بحث ما پس از (۲۶-۱۰-۳) انتخاب می‌کنیم:

$$J_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (J_x \pm iJ_y) = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} J_{\pm}, \quad J_0 = J_z \quad (41-10-3)$$

اثبات: با توجه به (۲۶-۱۰-۳) داریم:

$$\begin{aligned} \langle \alpha', jm | \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} | \alpha, jm \rangle &= \langle \alpha', jm | (J_0 V_0 - J_{+1} V_{-1} - J_{-1} V_{+1}) | \alpha, jm \rangle \\ &= m\hbar \langle \alpha', jm | V_0 | \alpha, jm \rangle + \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \\ &\quad \times \langle \alpha', j, m-1 | V_{-1} | \alpha, jm \rangle \\ &\quad - \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \langle \alpha', j, m+1 | V_{+1} | \alpha, jm \rangle \\ &= c_{jm} \langle \alpha' | j | \mathbf{V} | \alpha \rangle \end{aligned}$$

(۴۲-۱۰-۳)

در آن از قضیه‌ی ویگنر-اِکارت (۳۱-۱۰-۳) استفاده کرده‌ایم که در آن c_{jm} مستقل از α و α' است و V و آرایه‌های ماتریسی $V_{0,\pm 1}$ همگی با آرایه‌ی ماتریسی دوخطی (که گاهی به آن **آرایه‌ی ماتریسی کاهش یافته** می‌گوییم) متناسب‌اند. به علاوه c_{jm} ، مستقل از m است چون $\mathbf{J} \cdot \mathbf{V}$ یک عملگر نرده‌ای است.

* قانون گزینش دیگری در بخش ۲ فصل ۴ مورد بحث قرار می‌گیرد. که این دو قانون به قوانین گزینش دو قطبی E1 منجر می‌شوند.

بنابراین می‌توانیم آن را تنها به شکل c_j بنویسیم. چون c_j مستقل از V است رابطه‌ی (۳-۱۰-۴۲) حتی وقتی که قرار دهیم $\mathbf{V} \rightarrow \mathbf{J}$ و $\alpha' \rightarrow \alpha$ همچنان برقرار است. یعنی:

$$\langle \alpha, jm | \mathbf{J}^2 | \alpha, jm \rangle = c_j \langle \alpha j | \mathbf{J} | \alpha j \rangle \quad (۳-۱۰-۴۳)$$

بازمی‌گردیم به قضیه‌ی ویگنر-اکارت و آن را بر V_q و J_q اعمال می‌کنیم. داریم:

$$\frac{\langle \alpha', jm' | V_q | \alpha, jm \rangle}{\langle \alpha, jm' | J_q | \alpha, jm \rangle} = \frac{\langle \alpha' j' | \mathbf{V} | \alpha j \rangle}{\langle \alpha j | \mathbf{J} | \alpha j \rangle} \quad (۳-۱۰-۴۴)$$

اما سمت راست (۳-۱۰-۴۴) شبیه به $\langle \alpha, jm | \mathbf{J}^2 | \alpha, jm \rangle / \langle \alpha', jm' | \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} | \alpha, jm \rangle$ در روابط (۳-۱۰-۴۲) و (۳-۱۰-۴۳) است. به علاوه، سمت چپ (۳-۱۰-۴۳) برابر با $j(j+1)\hbar$ است. بنابراین:

$$\langle \alpha', jm' | V_q | \alpha, jm \rangle = \frac{\langle \alpha', jm | \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} | \alpha, jm \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle jm' | J_q | jm \rangle \quad (۳-۱۰-۴۵)$$

به این ترتیب قضیه تصویر اثبات شد. \square

در بخش‌های بعدی کاربردهای این قضیه را خواهیم آورد.

مسائل

۱- ویژه مقادیر و ویژه بردارهای $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ را بیابید. فرض کنید یک الکترون در حالت اسپین $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ است. اگر s_y اندازه گرفته شود، احتمال آن که نتیجه $\hbar/2$ باشد، چقدر است؟

۲- ماتریسی 2×2 را در نظر بگیرید که به شکل زیر تعریف می‌شود

$$U = \frac{a_0 + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a}}{a_0 - i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a}}$$

که در آن a_0 عددی حقیقی و \mathbf{a} یک بردار سه بعدی با مؤلفه‌های حقیقی است.

الف. اثبات کنید که U یکانی و تک مدولی است.

ب. در حالت کلی، یک ماتریس 2×2 یکانی، تک مدولی یک چرخش در سه بعد ارائه می‌دهد.

محور و زاویه‌ی چرخش متناسب با U را بر حسب a_3, a_2, a_1, a_0 بیابید.

۳- هامیلتونی وابسته به اسپین یک سیستم الکترون-پوزیترون در حضور یک میدان مغناطیسی یکنواخت در جهت z را می‌توان به شکل زیر نوشت:

$$H = \mathbf{AS}^{(e^-)} \cdot \mathbf{S}^{(e^+)} + \left(\frac{eB}{mc} \right) (S_z^{(e^-)} - S_z^{(e^+)})$$

تابع اسپین این سیستم با $\chi_+^{(e^-)}\chi_-^{(e^+)}$ داده می شود.

الف. آیا این تابع در حد $A \rightarrow 0$ و $eB/mc \neq 0$ تابعی از H است؟ اگر جواب مثبت است ویژه مقدار

انرژی چیست؟ اگر جواب منفی است، مقدار انتظاری H چقدر است؟

ب. مسأله را در حالت مشابه با شرایط $eB/mc \rightarrow 0$ و $A \neq 0$ حل کنید.

۴- اسپین یک ذره را در نظر بگیرید. آرایه های ماتریسی

$$S_z(S_z + \hbar)(S_z - \hbar) \quad \text{و} \quad S_x(S_x + \hbar)(S_x - \hbar)$$

را محاسبه کنید.

۵- فرض کنید هامیلتونی یک جسم صلب به شکل

$$H = \frac{1}{2} \left(\frac{K_1^2}{I_1} + \frac{K_2^2}{I_2} + \frac{K_3^2}{I_3} \right)$$

است که در آن K تکانه ی زاویه ای در چارچوب جسم (دستگاه متصل به جسم) است. با استفاده از این عبارت معادله ی هایزنبرگ حرکت را به دست آورید و سپس معادله ی حرکت اویلر را در حد متناظر پیدا کنید.

۶- فرض کنید $U = e^{iG_3\alpha} e^{iG_2\beta} e^{iG_1\gamma}$ باشد، که در آن (α, β, γ) زوایای اویلر هستند. به طوری که U نمایان گر یک چرخش (α, β, γ) است. G_k در کدام روابط جابه جایی صدق می کند. G را با عملگرهای تکانه ی زاویه ای بسنجید.

۷- معنی معادله ی زیر چیست؟

$$U^{-1} A_k U = \sum R_{kl} A_l$$

که در آن سه مؤلفه ی A ماتریس هستند. با این معادله، نشان دهید که آرایه های ماتریسی $\langle m | A_k | n \rangle$ نظیر بردارها تبدیل می شوند.

۸- فرض کنید چرخش های متوالی اویلر به شکل زیر انجام شوند:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}^{(1/2)}(\alpha, \beta, \gamma) &= \exp\left(\frac{-i\sigma_3\alpha}{2}\right) \exp\left(\frac{-i\sigma_2\beta}{2}\right) \exp\left(\frac{-i\sigma_3\gamma}{2}\right) \\ &= \begin{pmatrix} e^{-i(\alpha+\gamma)/2} \cos \frac{\beta}{2} & -e^{-i(\alpha-\gamma)/2} \sin \frac{\beta}{2} \\ e^{i(\alpha-\gamma)/2} \sin \frac{\beta}{2} & e^{i(\alpha+\gamma)/2} \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

به خاطر مجموعه خواص چرخش، انتظار داریم که این عمل های متوالی چرخش با یک چرخش حول محوری با زاویه ی θ برابر باشد. θ را پیدا کنید.

۹- الف. یکی آنسامبل خالص را در نظر بگیرید که به‌طور یکنواخت از سیستم‌های اسپین $\frac{1}{2}$ یکسان ساخته شده است. فرض کنید که مقادیر انتظاری $\langle S_x \rangle$ و $\langle S_z \rangle$ و علامت $\langle S_y \rangle$ معلوم‌اند. نشان دهید که چطور می‌توانیم بردار حالت را مشخص کنیم. چرا لازم نیست که بزرگی $\langle S_y \rangle$ را بدانیم؟

ب- یک آنسامبل مرکب از سیستم‌های اسپین $\frac{1}{2}$ را در نظر بگیرید. فرض کنید که متوسط آنسامبلی $\langle S_x \rangle$ و $\langle S_y \rangle$ و $\langle S_z \rangle$ را می‌دانیم. نشان دهید که چطور می‌توانیم ماتریس چگالی 2×2 را تشکیل دهیم که مشخص‌کننده‌ی آنسامبل است؟

۱۰- الف. اثبات کنید که تحول زمانی عملگر چگالی ρ (در تصویر شرودینگر) با رابطه‌ی زیر داده می‌شود:

$$\rho(t) = \mathcal{U}(t, t_0)\rho(t_0)\mathcal{U}^\dagger(t, t_0)$$

ب. فرض کنید در $t=0$ یک آنسامبل خالص داریم. اثبات کنید که تا زمانی که تحول زمانی با معادله‌ی شرودینگر تخمین می‌شود این آنسامبل نمی‌تواند به یک آنسامبل مرکب تحویل یابد.

۱۱- آنسامبلی از سیستم‌های اسپین ۱ را در نظر بگیرید. اکنون ماتریس چگالی یک ماتریس 3×3 است. چه تعداد مؤلفه‌ی مستقل (حقیقی) لازم است تا ماتریس چگالی را مشخص کنیم؟ به‌جز $[S_x]$ برای مشخص کردن کامل $[S_y]$ و $[S_z]$ چه چیزهای دیگری را باید بدانیم؟

۱۲- ویژه‌کت تکانه‌ی زاویه‌ای $\langle j, m = m_{\max} = j \rangle$ را با زاویه‌ی بی‌نهایت کوچک ε پیرامون محور y می‌چرخانیم. بدون استفاده از شکل صریح تابع $d_m^{(j)}$ عبارتی برای احتمال حالت چرخیده‌ی جدید بیابید به‌طوری که این حالت در حالت اولیه‌ی سیستم تا جملات مرتبه‌ی ε^2 یافت شود.

۱۳- نشان دهید که ماتریس 3×3 G_i که آرایه‌های آن با عبارت زیر داده می‌شوند:

$$(G_i)_{jk} = -i\hbar \varepsilon_{ijk}$$

که در آن j و k اندیس‌های سطر و ستون‌اند و در روابط جابه‌جایی تکانه‌ی زاویه‌ای صدق می‌کنند. مفهوم فیزیکی (یا هندسی) ماتریس تبدیل که G_i را به نمایش‌های معمولی 3×3 دیگر عملگر تکانه‌ی زاویه‌ای J_i می‌برد چیست؟ J_i در این جا قطری است. نتایج خود را برای

$$\mathbf{V} \rightarrow \mathbf{V} + \hat{n} \delta\phi \times \mathbf{V}$$

تحت یک چرخش بی‌نهایت کوچک بازگو کنید. (توجه: این مسأله می‌تواند در فهم اسپین فوتون مؤثر باشد.)

۱۴- الف. فرض کنید که \mathbf{J} تکانه‌ی زاویه‌ی است. می‌توان این نماد را بیان‌گر تکانه‌ی زاویه‌ای مداری \mathbf{L} و اسپین \mathbf{S} و یا $\mathbf{J}_{\text{total}}$ در نظر گرفت. با استفاده از این واقعیت که $J_{\pm} \equiv J_x \pm iJ_y$ ، J_x ، J_y ، J_z در روابط جابه‌جایی تکانه‌ی زاویه‌ای معمولی صدق می‌کنند اثبات کنید که:

$$\mathbf{J}^2 = J_z^2 + J_+ J_- - \hbar J_z$$

ب. با استفاده از قسمت الف (یا چیزهای دیگر) عبارتی "آشنا" برای ضریب c_- که در

$$J_- \psi_{jm} = c_- \psi_{j, m-1}$$

ظاهر می‌شود، بیابید.

۱۵- تابع موج یک ذره که با پتانسیل کروی متقارن $V(r)$ درگیر است به صورت زیر داده می‌شود:

$$\psi(\mathbf{x}) = (x + y + 3z)f(r)$$

الف) آیا ψ یک ویژه تابع \mathbf{L}^2 است؟ اگر جواب مثبت است، مقدار l چقدر است؟ اگر جواب منفی است، مقادیر ممکن l ، وقتی که \mathbf{L}^2 اندازه‌گیری می‌شوند، کدام‌اند؟

ب) احتمال آن که ذره در حالت‌های m_l مختلف یافت شود چقدر است؟

ج) فرض کنید که $\psi(\mathbf{x})$ یک ویژه تابع انرژی با ویژه مقدار E باشد. تعیین کنید که چطور می‌توان $V(r)$ را یافت؟

۱۶- یک ذره در یک پتانسیل متقارن کروی در ویژه حالتی از \mathbf{L}^2 و L_z به ترتیب با ویژه مقادیر $\hbar^2 l(l+1)$ و $m\hbar$ قرار دارد. اثبات کنید که مقادیر انتظاری بین حالت‌های $|lm\rangle$ در روابط زیر صدق می‌کنند:

$$\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0, \quad \langle L_x^2 \rangle = \langle L_y^2 \rangle = \frac{l(l+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2}{2}$$

این نتایج را به طور نیمه کلاسیکی تفسیر کنید.

۱۷- فرض کنید مقدار نیم صحیح l ، مثلاً $\frac{1}{2}$ ، برای تکانه‌ی زاویه‌ای مداری مجاز باشد. از

$$L_+ Y_{1/2, 1/2}(\theta, \phi) = 0$$

به طور معمول، درمی‌یابیم که:

$$Y_{1/2, 1/2}(\theta, \phi) \propto e^{i\phi/2} \sqrt{\sin\theta}$$

الف- با اعمال L_- بر $Y_{1/2, -1/2}(\theta, \phi)$ و

ب- با استفاده از $L_- Y_{1/2, -1/2}(\theta, \phi) = 0$

سعی کنید که $Y_{1/2, 1/2}(\theta, \phi)$ را تشکیل دهید. نشان دهید که این دو روش به جواب‌های متناقضی منتهی می‌شوند. (این یکی از نشانه‌های این است که مقدار نیم صحیح برای تکانه‌ی زاویه‌ای مجاز نیست.)

۱۸- ویژه حالت تکانه‌ی زاویه‌ای مداری را به صورت $|l=2, m=0\rangle$ فرض می‌کنیم. تصور کنید که این حالت را به اندازه‌ی زاویه‌ی β حول محور y می‌چرخانیم. احتمال اینک حالت جدید در $m=0$ و $m=\pm 1$ و $m=\pm 2$ یافت شود چقدر است. (هماهنگ‌های کروی برای $l=0$ و $l=1$ و $l=2$ که در پیوست الف آمده است، ممکن است مفید واقع شود.)

۱۹- معنای فیزیکی عملگرهای زیر در روش شرودینگر چیست؟

$$K_+ \equiv a_+^\dagger a_-^\dagger \quad \text{و} \quad K_- \equiv a_+ a_-$$

عناصر ماتریسی غیرصفر K_\pm را بیابید.

۲۰- می‌خواهیم با جمع تکانه‌های زاویه‌ای $j_1=1$ و $j_2=1$ حالت‌های $j=2, 1, 0$ را بسازیم. با استفاده از دو روش عملگر نردبانی و رابطه‌ی بازگشتی، همه‌ی (۹) ویژه حالت $\{|j, m\rangle\}$ را بر حسب $|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$ به صورت زیر بنویسید:

$$|j=1, m=1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+, 0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|0, +\rangle, \dots$$

که $+$ و 0 به ترتیب نشان‌دهنده‌ی $m_{1,2}=1, 0$ هستند.

۲۱- الف. رابطه زیر را برای هر j (صحیح یا نیم صحیح) محاسبه کنید:

$$\sum_{m=-j}^j |d_{mm}^{(j)}(\beta)|^2 m$$

پس جواب خود را برای $j = \frac{1}{2}$ بیازمایید.

ب- برای هر j اثبات کنید که:

$$\sum_{m=-j}^j m^2 |d_{mm}^{(j)}(\beta)|^2 = \frac{1}{2} j(j+1) \sin^2 \beta + m^2 \frac{1}{2} (3 \cos^2 \beta - 1)$$

[راهنمایی: به راه‌های زیادی می‌توان این را اثبات کرد. به عنوان مثال، می‌توانید با استفاده از زبان

تانسور کروی (تقلیل ناپذیر) خواص چرخش J_z^2 را بیازمایید]

۲۲- الف. سیستمی با $j=1$ را در نظر بگیرید. به طور صریح

$$\langle j=1, m' | J_y | j=1, m \rangle$$

را به شکل ماتریس 3×3 بنویسید.

ب- نشان دهید که تنها برای $j=1$ منطقی است که $e^{-iJ_y \beta / \hbar}$ را با

$$1 - i \left(\frac{J_y}{\hbar} \right) \sin \beta - \left(\frac{J_y}{\hbar} \right)^2 (1 - \cos \beta)$$

جایگزین کرد.

ج- با استفاده از قسمت (ب) اثبات کنید که:

$$d^{(j=1)}(\beta) = \begin{pmatrix} \left(\frac{1}{2}\right)(1 + \cos \beta) & -\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) \sin \beta & \left(\frac{1}{2}\right)(1 - \cos \beta) \\ \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) \sin \beta & \cos \beta & -\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) \sin \beta \\ \left(\frac{1}{2}\right)(1 - \cos \beta) & \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) \sin \beta & \left(\frac{1}{2}\right)(1 + \cos \beta) \end{pmatrix}$$

۲۳- آرایه‌ی ماتریس $\langle \alpha_2 \beta_2 \gamma_2 | J_3^2 | \alpha_1 \beta_1 \gamma_1 \rangle$ را برحسب یک سری از

$$\mathcal{D}'_{mn}(\alpha\beta\gamma) = \langle \alpha\beta\gamma | jmn \rangle$$

بنویسید.

۲۴- سیستمی را در نظر بگیرید که از دو ذره با اسپین $\frac{1}{2}$ ساخته شده است. مشاهده گر A در اندازه‌گیری خود، مؤلفه‌های اسپینی یک ذره را اندازه می‌گیرد (S_{1x} و S_{1z} و به همین ترتیب). در حالی که مشاهده گر B مؤلفه‌های اسپینی ذره‌ی دیگر را اندازه می‌گیرد. فرض کنید که سیستم در حالت اسپین یگانه قرار گرفته است یعنی $S_{\text{total}} = 0$ است.

الف- احتمال این که مشاهده گر A زمانی که مشاهده گر B هنوز اندازه‌گیری انجام نداده

است، $S_{1z} = \hbar/2$ را به دست آورد چقدر است؟ مسأله را برای $S_{1x} = \hbar/2$ نیز حل کنید.

ب. مشاهده گر B اسپین ذره‌ی ۲ را با اطمینان در حالت $s_{2z} = \hbar/2$ ثبت می‌کند. چه چیزی را می‌توانیم در مورد حاصل اندازه‌گیری مشاهده گر A ، نتیجه بگیریم (i) وقتی که s_{1z} را اندازه می‌گیرد (ii) وقتی s_{1x} را اندازه می‌گیرد. جواب خود را توضیح دهید.

۲۵- یک تانسور کروی مرتبه ۱ (یعنی یک بردار) را در نظر بگیرید:

$$V_{\pm 1}^{(1)} = \mp \frac{V_x \pm iV_y}{\sqrt{2}}, \quad V_0^{(1)} = V_z$$

با استفاده از عبارت مربوط به $d^{(j=1)}$ که در مسأله‌ی ۲۲ داده شده است رابطه‌ی زیر را محاسبه کنید:

$$\sum_{q'} d_{qq'}^{(1)}(\beta) V_{q'}^{(1)}$$

و نشان دهید که جواب شما دقیقاً همان چیزی است که از خواص تبدیلی $V_{x,y,z}$ تحت چرخش حول محور y انتظار می‌رود.

۲۶- الف. یک تانسور کروی مرتبه ۱ تشکیل دهید که از دو بردار $\mathbf{U} = (U_x, U_y, U_z)$ و $\mathbf{V} = (V_x, V_y, V_z)$ نتیجه می‌شود. $T_{\pm 1,0}^{(1)}$ را صریحاً بر حسب \mathbf{U} و \mathbf{V} بنویسید.

ب. یک تانسور کروی مرتبه ۲ تشکیل دهید که از دو بردار \mathbf{U} و \mathbf{V} نتیجه می‌شود. $T_{\pm 2, \pm 1, 0}^{(2)}$ را صریحاً بر حسب $U_{x,y,z}$ و $V_{x,y,z}$ بنویسید.

۲۷- ذره‌ی بدون اسپینی را در نظر بگیرید که به یک مرکز ثابت با نیروی پتانسیل مرکزی مقید شده است. الف. تا جایی که ممکن است، آرایه‌های ماتریسی زیر را مشخص کنید:

$$\langle n', l', m' | \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (x \pm iy) | n, l, m \rangle \quad \text{and} \quad \langle n', l', m' | z | n, l, m \rangle$$

تنها از قضیه ویگنر-اکارت استفاده کنید. مطمئن شوید که تحت چه شرایطی آرایه‌های ماتریسی صفر نمی‌شوند؟

ب. مسأله را با استفاده از تابع موج $\psi(\mathbf{x}) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi)$ دوباره حل کنید.

۲۸- الف. xy و xz و $(x^2 - y^2)$ را بر حسب مؤلفه‌های تانسور کروی (تقلیل ناپذیر) مرتبه ۲ بنویسید.

ب- مقدار انتظاری

$$Q \equiv e \langle \alpha, j, m = j | (3z^2 - r^2) | \alpha, j, m = j \rangle$$

به تکانه‌ی چهار قطبی معروف است. عبارت

$$e\langle \alpha, j, m' | (x^2 - y^2) | \alpha, j, m = j \rangle$$

(که در آن $m' = j, j-1, j-2, \dots$ است) را برحسب Q و ضرایب کلبش-گوردن مناسب محاسبه کنید.

۲۹- یک هسته با اسپین $\frac{3}{2}$ در مبدا قرار گرفته و با یک میدان الکتریکی غیریکنواخت خارجی درگیر است. برهم کنش چهار قطبی الکتریکی اصلی را می‌توان با عبارت زیر نشان داد:

$$H_{\text{int}} = \frac{eQ}{2s(s-1)\hbar^2} \left[\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_0 S_x^2 + \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right)_0 S_y^2 + \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} \right)_0 S_z^2 \right]$$

که در آن ϕ ، پتانسیل الکتروستاتیکی است که در معادله‌ی لاپلاس صدق می‌کند و محورهای مختصات طوری انتخاب می‌شوند که:

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} \right)_0 = \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial y \partial z} \right)_0 = \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial z} \right)_0 = 0$$

نشان دهید که انرژی برهم کنشی را می‌توان به شکل زیر نوشت:

$$A(3S_z^2 - S^2) + B(S_+^2 + S_-^2)$$

و A و B را برحسب $(\partial^2 \phi / \partial x^2)_0$ و جملات نظیر آن بیان کنید. ویژه‌کت‌های انرژی (برحسب $|m\rangle$ که در آن $m = \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2}$ است) را مشخص کنید. ویژه‌مقادیر متناظر با آن‌ها را بیابید. آیا تبهگنی وجود دارد؟

فصل چهارم

تقارن در دینامیک کوانتومی

پس از بحث مفصل در مورد نظریه‌ی چرخش، در موقعیتی هستیم که به‌طور کلی تر ارتباط بین تقارن‌ها، تبهگنی و قوانین پایستگی را مورد بررسی قرار دهیم. این بحث بسیار مهم را تاکنون عمداً به تأخیر انداخته‌ایم تا بتوانیم به‌عنوان یک مثال، از تقارن چرخشی در فصل ۳ استفاده کنیم.

۱.۴ تقارن‌ها، قوانین پایستگی و تبهگنی

تقارن‌ها در فیزیک کلاسیک

با مقدمه‌ی بنیادینی در مورد مفهوم تقارن و قانون پایستگی در فیزیک کلاسیک، بحث را شروع می‌کنیم. فرمول‌بندی لاگرانژی مکانیک کوانتومی را با لاگرانژی L ، که تابعی از مختصه‌ی تعمیم‌یافته q_i و سرعت تعمیم‌یافته‌ی \dot{q}_i متناظر با آن بود، آغاز کردیم. اگر L تحت انتقال

$$q_i \rightarrow q_i + \delta q_i \quad (1-1-4)$$

بدون تغییر بماند، آنگاه باید داشته باشیم:

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \quad (2-1-4)$$

آنگاه با استفاده از معادله‌ی لاگرانژ، $0 = \partial L / \partial q_i - d/dt (\partial L / \partial \dot{q}_i)$ داریم:

$$\frac{dp_i}{dt} = 0 \quad (3-1-4)$$

که تکانه کانونیک به‌شکل زیر تعریف می‌شود:

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad (4-1-4)$$

بنابراین اگر L تحت جابه‌جایی (۴-۱-۱) بدون تغییر باقی بماند، آنگاه تکانه‌ی کانونیک متناظر با q_i کمیتی پایستار است. به همین صورت، در فرمول‌بندی هامیلتونی مبتنی بر H که خود تابعی از q_i به p_i است، داریم:

$$\frac{dp_i}{dt} = 0 \quad (۴-۱-۵)$$

هرگاه

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} = 0 \quad (۴-۱-۶)$$

بنابراین اگر هامیلتونی صریحاً وابسته به q_i نباشد، که راه دیگری برای بیان مقارن بودن H تحت تبدیل $q_i \rightarrow q_i + \delta q_i$ است، آنگاه ما یک کمیت پایستار داریم.

تقارن در مکانیک کوانتومی

تا به اینجا آموخته‌ایم که در مکانیک کوانتومی یک عملگر یکانی، مثلاً \mathcal{S} ، مانند چرخش و انتقال وجود دارد. مرسوم است که به \mathcal{S} عملگر تقارنی گفته می‌شود، صرف نظر از اینکه خود سیستم تحت عمل تقارنی متناظر با \mathcal{S} ، مقارن است یا نه. به علاوه، آموخته‌ایم که عمل‌های تقارنی که با تبدیل یکانی تفاوت بسیار اندکی دارند را به صورت زیر می‌نویسیم.

$$\mathcal{S} = 1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} G \quad (۴-۱-۷)$$

که در آن G تولیدکننده‌ی هرمیتی عملگر تقارن مورد بحث است. حال اجازه دهید که فرض کنیم H تحت تبدیل \mathcal{S} ناوردا است. بنابراین داریم:

$$\mathcal{S}^\dagger H \mathcal{S} = H \quad (۴-۱-۸)$$

اما این عبارت معادل آن است که:

$$[G, H] = 0 \quad (۴-۱-۹)$$

با توجه به معادله‌ی حرکت هایزنبرگ داریم:

$$\frac{dG}{dt} = 0 \quad (۴-۱-۱۰)$$

بنابراین G یک ثابت حرکت است. به عنوان نمونه اگر H تحت تبدیل انتقال ناوردا بماند، آنگاه تکانه ثابت حرکت است. اگر H تحت تبدیل چرخش ناوردا باشد، آنگاه تکانه‌ی زاویه‌ای یک ثابت حرکت است.

آموخته‌اند است که از نقطه نظر یک ویژه‌کت G وقتی که G با H جابه‌جا می‌شود به ارتباط بین رابطه‌ی (۹-۱-۴) و پایستگی G پردازیم. فرض کنید که در t_0 ، سیستم یک ویژه‌حالت G باشد. آنگاه کت در یک زمان بعد با اعمال عملگر تحول زمانی به دست می‌آید:

$$|g', t_0; t\rangle = U(t, t_0)|g'\rangle \quad (۱۱-۱-۴)$$

که این نیز یک ویژه‌کت G با همان ویژه مقدار g' است. به عبارت دیگر، یکبار دیگر این کت، ویژه‌کت G می‌شود. این ویژه‌کت همواره یک ویژه‌کت G با ویژه مقدار یکسان است. اثبات این مسأله بی‌نهایت ساده است. تنها کافی است تشخیص دهید که (۹-۱-۴) و (۱۰-۱-۴) به این می‌انجامند که G با عملگر تحول زمانی جابه‌جا شود. داریم:

$$G[U(t, t_0)|g'\rangle] = U(t, t_0)G|g'\rangle = g'[U(t, t_0)|g'\rangle] \quad (۱۱-۱-۴)$$

تبهگنی

اکنون بگذارید به مفهوم تبهگنی پردازیم. هر چند تبهگنی ممکن است در سطح مکانیک کلاسیکی نیز مطرح شود (برای مثال در بحث مدارهای بسته (بدون حرکت تقدیمی) در مسأله‌ی کپلر (گلدشتاین ۱۹۸۰)) این مفهوم نقش بسیار مهم‌تری را در مکانیک کوانتومی ایفا می‌کند. اکنون اجازه دهید فرض کنیم که:

$$[H, \mathcal{S}] = 0 \quad (۱۳-۱-۴)$$

برای هر عملگر تقارنی و $|n\rangle$ یک ویژه‌کت انرژی با ویژه مقدار E_n وجود دارد. بنابراین $|\mathcal{S}|n\rangle$ همواره یک ویژه‌کت انرژی با انرژی یکسان است. چون:

$$H(\mathcal{S}|n\rangle) = \mathcal{S}H|n\rangle = E_n(\mathcal{S}|n\rangle) \quad (۱۴-۱-۴)$$

فرض کنید که $|n\rangle$ و $|\mathcal{S}|n\rangle$ حالت‌های متفاوتی را ارائه کنند. آنگاه این دو حالت، انرژی یکسانی دارند. یعنی این دو تبهگن هستند. اغلب \mathcal{S} با پارامترهای پیوسته، مثلاً λ ، مشخص می‌شود که در چنین موردی تمام حالت‌هایی که به شکل $|\mathcal{S}(\lambda)|n\rangle$ هستند دارای انرژی یکسانی می‌باشند.

حال به‌طور خاص چرخش را در نظر می‌گیریم. فرض می‌کنیم که هامیتونی تحت چرخش ناوردا است، بنابراین:

$$[\mathcal{D}(R), H] = 0 \quad (۱۵-۱-۴)$$

که الزاماً منجر می شود به:

$$[\mathbf{J}, H] = 0, \quad [\mathbf{J}^2, H] = 0 \quad (۱۶-۱-۴)$$

می توانیم ویژه کت های همزمان H ، \mathbf{J}^2 و J_z را با $|n; j, m\rangle$ نشان دهیم. استدلال های ما به این منجر می شود که تمام حالت های که به شکل

$$\mathcal{D}(R)|n; j, m\rangle \quad (۱۷-۱-۴)$$

هستند، انرژی یکسانی دارند. در فصل ۳ دیدیم که تحت چرخش مقادیر مختلف m با هم مخلوط می شوند. در حالت کلی $\mathcal{D}(R)|n; j, m\rangle$ یک ترکیب خطی از $2j+1$ حالت مستقل است. صریحاً

$$\mathcal{D}(R)|n; j, m\rangle = \sum_m |n; j, m'\rangle \mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R) \quad (۱۸-۱-۴)$$

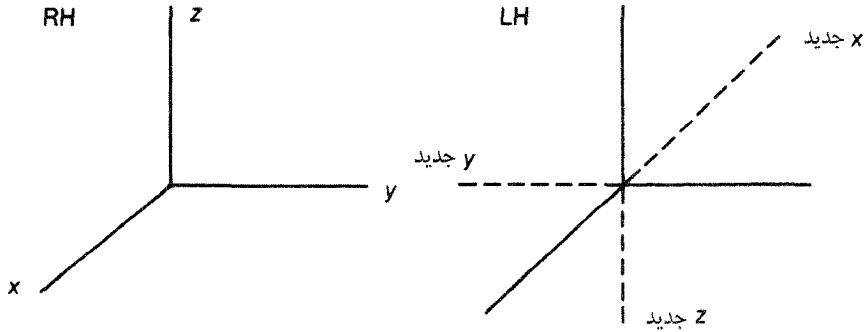
و با تغییر پارامتر پیوسته ای که عملگر چرخش $\mathcal{D}(R)$ را مشخص می کنید، می توانیم ترکیب خطی دیگری از $|n; j, m'\rangle$ داشته باشیم. اگر تمام حالت هایی که شکل $\mathcal{D}(R)|n; j, m\rangle$ را دارند با $\mathcal{D}(R)$ های دلخواه دارای انرژی یکسان باشند، آنگاه کاملاً منطقی است که هر کدام از $|n; j, m\rangle$ ها با m های متفاوت باید انرژی یکسانی داشته باشند. بنابراین تبهگنی در این جا $(2j+1)$ تایی یعنی درست برابر با مقادیر ممکن برای m است. این نکته از این جا نیز مشهود است که حالت های بدست آمده از تأثیر متوالی J_{\pm} ، که با H جابه جا می شوند و به صورت $|n; jm\rangle$ هستند، دارای انرژی یکسانی می باشند.

به عنوان یک کاربرد، فرض کنید که پتانسیل کامل یک الکترون اتمی به صورت $V(r) + V_{LS}(r)\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$ باشد. از آن جا که $\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$ هر دو ناوردای چرخشی هستند، انتظار داریم که برای هر کدام از ترازهای اتمی تبهگنی $(2j+1)$ تایی وجود داشته باشد. از طرف دیگر، فرض کنید که یک میدان الکتریکی یا مغناطیسی مثلاً در جهت z وجود دارد. تقارن چرخشی به طور آشکار شکسته می شود. به عنوان یک نتیجه دیگر انتظار نداریم که تبهگنی $(2j+1)$ تایی وجود داشته باشد و حالت هایی که با مقادیر مختلف m مشخص می شوند دیگر انرژی یکسانی ندارند. بوجود آمدن این جدا شدگی حالت ها را در فصل ۵ از نظر می گذرانیم.

۲.۴ تقارن های گسسته، پاریته یا وارونی فضایی

تا کنون عملگرهای تقارنی پیوسته را مدنظر قرار دادیم، یعنی به عملگرهایی پرداختیم که با اعمال پی درپی عملگرهای تقارنی بی نهایت کوچک به دست می آمدند. اما همه ی عملگرهای تقارنی مفید در مکانیک

کوانتومی الزاماً از این دست نیستند. در این بخش سه عملگر تقارنی را مورد بررسی قرار می‌دهیم که برخلاف عملگرهای پیوسته، گسسته‌اند. این عملگرها عبارتند از: پاریته، انتقال شبکه و برگشت زمان.



شکل ۱-۴: سیستم‌های راست‌گرد (RH) و چپ‌گرد (LH)

اولین عملگری که به آن می‌پردازیم پاریته یا وارونی فضایی است. عملگر پاریته همان‌طور که در شکل ۱-۴ نشان داده شده است بر روی انتقال در سیستم مختصات اثر کرده و سیستم راست‌گرد را به سیستم چپ‌گرد تبدیل می‌کند. حالت وارونه‌ی فضایی $|\alpha\rangle$ را با اثر دادن عملگر یکانی π که به عملگر پاریته مشهور است به شکل زیر به دست می‌آوریم:

$$|\alpha\rangle \rightarrow \pi|\alpha\rangle \quad (1-2-4)$$

لازم است که مقدار انتظاری x ، با توجه به حالت وارونه فضا، تغییر علامت دهد.

$$\langle \alpha | \pi^\dagger x \pi | \alpha \rangle = -\langle \alpha | x | \alpha \rangle \quad (2-2-4)$$

این الزامی کاملاً منطقی است. اگر داشته باشیم:

$$\pi^\dagger x \pi = -x \quad (3-2-4)$$

یا

$$x \pi = -\pi x \quad (4-2-4)$$

این تغییر علامت صورت می‌گیرد. در دو رابطه‌ی بالا از این واقعیت بهره گرفتیم که π یکانی است. به عبارت دیگر x و π باید پاد جابه‌جاگر باشند.

یک ویژه‌کت عملگر مکان چگونه تحت پاریته تبدیل می‌یابد؟ ادعا می‌کنیم که:

$$\pi |x'\rangle = e^{i\delta} |-x'\rangle \quad (5-2-4)$$

که در آن عامل فاز است (δ حقیقی است). برای اثبات این ادعا بگذارید به رابطه‌ی زیر توجه کنیم:

$$\mathbf{x}\pi|\mathbf{x}'\rangle = -\pi\mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle = (-\mathbf{x}')\pi|\mathbf{x}'\rangle \quad (۶-۲-۴)$$

این معادله به ما می‌گوید که $\pi|\mathbf{x}'\rangle$ یک ویژه‌کت عملگر \mathbf{x} با ویژه مقدار $-\mathbf{x}'$ است، بنابراین صرف نظر از یک عامل فاز این $\pi|\mathbf{x}'\rangle$ باید با ویژه‌کت حالت $|\mathbf{x}'\rangle$ یکسان باشد.

مرسوم است که بنا به قرارداد $e^{i\delta} = 1$ گرفته شود. با وارد کردن این قرارداد در (۶-۲-۴) داریم: $\pi^2|\mathbf{x}'\rangle = |\mathbf{x}'\rangle$. بنابراین $\pi^2 = 1$ خواهد بود. یعنی با دو بار اعمال پاریته به حالتی مشابه با حالت اولیه برمی‌گردیم. با استفاده از (۶-۲-۴) به‌سادگی دیده می‌شود که π نه تنها یکانی بلکه هرمیتی نیز هست:

$$\pi^{-1} = \pi^\dagger = \pi \quad (۷-۲-۴)$$

ویژه مقدار آن تنها می‌تواند $+1$ یا -1 باشد.

درباره‌ی عملگر تکانه چه می‌توان گفت؟ تکانه‌ی \mathbf{p} برابر با $m d\mathbf{x}/dt$ است، بنابراین طبیعی است که انتظار داشته باشیم تکانه نیز همچون پاریته، فرد باشد. بحث رضایت بخش‌تر وقتی حاصل می‌شود که عملگر تکانه را به‌عنوان تولیدکننده‌ی انتقال در نظر بگیریم. چون همانند شکل ۴-۲ انتقال و سپس اعمال پاریته معادل با اعمال پاریته و سپس عمل انتقال در جهت مخالف است داریم:

$$\pi\mathcal{T}(d\mathbf{x}') = \mathcal{T}(-d\mathbf{x}')\pi \quad (۸-۲-۴)$$

$$\pi\left(1 - \frac{i\mathbf{p}\cdot d\mathbf{x}'}{\hbar}\right)\pi^\dagger = 1 + \frac{i\mathbf{p}\cdot d\mathbf{x}'}{\hbar} \quad (۹-۲-۴)$$

داریم:

$$\{\pi, \mathbf{p}\} = 0 \quad \text{or} \quad \pi^\dagger \mathbf{p} \pi = -\mathbf{p} \quad (۱۰-۲-۴)$$

اکنون می‌توانیم راجع به رفتار \mathbf{J} تحت پاریته بحث کنیم. ابتدا، روشن است که برای تکانه‌ی زاویه‌ای مداری داریم.

$$[\pi, \mathbf{L}] = 0 \quad (۱۱-۲-۴)$$

چون

$$\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p} \quad (۱۲-۲-۴)$$

هم \mathbf{x} و هم \mathbf{p} تحت تأثیر پاریته فرد هستند. اما برای اینکه نشان دهیم این خاصیت برای اسپین نیز برقرار است بهتر است از این واقعیت استفاده کنیم که \mathbf{J} تولیدکننده‌ی چرخش است. برای یک ماتریس 3×3 متعامد داریم.

$$\mathbf{R}(\text{پاریته}) \mathbf{R}(\text{چرخش}) = \mathbf{R}(\text{چرخش}) \mathbf{R}(\text{پاریته}) \quad (۱۳-۲-۴)$$

که در آن به طور صریح:

$$R(\text{پارته}) = \begin{pmatrix} -1 & & 0 \\ & -1 & \\ 0 & & -1 \end{pmatrix} \quad (14-2-4)$$

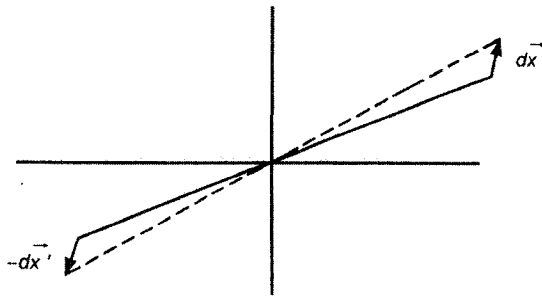
یعنی عملگرهای پارته و چرخش جابه‌جا می‌شوند. در مکانیک کوانتومی طبیعی است که به‌عنوان اصل موضوعه بپذیریم که یک چنین رابطه‌ی متناظری برای عملگرهای یکانی وجود دارد. بنابراین:

$$\pi \mathcal{D}(R) = \mathcal{D}(R) \pi \quad (15-2-4)$$

که در آن $\mathcal{D}(R) = 1 - i\mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{n}} \varepsilon / \hbar$ است. از (15-2-4) نتیجه می‌شود که:

$$[\pi, \mathbf{J}] = 0 \quad \text{or} \quad \pi^\dagger \mathbf{J} \pi = \mathbf{J} \quad (16-2-4)$$

از این رابطه و رابطه‌ی (11-2-4) نتیجه می‌شود که عملگر اسپین (که با $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ داده می‌شود) همواره همانند \mathbf{L} ، تبدیل می‌یابد.



شکل ۲-۴: انتقال و بعد پارته و برعکس

\mathbf{x} و \mathbf{J} تحت چرخش به روش یکسانی تبدیل می‌یابند. بنابراین هر دوی این‌ها بردار یا تانسورهای کروی مرتبه ۱ هستند. اما، x (یا p) تحت پارته فرد هستند [(3-2-4) و (10-2-4) را ببینید]. در حالی که \mathbf{J} تحت پارته زوج است [(16-2-4) را ببینید]. بردارهایی که تحت تأثیر پارته فرد هستند بردارهای قطبی نام دارند، اما بردارهایی که تحت تأثیر پارته زوج‌اند، بردارهای محوری یا شبه بردار نامیده می‌شوند.

اکنون بگذارید تا عملگرهایی نظیر $\mathbf{S} \cdot \mathbf{x}$ را در نظر بگیریم. هنوز تحت وارونی فضایی داریم:

$$\pi^{-1} \mathbf{S} \cdot \mathbf{x} \pi = -\mathbf{S} \cdot \mathbf{x} \quad (17-2-4)$$

در حالی که برای کمیت‌های نرده‌ای معمولی داریم:

$$\pi^{-1} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \pi = \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad (18-2-4)$$

و به همین ترتیب، عملگر $\mathbf{S} \cdot \mathbf{x}$ مثالی از یک شبه‌نرده‌ای است.

تابع موج، تحت پاریته

حال اجازه دهید تا به خواص پاریته‌ی توابع موج بنگریم. نخست، ψ را تابع موج یک ذره‌ی بدون اسپین قرار می‌دهیم که کت حالت آن با $|\alpha\rangle$ نشان داده می‌شود:

$$\psi(\mathbf{x}') = \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \quad (۱۹-۲-۴)$$

تابع موج حالت وارونه فضا که با کت حالت $|\pi|\alpha\rangle$ نشان داده می‌شود، برابر است با:

$$\langle \mathbf{x}' | \pi | \alpha \rangle = \langle -\mathbf{x}' | \alpha \rangle = \psi(-\mathbf{x}') \quad (۲۰-۲-۴)$$

$|\alpha\rangle$ را یک ویژه‌کت پاریته در نظر بگیرید. قبلاً دیدیم که ویژه مقادیر پاریته باید ± 1 باشند. بنابراین

$$\pi |\alpha\rangle = \pm |\alpha\rangle \quad (۲۱-۲-۴)$$

اکنون بگذارید به ویژه توابع متناظر با آن‌ها نگاه کنیم.

$$\langle \mathbf{x}' | \pi | \alpha \rangle = \pm \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \quad (۲۲-۲-۴)$$

اما همچنین داریم:

$$\langle \mathbf{x}' | \pi | \alpha \rangle = \langle -\mathbf{x}' | \alpha \rangle \quad (۲۳-۲-۴)$$

بنابراین زوج یا فرد بودن حالت $|\alpha\rangle$ تحت پاریته وابسته به این است که کدام یک از توابع موج متناظر برقرار باشد:

$$\psi(-\mathbf{x}') = \pm \psi(\mathbf{x}') \begin{cases} \text{پاریته‌ی زوج} \\ \text{پاریته‌ی فرد} \end{cases} \quad (۲۴-۲-۴)$$

همه‌ی توابع فیزیکی پاریته‌ی مشخصی همچون (۲۴-۲-۴) ندارند. برای مثال، ویژه‌کت تکانه را در نظر بگیرید. عملگر تکانه با عملگر پاریته پادجابه‌جاگر است. بنابراین انتظار نمی‌رود که ویژه‌کت تکانه، ویژه‌کت پاریته نیز باشد. به‌سادگی می‌توان دید که موج تحت، که همان تابع موج یک ویژه‌کت تکانه محسوب می‌شود، در رابطه‌ی (۲۴-۲-۴) صدق نمی‌کند.

انتظار می‌رود که ویژه‌کت تکانه‌ی زاویه‌ای، ویژه‌کت پاریته هم باشد چون \mathbf{L} و π با هم جابه‌جا می‌شوند [رابطه‌ی (۱۱-۲-۴) را ببینید]. برای آنکه بینیم ویژه‌کت \mathbf{L}^2 و L_z تحت پاریته چطور رفتار می‌کنند، بگذارید تا خواص تابع موج را تحت وارونی فضایی بسنجیم:

$$\langle \mathbf{x}' | \alpha, lm \rangle = R_\alpha(r) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (۲۵-۲-۴)$$

تبدیل $\mathbf{x}' \rightarrow -\mathbf{x}'$ با جایگذاری‌های زیر انجام می‌شود:

$$\begin{aligned} r &\rightarrow r \\ \theta &\rightarrow \pi - \theta & (\cos \theta &\rightarrow -\cos \theta) \\ \phi &\rightarrow \phi + \pi & (e^{im\phi} &\rightarrow (-1)^m e^{im\phi}) \end{aligned} \quad (۲۶-۲-۴)$$

با استفاده از شکل صریح زیر:

$$Y_l^m = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (۲۷-۲-۴)$$

برای m مثبت، با رابطه‌ی (۳۸-۶-۳) که در آن:

$$P_l^{|m|}(\cos \theta) = \frac{(-1)^{m+l} (l+|m|)!}{2^l l! (l-|m|)!} \sin^{-|m|} \theta \left(\frac{d}{d(\cos \theta)} \right)^{l-|m|} \sin^{2l} \theta \quad (۲۸-۲-۴)$$

به سرعت می‌توان نشان داد که:

$$Y_l^m \rightarrow (-1)^l Y_l^m \quad (۲۹-۲-۴)$$

که در آن θ و ϕ طبق (۲۶-۲-۴) تغییر یافته‌اند. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که:

$$\pi |\alpha, lm\rangle = (-1)^l |\alpha, lm\rangle \quad (۳۰-۲-۴)$$

در واقع لازم نیست که از Y_l^m استفاده کنیم. راه ساده‌تر برای به‌دست آوردن این نتیجه این است که با $m=0$ کار کنیم و توجه کنیم که $|L_{\pm}^l, m=0\rangle$ که در آن $(r=0, 1, \dots, l)$ است باید پاریته‌ی یکسانی داشته باشد چون π و $(L_{\pm})^r$ با هم جابه‌جا می‌شوند.

اکنون بگذارید تا به خواص پاریته‌ی ویژه حالت‌های انرژی بپردازیم. با پرداختن به یک قضیه‌ی بسیار مهم آغاز می‌کنیم.

قضیه. فرض کنید

$$[H, \pi] = 0 \quad (۳۱-۲-۴)$$

و $|n\rangle$ ویژه‌کت ناتبهگن H با ویژه مقدار E_n باشد:

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (۳۲-۲-۴)$$

آنگاه $|n\rangle$ ویژه‌کت پاریته نیز هست.

اثبات: با توجه به نکته‌ی زیر این قضیه را اثبات می‌کنیم، می‌دانیم که

$$\frac{1}{2}(1 \pm \pi)|n\rangle \quad (۳۳-۲-۴)$$

یک ویژه‌کت پاریته با ویژه‌مقادیر ± 1 (فقط با استفاده از $\pi^2 = 1$) است. اما این یک ویژه‌کت انرژی با ویژه‌مقدار E_n نیز هست. به علاوه، $|n\rangle$ و $(۳۳-۲-۴)$ باید توصیف‌کننده‌ی حالت یکسانی باشند. در غیر این صورت دو حالت، با انرژی یکسان داریم که با ناتبهنگی فرض ما در تناقض است. بنابراین، $|n\rangle$ که نظیر $(۳۳-۲-۴)$ است صرف‌نظر از یک ثابت افزاینده، می‌باید یک ویژه‌کت پاریته، با پاریته‌ی ± 1 باشد. □

به‌عنوان یک مثال، بگذارید تا به نوسان‌گر هماهنگ ساده پردازیم. حالت پایه، پاریته‌ی زوج دارد چون تابع موج آن به‌شکل گاوسی است و تحت تبدیل $x' \rightarrow -x'$ زوج است. نخستین حالت برانگیخته:

$$|1\rangle = a^\dagger|0\rangle \quad (۳۴-۲-۴)$$

باید دارای پاریته‌ی فرد باشد چون a^\dagger تابعی خطی از x و p است که هر دوی این‌ها فرد هستند [رابطه‌ی (۲-۳) را ببینید]. در حال کلی، پاریته‌ی n امین حالت برانگیخته‌ی نوسان‌گر هماهنگ ساده با $(-1)^n$ به‌دست می‌آید.

توجه به این نکته مهم است که فرض ناتبهنگی در این جا ضروری است. به‌عنوان مثال، اتم هیدروژن در مکانیک کوانتومی غیرنسبیتی را در نظر بگیرید. همان‌طور که می‌دانیم، ویژه‌مقادیر انرژی تنها به عدد کوانتومی اصلی n وابسته است (مثلاً، $2p$ و $2s$ حالت‌های تبهگن هستند) - روشن است که پتانسیل کولنی تحت پاریته ناوردا است - واضح است که ویژه‌کت انرژی

$$c_p|2p\rangle + c_s|2s\rangle \quad (۳۵-۲-۴)$$

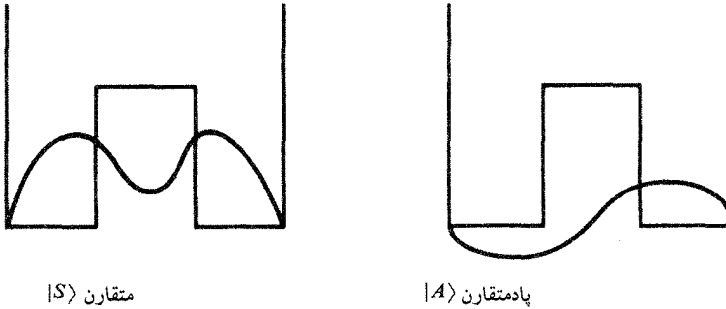
یک ویژه‌کت پاریته نیست.

به‌عنوان یک مثال دیگر، یک ویژه‌کت تکانه را در نظر بگیرید. تکانه با پاریته پاد جابه‌جاگر است، بنابراین ویژه‌کت تکانه (واضح است که یک ویژه‌کت انرژی نیز هست)، یک ویژه‌کت پاریته نیست، حتی با در نظر گرفتن این که هامیلتونی H ذره‌ی آزاد تحت پاریته ناوردا است. قضیه‌ی ما همچنان بدون گزند باقی می‌ماند، چون در اینجا بین $|p'\rangle$ و $|-p'\rangle$ تبهگنی وجود دارد، به‌طوری که این دو حالت یک انرژی دارند. در واقع، به‌راحتی می‌توانیم یک ترکیب خطی $(|p'\rangle \pm |-p'\rangle)(1/\sqrt{2})$ تشکیل دهیم که ویژه‌کت‌های پاریته با ویژه‌مقادیر ± 1 باشند. به زبان تابع موجی، $e^{ip'\cdot x'/\hbar}$ پاریته‌ی مشخصی ندارد اما $\sin p'\cdot x'/\hbar$ و $\cos p'\cdot x'/\hbar$ دارای پاریته‌ی مشخص هستند.

چاه پتانسیل دو گانه‌ی متقارن

به عنوان یک مثال ساده اما آموزنده چاه پتانسیل دو گانه‌ی متقارن را در نظر می‌گیریم. شکل ۳-۴ را

ببینید.



شکل ۳-۴: چاه دو گانه‌ی متقارن با پایین‌ترین حالت‌های قرارگیری $|S\rangle$ (متقارن) و $|A\rangle$ (پادمتقارن)

واضح است که هامیلتونی تحت تأثیر پاردیته ناوردا است. در واقع، برای دو حالتی که پایین‌ترین انرژی را دارند، که در شکل ۳-۴ آمده‌اند، می‌توان جواب‌های صریحی به دست آورد که در منطقه‌ی مجاز به شکل سینوسی و کسینوسی هستند و در منطقه‌ی غیرمجاز به شکل سینوس هایپربولیک و کسینوس هایپربولیک می‌باشند. این جواب‌ها را در جایی که پتانسیل ناپیوسته است با هم جور می‌کنیم و به آن‌ها **حالت متقارن** $|S\rangle$ و **حالت پادمتقارن** $|A\rangle$ می‌گوییم. البته این‌ها ویژه‌کتهای همزمان H و π هستند. همچنین محاسبات نشان می‌دهد که:

$$E_A > E_S \quad (۳۶-۲-۴)$$

که با نگاه به شکل ۳-۴ و توجه به این که تابع موج حالت پادمتقارن انحنای بیشتری دارد می‌توان این نکته را درک کرد. اگر سد میانی بلند باشد اختلاف انرژی زیاد می‌شود. در مورد این مسأله بعداً بحث خواهیم کرد.

می‌توان نوشت:

$$|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|S\rangle + |A\rangle) \quad (۳۷-۲-۴ \text{ الف})$$

و

$$|L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|S\rangle - |A\rangle) \quad (۳۷-۲-۴ \text{ ب})$$

توابع موج (۴-۲-۳۷ الف) و (۴-۲-۳۷ ب) به ترتیب بیشتر در سمت راست و سمت چپ متمرکز هستند. واضح است که این توابع ویژه حالت‌های پاریته نیستند. در واقع، $\langle R |$ و $\langle L |$ تحت پاریته به یکدیگر تبدیل می‌شوند. توجه کنید که هیچ یک از این دو ویژه‌کت انرژی هم نیستند. در واقع این‌ها مثال‌های کلاسیکی از حالت‌های غیرایستا هستند. به‌طور دقیق‌تر، بگذارید تا سیستمی را در نظر بگیریم که در زمان $t = 0$ در $\langle R |$ قرار دارد. در زمان بعدی داریم:

$$\begin{aligned} |R, t_0 = 0; t\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{-iE_S t/\hbar} |S\rangle + e^{-iE_A t/\hbar} |A\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iE_S t/\hbar} (|S\rangle + e^{-i(E_A - E_S)t/\hbar} |A\rangle) \end{aligned} \quad (۴-۲-۳۸)$$

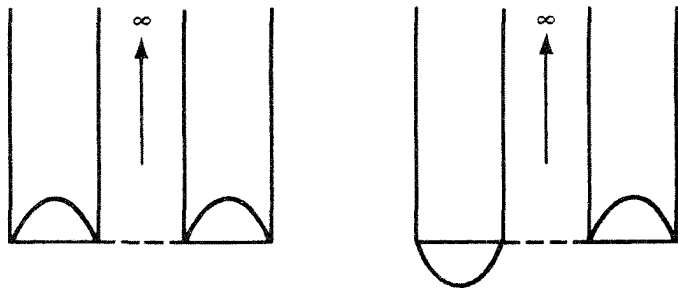
در زمان $t = T/2 \equiv 2\pi\hbar/2(E_A - E_S)$ سیستم به‌طور خالص در $\langle L |$ قرار دارد. در زمان $t = T$ مجدداً به حالت خالص $\langle R |$ بازمی‌گردد و به همین ترتیب. بنابراین در حالت کلی یک نوسان بین $\langle R |$ و $\langle L |$ وجود دارد که بسامد زاویه‌ای آن برابر است با:

$$\omega = \frac{(E_A - E_S)}{\hbar} \quad (۴-۲-۳۹)$$

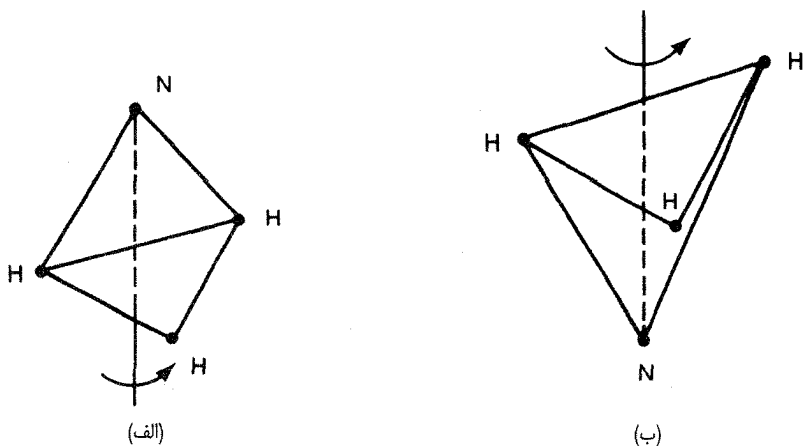
می‌توان این رفتار نوسانی را از نقطه نظر تونل‌زنی در مکانیک کوانتومی نیز بررسی کرد. ذره‌ای که ابتدا در سمت راست محدود شده است می‌تواند در ناحیه‌ی غیرمجاز کلاسیکی (سد میانی) به سمت چپ تونل بزند و سپس دوباره به سمت راست برگردد و به همین ترتیب. اما اکنون بگذارید تا ارتفاع سه میانی را تا بی‌نهایت زیاد کنیم. شکل ۴-۴ را ببینید. اکنون حالت‌های $\langle S |$ و $\langle A |$ تبهگن هستند. بنابراین (۴-۲-۳۷ الف) و (۴-۲-۳۷ ب) حتی وقتی که ویژه‌کت‌های پاریته نباشند، ویژه‌کت‌های انرژی هستند. وقتی که سیستم در حالت $\langle R |$ باشد، برای همیشه در این حالت باقی می‌ماند (زمان تفاوت در این جا بین $\langle S |$ و $\langle A |$ برابر با ∞ است). چون طول سد میانی بی‌نهایت است، هیچ امکانی برای تونل‌زنی باقی نمی‌ماند. بنابراین از نظر فیزیکی قابل تشخیص است که وقتی تبهگنی وجود دارد، دیگر لازم نیست ویژه‌کت‌های انرژی، ویژه‌کت‌های پاریته هم باشند. با وجود این واقعیت که خود هامیلتونی تحت وارونی فضایی متقارن است، حالت پایه، حالتی پادمقارن است. بنابراین با وجود تبهگنی لازم نیست که متقارن بودن هامیلتونی منجر به متقارن بودن ویژه‌کت‌های $\langle S |$ و $\langle A |$ شود.

این مثال بسیار ساده‌ای از شکستن تقارن و تبهگنی است. طبیعت پر از وضعیت‌های شبیه به این است. یک فرومغناطیس را در نظر بگیرید. هامیلتونی اصلی اتم‌های آهن ناورداى چرخشی هستند. اما

فرومغناطیس به طور واضح، جهت گیری تعریف شده‌ای در فضا دارد. بنابراین تعداد (بی‌نهایت) حالت‌های پایه ناوردای چرخشی نیستند. چون اسپین‌ها همه در یک راستای مشخص (اما اختیاری) به صف شده‌اند.



شکل ۴-۴: چاه دوگانه‌ی متقارن با سد میانی بی‌نهایت



شکل ۴-۵: یک مولکول آمونیاک، NH_3 که در آن سه اتم H در سه گوشه‌ی مثلث متساوی‌الاضلاع قرار گرفته‌اند.

مثالی که اهمیت واقعی چاه دوگانه‌ی متقارن را مشخص می‌کند، یک مولکول آمونیاک NH_3 است. شکل ۴-۵ را ببینید. تصور می‌کنیم که سه اتم H در سه گوشه‌ی یک مثلث متساوی‌الاضلاع نشسته‌اند. اتم N می‌تواند بالا یا پایین قرار گیرد. که جهت بالا و پایین از آن جهت تعریف شده‌اند که مولکول حول محوری که در شکل ۴-۵ نشان داده شده است می‌چرخد. جهت‌های بالا و پایین برای اتم N شبیه حالت‌های R ، با چاه پتانسیل دوگانه است. ویژه حالت‌های پارته و انرژی از برهم نهی (۴-۲-۳۷ الف) (۴-۲-۳۷ ب) یعنی شکل ۴-۵ الف و ۴-۵ ب حاصل می‌شوند و اختلاف انرژی بین ویژه حالت‌های همزمان پارته و انرژی متناظر با بسامد نوسان $24,000 \text{ MHz}$ (طول موجی برابر با 1 cm که در ناحیه‌ی میکرو موج قرار دارد) است. در واقع NH_3 اهمیتی بنیادین در فیزیک میز دارد.

به طور طبیعی مولکول‌های آلی نظیر شکر یا اسید آمینه فقط از نوع R (و یا L) هستند. چنین مولکول‌هایی که در آن‌ها یکی از حالت‌ها خیلی بیشتر از حالت دیگر رخ می‌دهد **ایزومرهای بصری** نامیده می‌شوند. در بسیاری از این موارد زمان نوسان در عمل بی‌نهایت است (از مرتبه‌ی $10^4 - 10^6$ سال) بنابراین مولکول‌های نوع R برای همه‌ی مقصودهای عملی راست گرد باقی می‌ماند. نکته‌ی جالب آن است که اگر بخواهیم چنین مولکول‌های آلی را در آزمایشگاه ترکیب کنیم، حالت‌های مخلوط شده‌ی R و L یکسانی را خواهیم داشت. چه چیزی در طبیعت باعث برتری یکی از این دو حالت می‌شود؟ این مسأله یک تصادف ذاتی (ژنتیکی) است. شبیه به اینکه چرا صدف حلزون مارپیچ است یا این که چرا قلب ما در سمت چپ واقع شده است؟

قانون گزینش پاریته

فرض کنید $|\alpha\rangle$ و $|\beta\rangle$ ویژه‌کت‌های پاریته هستند:

$$\pi|\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha|\alpha\rangle \quad (۴-۲-۴۰ \text{ الف})$$

$$\pi|\beta\rangle = \varepsilon_\beta|\beta\rangle \quad (۴-۲-۴۰ \text{ ب})$$

که در آن ε_α و ε_β ویژه مقادیر پاریته (± 1) هستند. می‌توانیم بینیم که:

$$\langle \beta|x|\alpha\rangle = 0 \quad (۴-۲-۴۱)$$

مگر اینکه $\varepsilon_\alpha = -\varepsilon_\beta$. به عبارت دیگر، عملگر پاریته فرد x با حالت‌های مخالف پاریته در ارتباط است. اثبات این نکته به صورت زیر است:

$$\langle \beta|x|\alpha\rangle = \langle \beta|\pi^{-1}\pi x \pi^{-1}\pi|\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha \varepsilon_\beta (-\langle \beta|x|\alpha\rangle) \quad (۴-۲-۴۲)$$

که برای یک مقدار متناهی غیر صفر $\langle \beta|x|\alpha\rangle$ غیر ممکن است، مگر این که ε_β و ε_α در علامت با هم مخالف باشند. شاید خواننده با این طرز نوشتن آشناتر باشد:

$$\int \psi_\beta^* x \psi_\alpha d\tau = 0 \quad (۴-۲-۴۳)$$

به شرطی که ψ_α و ψ_β پاریته یکسان داشته باشند. این قانون گزینش که توسط ویگنر ارائه شد، در بحث انتقال تابشی بین حالت‌های اتمی از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. همان‌طور که این مسأله را بعداً با جزییات بیشتر توضیح خواهیم داد، انتقال تابشی که بین حالت‌هایی که پاریته‌ی مخالف دارند اتفاق می‌افتد به عنوان نتیجه‌ای از فرمول‌بندی ضرایب بسط تلقی می‌کنیم. پیش از تولد مکانیک کوانتومی، این قانون از

لحاظ ساختارشناسی با آنالیز خطوط طیفی به عنوان **قانون لاپورت** شناخته شده بود. این ویژگی بود که نشان داد قانون لاپورت نتیجه‌ای از قانون گزینش پاریته است.

اگر هامیلتونی اصلی H تحت اثر پاریته ناوردا باشد، ویژه حالت‌های غیرتبهگن انرژی [به‌عنوان یک نتیجه از (۴-۲-۴۳)] نمی‌توانند یک مؤلفه‌ی تکانه‌ی دو قطبی الکتریکی ایجاد کنند:

$$\langle n|x|n \rangle = 0 \quad (۴۰-۲-۴۴)$$

این رابطه به‌شکل غیردقیق از (۴-۲-۴۳) به‌دست می‌آید. چون فرض کرده‌ایم که حالت‌های ناتبهگن داریم، ویژه حالت‌های انرژی ویژه حالت‌های پاریته نیز هستند [روابط (۴-۲-۴۲) و (۴-۲-۴۳) را ببینید]. برای یک حالت تبهگن منطقی است که یک گشتاور دو قطبی وجود داشته باشد. وقتی که در فصل ۵ راجع به اثر اشتراک بحث می‌کنیم مثالی از این مورد را خواهیم دید.

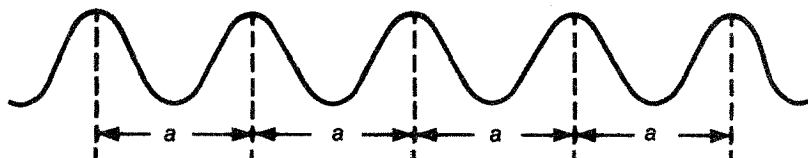
آنچه را که گفتیم جمع‌بندی می‌کنیم: عملگرهایی که تحت پاریته فرد هستند، نظیر \mathbf{p} یا $\mathbf{S} \cdot \mathbf{x}$ فقط بین حالت‌هایی که پاریته‌ی مخالف دارند صفر نمی‌شوند. در مقابل عملگرهایی که تحت پاریته زوج‌اند. حالت‌هایی که پاریته‌ی یکسان دارند را به‌هم متصل می‌کنند.

نایاستگی پاریته

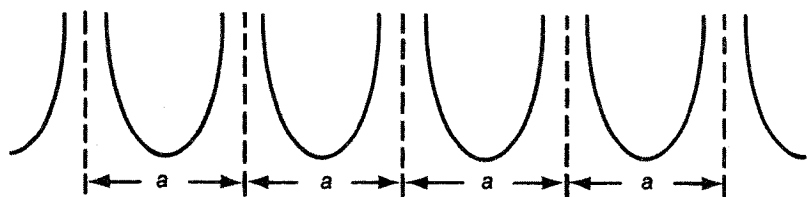
هامیلتونی اصلی که برای برهم‌کنش ضعیف بین ذرات بنیادی وجود دارد، تحت پاریته ناوردا نیست. در فرآیند واپاشی، حالت‌های نهایی به‌دست آمده، یک برهم‌نهی از حالت‌هایی با پاریته‌ی مخالف است. کمیت‌های مشاهده‌پذیر نظیر توزیع زاویه‌ای محصولات واپاشی می‌توانند همچون $\langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{p} \rangle$ ، شبه‌نرده‌ای باشند. جالب است بدانید که تا سال ۱۹۵۶ پایستگی پاریته اصلی مطلق قلمداد می‌شد. اما لی و یانگ نشان دادند که پاریته در برهم‌کنش‌های ضعیف پایسته نیست و آزمایش‌های مشخصی را برای نشان دادن نقض شدن پایستگی پاریته ارائه کردند. آزمایشات پی‌در پی در عمل نشان دادند که آثار قابل مشاهده، به کمیت‌های شبه‌نرده‌ای نظیر همبستگی بین $\langle \mathbf{S} \rangle$ و \mathbf{p} بستگی دارند. چون پاریته در برهم‌کنش‌های ضعیف پایسته نیست، حالت‌های هسته‌ای و اتمی که پیش از این "خالص" قلمداد شدند، حالت‌های مخلوطی هستند. این آثار ظریف نیز به‌طور آزمایشگاهی تأیید شده‌اند.

۳.۴ انتقال شبکه به عنوان یک تقارن گسسته

اکنون به نوع دیگری از عملگر تقارن گسسته، به نام انتقال شبکه می پردازیم. این موضوع کاربردهای فوق العاده با اهمیتی در فیزیک حالت جامد دارد.



(الف)



(ب)

شکل ۴-۶: الف. پتانسیل تناوبی در یک بعد با تناوب a . ب. پتانسیل تناوبی، وقتی که ارتفاع سدهای بین سولهای کنار هم در شبکه بینهایت شود.

یک پتانسیل دوره ای در یک بُعد را در نظر بگیرید که در آن همان طور که در شکل ۴-۶ نشان داده شده است، $V(x \pm a) = V(x)$ است. به طور واقعی می توانیم حرکت یک الکترون در زنجیره ای از یونهای مثبت با فواصل یکسان را در نظر بگیریم. در حالت کلی تحت انتقالی که با $\tau(l)$ با l دلخواه نشان داده می شود هامیلتونی، ناوردان نیست. $\tau(l)$ دارای خواص زیر است (بخش ۱-۶ را ببینید):

$$\tau^\dagger(l)x\tau(l) = x + l, \quad \tau(l)|x'\rangle = |x' + l\rangle \quad (۱-۳-۴)$$

با این وجود وقتی که l بر فواصل شبکه a منطبق شود، داریم:

$$\tau^\dagger(a)V(x)\tau(a) = V(x + a) = V(x) \quad (۲-۳-۴)$$

از آن جا که قسمت انرژی جنبشی هامیلتونی تحت انتقال با هر اندازه جابه جایی، ناوردان می ماند، هامیلتونی در رابطه ی زیر صدق می کند:

$$\tau^\dagger(a)H\tau(a) = H \quad (۳-۳-۴)$$

چون $\tau(a)$ یکانی است. از (۳-۳-۴) داریم:

$$[H, \tau(a)] = 0 \quad (۴-۳-۴)$$

بنابراین هامیلتونی و $\tau(a)$ را می توان به طور همزمان قطری کرد. اگرچه $\tau(a)$ یکانی است، اما هرمیتی نیست. بنابراین انتظار داریم که ویژه مقدار عدد مختلطی با اندازه ی ۱ باشد.

قبل از آن که به تعیین ویژه کت ها و ویژه مقادیر $\tau(a)$ و مشخص کردن معنای فیزیکی آن ها بپردازیم، آموزنده است که همانند شکل ۴-۶ ب، حالت خاصی از پتانسیل دوره ای را در نظر بگیریم که ارتفاع سد بین دو سلول شبکه به سمت بی نهایت برود. حالت پایه برای پتانسیل شکل ۴-۶ ب چیست؟ پیداست، حالتی که در آن ذره در یکی از سلول های شبکه کاملاً جایگزیده است، یکی از کاندیدهای حالت پایه است. برای مشخص کردن این وضعیت اجازه دهید فرض کنیم که ذره در n امین سلول شبکه جایگزیده است و کت متناظر با آن را با $|n\rangle$ نمایش دهیم. این یک ویژه کت انرژی با ویژه مقدار E_0 است به طوری که $H|n\rangle = E_0|n\rangle$ است. تابع موج $\langle x'|n\rangle$ تنها به n امین سلول محدود است. با این حال، توجه می کنیم که یک کت مشابه که در سلول مشابه دیگری جایگزیده است نیز دارای انرژی E_0 است، بنابراین در عمل بی نهایت حالت پایه ی n وجود دارد که n از $-\infty$ تا $+\infty$ تغییر می کند.

اکنون پیداست که $|n\rangle$ یک ویژه کت عملگر انتقال شبکه نیست. چون وقتی عملگر انتقال شبکه بر آن عمل می کند حالت $|n+1\rangle$ را به دست می آوریم:

$$\tau(a)|n\rangle = |n+1\rangle \quad (5-3-4)$$

بنابراین برخلاف این واقعیت که $\tau(a)$ با H جابه جا می شود، $|n\rangle$ که یک ویژه کت H است - ویژه کت $\tau(a)$ نیست. این با قضیه ی پیشین ما در مورد تقارن کاملاً سازگار است، چون در این جا بی نهایت تبهگنی وجود دارد. وقتی تبهگنی اینچنینی وجود دارد، تقارن جهان نیازمند آن نیست که ویژه کت های انرژی متقارن باشند. کار ما یافتن ویژه کت های همزمان H و $\tau(a)$ است.

در این جا می توانیم به خاطر آوریم که چطور به وضعیتی مشابه یعنی چاه پتانسیل دو گانه ی متقارن در بخش پیش چیره شدیم. دیدیم که حتی اگر هیچکدام از $|R\rangle$ یا $|L\rangle$ ویژه کت π نباشند، به راحتی می توانیم یک حالت متقارن و یک حالت پادمتقارن از ترکیب $|R\rangle$ و $|L\rangle$ به دست آوریم که ویژه کت های پاریته باشند. در اینجا نیز وضعیت مشابهی داریم. بگذارید تا یک ترکیب خطی خاص را به شکل زیر تشکیل دهیم:

$$|\theta\rangle \equiv \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta}|n\rangle \quad (6-3-4)$$

که در آن θ پارامتری حقیقی با مقدار $-\pi < \theta < \pi$ است. ادعا می کنیم که θ ویژه کت همزمان H و $\tau(a)$ است. که این یک ویژه کت H است. چون $|n\rangle$ یک ویژه کت انرژی با ویژه مقدار E_0 و مستقل از n

است. برای نشان دادن این که $|\theta\rangle$ یک ویژه کت عملگر انتقال شبکه است $\tau(a)$ را به صورت زیر به آن اعمال می‌کنیم:

$$\begin{aligned}\tau(a)|\theta\rangle &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta}|n+1\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i(n-1)\theta}|n\rangle \\ &= e^{-i\theta}|\theta\rangle\end{aligned}\quad (۷-۳-۴)$$

توجه کنید که این ویژه کت همزمان H و $\tau(a)$ با پارامتر پیوسته θ مشخص می‌شود. به علاوه ویژه مقدار E_0 مستقل از θ است.

اکنون بگذارید تا به وضعیت واقعی تر، یعنی شکل ۴-۶ الف. باز گردیم که در آن ارتفاع سد بین سلول‌های شبکه بی‌نهایت نیست. می‌توانیم کت جایگزیده $|n\rangle$ را همچون پیش با استفاده از خاصیت $\tau(a)|n\rangle = |n+1\rangle$ بسازیم. اما این بار انتظار داریم که امکان تراوش به همسایه‌ی مجاور نیز از طریق تونل زنی کوانتومی وجود داشته باشد. به عبارت دیگر تابع موج $\langle x|n\rangle$ دنباله‌ای دارد که به سلول‌های دیگری غیر از n امین سلول نیز گسترش پیدا می‌کند. به علت ناوردایی نسبت به انتقال، آرایه‌های قطری H در پایه‌های $\{|n\rangle\}$ همه با هم برابراند، یعنی:

$$\langle n|H|n\rangle = E_0 \quad (۸-۳-۴)$$

که همانند قبل مستقل از n است. اما به خاطر وجود دنباله‌ای که ناشی از تراوش تونل زنی است، H در پایه‌ی $\{|n\rangle\}$ کاملاً قطری نیست. حال فرض می‌کنیم که ارتفاع بین سلول‌های هم جوار زیاد است (اما بی‌نهایت نیست). آنگاه انتظار داریم که آرایه‌های ماتریسی H بین سلول‌های دور از هم کاملاً ناچیز باشند. بگذارید فرض کنیم که تنها آرایه‌های غیر قطری که حائز اهمیت‌اند، آن‌هایی هستند که بی‌واسطه همسایه‌ها را به هم متصل می‌کنند. یعنی:

$$\langle n'|H|n\rangle \neq 0 \quad \text{only if } n' = n \quad \text{or} \quad n' = n \pm 1 \quad (۹-۳-۴)$$

در فیزیک حالت جامد این فرض به تقریب تنگ بست معروف است. حال بگذارید تا تعریف زیر را انجام دهیم:

$$\langle n \pm 1|H|n\rangle = -\Delta \quad (۱۰-۳-۴)$$

پیدا است که دوباره به خاطر ناوردایی انتقالی هامیلتونی، Δ مستقل از n است. وقتی $n \neq n'$ آنگاه $|n\rangle$ و $|n'\rangle$ بر هم عمودند. به همین خاطر به دست می‌آوریم:

$$H|n\rangle = E_0|n\rangle - \Delta|n+1\rangle - \Delta|n-1\rangle \quad (۱۱-۳-۴)$$

دقت کنید که $|n\rangle$ دیگر ویژه کت انرژی نیست.

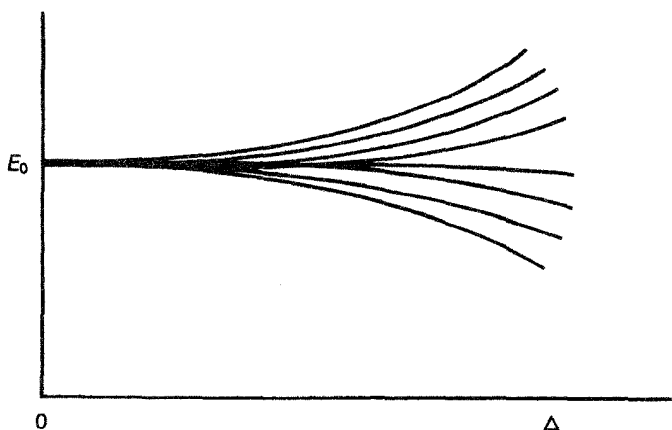
همان‌طور که برای پتانسیل شکل ۴-۶ ب انجام دادیم، بگذارید ترکیب خطی زیر را تشکیل دهیم:

$$|\theta\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta} |n\rangle \quad (۱۲-۳-۴)$$

پیدا است که $|n\rangle$ یک ویژه‌کت عملگر انتقال $\tau(a)$ است. چون مراحل انجام شده در (۷-۳-۴) همچنان برقرار است. یک سؤال طبیعی این است که آیا $|\theta\rangle$ ویژه‌کت انرژی است؟ برای پاسخ به این سؤال، H را بر آن اثر می‌دهیم:

$$\begin{aligned} H \sum e^{in\theta} |n\rangle &= E_0 \sum e^{in\theta} |n\rangle - \Delta \sum e^{in\theta} |n+1\rangle - \Delta \sum e^{in\theta} |n-1\rangle \\ &= E_0 \sum e^{in\theta} |n\rangle - \Delta \sum (e^{in\theta-i\theta} + e^{in\theta+i\theta}) |n\rangle \\ &= (E_0 - 2\Delta \cos \theta) \sum e^{in\theta} |n\rangle \end{aligned} \quad (۱۳-۳-۴)$$

اختلاف زیادی که بین این حالت و حالت بخش قبل وجود دارد ناشی از آن است که حالا دیگر ویژه مقدار انرژی وابسته به پارامتر پیوسته θ است. به‌ازای مقادیر معلوم Δ تبهگنی از بین می‌رود و ما با طیف پیوسته‌ای از ویژه مقادیر انرژی بین $E_0 - 2\Delta$ و $E_0 + 2\Delta$ سر و کار داریم. شکل ۴-۷ را ببینید که در آن نشان داده‌ایم چطور ترازهای انرژی با افزایش Δ از صفر، در یک محدوده‌ی انرژی پیوسته شکل می‌گیرند.



شکل ۴-۷: با افزایش Δ از مقدار صفر، ترازهای انرژی یک نوار انرژی پیوسته را تشکیل می‌دهند.

برای درک معنای فیزیکی پارامتر θ بگذارید تا به مطالعه‌ی تابع موج $\langle x|\theta\rangle$ پردازیم. برای تابع موج حالت انتقال شبکه $\langle \theta|\tau(a)\rangle$ به‌دست می‌آوریم.

$$\langle x|\tau(a)|\theta\rangle = \langle x'-a|\theta\rangle \quad (۱۴-۳-۴)$$

که در آن $\tau(a)$ را روی $|x'\rangle$ اثر دادیم. اما می‌توانیم با استفاده از (۴-۳-۷)، $\tau(a)$ را روی $|\theta\rangle$ اثر دهیم. بنابراین:

$$\langle x'|\tau(a)|\theta\rangle = e^{-i\theta}\langle x'|\theta\rangle \quad (۴-۳-۱۵)$$

بنابراین:

$$\langle x'-a|\theta\rangle = \langle x'|\theta\rangle e^{-i\theta} \quad (۴-۳-۱۶)$$

این معادله را با قراردادن

$$\langle x'|\theta\rangle = e^{ikx'}u_k(x') \quad (۴-۳-۱۷)$$

حل می‌کنیم. اگر $\theta = ka$ باشد و $u_k(x')$ یک تابع دوره‌ای با دوره تناوب a فرض شود، به راحتی و با جایگذاری داریم:

$$e^{ik(x'-a)}u_k(x'-a) = e^{ikx'}u_k(x')e^{-ika} \quad (۴-۳-۱۸)$$

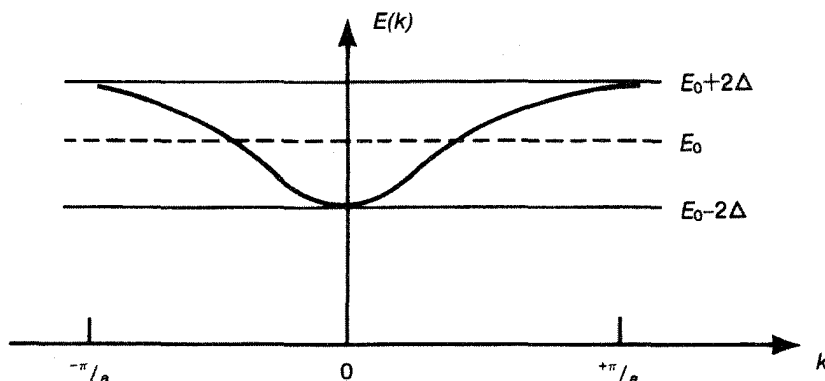
به این ترتیب به شرط مهمی که به قضیه‌ی بلاخ معروف است، دست یافتیم. تابع موج $|\theta\rangle$ را که یک ویژه‌کت $\tau(a)$ است، می‌توان به صورت یک موج تخت $e^{ikx'}$ ضربدر یک تابع دوره‌ای با دوره تناوب a نوشت. توجه کنید تنها واقعیتی که از آن برای نوشتن این قضیه استفاده کردیم، این است که $|\theta\rangle$ یک ویژه‌کت $\tau(a)$ با ویژه مقدار $e^{-i\theta}$ است [رابطه‌ی (۴-۳-۷) را ببینید]. این قضیه حتی اگر تقریب تنگ بسط (۴-۳-۹) نیز برقرار نباشد همچنان اصالت دارد.

اکنون در وضعیتی هستیم که می‌توانیم نتیجه‌ی پیشین خود یعنی (۴-۳-۱۳) را برای $|\theta\rangle$ که از رابطه‌ی (۴-۳-۱۲) به دست می‌آید، تفسیر کنیم. می‌دانیم که تابع موج، موج تختی است که بردار انتشار موج k آن با تابع دوره‌ای $u_k(x')$ میزان شده است [رابطه‌ی (۴-۳-۱۷) را ببینید]. وقتی که θ از $-\pi$ تا π تغییر می‌کند بردار موج k از $-\pi/a$ تا π/a تغییر می‌یابد. اکنون ویژه مقادیر انرژی E به شکل زیر وابسته به k هستند:

$$E(k) = E_0 - 2\Delta \cos ka \quad (۴-۳-۱۹)$$

توجه کنید که در این معادله، ویژه مقدار انرژی از حالت‌هایی که در تقریب تنگ بست وجود دارد، مستقل است. همچنین توجه کنید که یک قطع برای تابع موج k در تابع بلاخ (۴-۳-۱۷) وجود دارد که عبارت است از $|k| = \pi/a$. معادله‌ی (۴-۳-۱۹)، همان‌طور که در شکل ۴-۸ نشان داده شده است یک منحنی پراکنندگی تعریف می‌نماید. در نتیجه‌ی تونل‌زنی، تبهگنی از مرتبه‌ی بی‌نهایت کاملاً از بین می‌رود و مقادیر انرژی مجاز، یک محدوده‌ی پیوسته بین $E_0 - 2\Delta$ تا $E_0 + 2\Delta$ قرار می‌گیرند که به این محدوده، ناحیه‌ی بریلوئن گفته می‌شود.

تا به اینجا فقط رفتار تک ذره را در پتانسیل دوره‌ای بررسی کرده‌ایم. در وضعیت واقعی‌تر باید تعداد زیادی الکترون را در نظر بگیریم که در چنین پتانسیلی حرکت می‌کنند. در عمل الکترون‌ها، اصل طرد پاولی را رعایت می‌کنند و شروع به لایه‌گذاری در ناحیه‌ی مجاز می‌نمایند (در فصل ۶ راجع به این اصل بحث می‌کنیم). به این ترتیب، خاصیت‌های اصلی فلزات، نیمه‌رساناها و نظایر آن‌ها به‌عنوان نتیجه‌ای از ناوردایی انتقالی و اصل طرد، به‌دست می‌آید.



شکل ۴-۸: منحنی تغییرات $E(k)$ نسبت به k در ناحیه‌ی بریلوئن $|k| \leq \pi/a$

خواننده ممکن است که به شباهت بین مسأله‌ی چاه دو گانه‌ی متقارن در بخش ۴-۲ و پتانسیل دوره‌ای در این بخش پی برده باشد. با مقایسه‌ی شکل‌های ۴-۳ و ۴-۶ می‌بینیم که این دو حالت مربوط به حدهای مخالف پتانسیل (دو بی‌نهایت متقابل) با تعداد سلول‌های محدود هستند.

۴.۴ تقارن گسسته‌ی وارونی زمانی

در این بخش به بررسی عملگر تقارنی گسسته‌ی دیگری به نام وارونی زمانی می‌پردازیم. این عنوان سختی برای تازه‌کاران به‌شمار می‌رود. خصوصاً این که عبارت وارونی زمانی بی‌معنی به‌نظر می‌رسد و ما را به یاد داستان‌های علمی-تخیلی می‌اندازد. در واقع آنچه که در این بخش انجام می‌دهیم را بهتر است که با عبارت وارونی حرکت، مشخص کنیم. از لحاظ تاریخی عبارت وارونی زمانی توسط ای. ویگنر به‌کار رفت، وی وارونی زمانی را در یک مقاله‌ی فوق‌العاده بنیادین در سال ۱۹۳۲ فرمول‌بندی کرد.

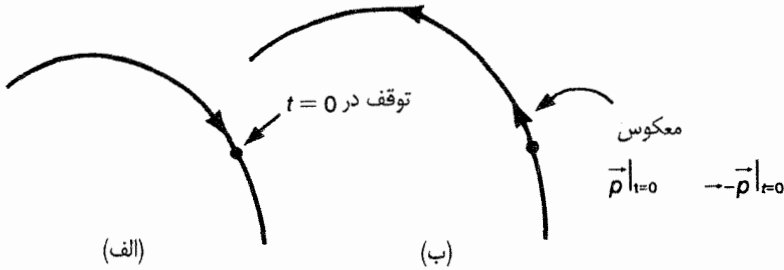
برای جهت دادن به اهدافمان بگذارید تا به مکانیک کلاسیک بنگریم. فرض کنید که مسیر ذره‌ای که در میدان نیروی معینی قرار دارد را می‌دانیم، شکل ۴-۹ را ببینید. بگذارید تا ذره در زمان $t = 0$ بایستد و در خلاف جهت قبل حرکت کند: $-P|_{t=0} \rightarrow P|_{t=0}$. ذره در مسیری مشابه با قبل در جهت معکوس حرکت می‌کند. اگر شما از مسیر (a) فیلم‌برداری کنید و آنگاه فیلم را بصورت وارونه نشان دهید تا (b)

پخش شود، بسیار سخت می شود گفت که فیلم به صورت اصلی پخش می شود یا به صورت وارونه نمایش داده می شود.

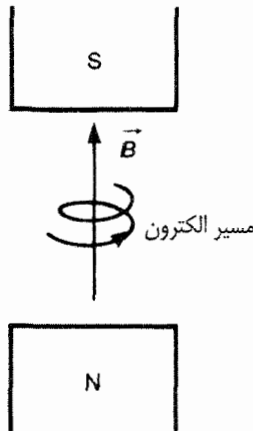
به طور صوری تر، اگر $\mathbf{x}(t)$ یک جواب معادله‌ی

$$m\ddot{\mathbf{x}} = -\nabla V(\mathbf{x}) \quad (1-4-4)$$

باشد، آنگاه $\mathbf{x}(-t)$ نیز یک جواب ممکن برای میدان نیروی ناشی شده از پتانسیل V است. البته، مهم است توجه کنیم که در این جا نیروی اتلافی نداریم. شی‌ای که روی میزی سُر می خورد، رفته رفته از سرعتش کاسته می شود (به خاطر اصطکاک) و در نهایت می ایستد. اما آیا تا به حال دیده‌اید که جسمی روی میزی خود به خود شروع به حرکت کند و شتاب بگیرد؟



شکل ۹-۴: الف. مسیر کلاسیکی که در $t=0$ متوقف می شود. ب. وارونگی این حرکت: $\mathbf{p}|_{t=0} \rightarrow -\mathbf{p}|_{t=0}$



شکل ۱۰-۴: مسیر الکترون، بین قطب‌های شمال و جنوب یک آهن ربا.

شاید قادر باشید، این اختلاف را با یک میدان مغناطیسی بیان کنید. تصور کنید که شما مسیر مارپیچ یک الکترون در میدان مغناطیسی را نظاره گر هستید. با مقایسه‌ی جهت حرکت الکترون و طرز قرار گیری قطب‌های مغناطیسی S و N می‌توانید بفهمید که کدام فیلم در جهت اصلی و کدام یک در خلاف جهت نمایش داده می‌شود. اما از منظر میکروسکوپی، B با حرکت بارهای الکتریکی، که منجر به یک جریان الکتریکی می‌گردد، تولید می‌شود. اگر بتوانید جریانی که منجر به B می‌شود را معکوس کنید، آنگاه وضعیت کاملاً متقارن خواهد بود. در این حالت با نمایش فیلم، شکل $4-10$ انگار می‌شود که N و S اشتباه نام گذاری شده‌اند! راه اصولی‌تر دیگر برای گفتن تمام این حرف‌ها معادلات ماکسول است، برای مثال:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho, \quad \nabla \times \mathbf{B} - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \frac{4\pi\mathbf{j}}{c}, \quad \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (2-4-4)$$

و معادله‌ی نیروی لورنتس $\mathbf{F} = e[\mathbf{E} + (1/c)(\mathbf{v} \times \mathbf{B})]$ تحت $t \rightarrow -t$ و همچنین

$$\mathbf{E} \rightarrow \mathbf{E}, \quad \mathbf{B} \rightarrow -\mathbf{B}, \quad \rho \rightarrow \rho, \quad \mathbf{j} \rightarrow -\mathbf{j}, \quad \mathbf{v} \rightarrow -\mathbf{v}. \quad (3-4-4)$$

ناوردا می‌ماند.

حال بگذارید به مکانیک موجی بپردازیم که در آن معادله‌ی اصلی یا همان معادله‌ی شرودینگر به صورت زیر است:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi \quad (4-4-4)$$

فرض کنید $\psi(\mathbf{x}, t)$ یک جواب است. به راحتی می‌توان نشان داد که $\psi(\mathbf{x}, -t)$ جواب این معادله نیست، چون اولین جمله نسبت به زمان مشتق می‌گیرد. اما $\psi^*(\mathbf{x}, -t)$ یک جواب است. می‌توانید با استفاده از همیوگ مختلط (4-4-4) این را ثابت کنید. قانع کردن خودمان در مورد این مسأله برای یک ویژه حالت انرژی آموزنده است. یعنی تساوی‌های

$$\psi(\mathbf{x}, t) = u_n(\mathbf{x}) e^{-iE_n t/\hbar}, \quad \psi^*(\mathbf{x}, -t) = u_n^*(\mathbf{x}) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (5-4-4)$$

را در معادله‌ی شرودینگر (4-4-4) جایگذاری کنیم. بنابراین حدس می‌زنیم که وارونی زمانی با مزدوج مختلط گیری به نوعی ارتباط دارد. اگر در $t = 0$ تابع موج با رابطه‌ی زیر به دست آید:

$$\psi = \langle \mathbf{x} | \alpha \rangle \quad (6-4-4)$$

آنگاه تابع موج متناظر برای حالت وارونه- زمان با $\langle \mathbf{x} | \alpha \rangle^*$ به دست می آید. بعداً نشان می دهیم که در واقع این امر برای تابع موج سیستم بدون اسپین رخ می دهد. به عنوان یک مثال، می توانید این نکته را برای تابع موج یک موج تخت بیازمایید. مسأله ی ۸ این فصل را ببینید.

گریز بر عملگرهای تقارنی

قبل از آغاز بحث در مورد رفتار سازمان یافته ی عملگر وارونی زمان، به بررسی چند نکته ی کلی در مورد عملگرهای تقارنی می پردازیم. فرض کنید یک عملگر متقارن به صورت

$$|\alpha\rangle \rightarrow |\bar{\alpha}\rangle, \quad |\beta\rangle \rightarrow |\bar{\beta}\rangle \quad (7-4-4)$$

باشد. ممکن است استدلال کنید که ضرب داخلی $\langle \beta | \alpha \rangle$ باید ثابت بماند، یعنی:

$$\langle \bar{\beta} | \bar{\alpha} \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle \quad (8-4-4)$$

در واقع، برای عملگرهای متقارن، نظیر چرخش، انتقال و حتی پارته، این مورد برقرار است. اگر $|\alpha\rangle$ چرخانده شود و $|\beta\rangle$ نیز به همان صورت بچرخد، آنگاه $\langle \beta | \alpha \rangle$ بدون تغییر می ماند. این مسأله از این ناشی می شود که همان طور که در بخش پیش مطرح کردیم عملگر متناظر با یک عمل تقارنی یکانی است. بنابراین:

$$\langle \beta | \alpha \rangle \rightarrow \langle \beta | U^\dagger U | \alpha \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle \quad (9-4-4)$$

در عین حال، در بحث وارونی زمانی، دیدیم که الزام (۸-۴-۴) منجر به محدودیت های زیادی می شود. به جای این شرط می توانیم الزام ضعیف تری را قرار دهیم:

$$|\langle \bar{\beta} | \bar{\alpha} \rangle| = |\langle \beta | \alpha \rangle| \quad (10-4-4)$$

پیدا است که الزام (۸-۴-۴) در رابطه ی (۱۰-۴-۴) صدق می کند. اما این جواب، تنها جواب نیست. رابطه ی

$$\langle \bar{\beta} | \bar{\alpha} \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle^* = \langle \alpha | \beta \rangle \quad (11-4-4)$$

هم به همان خوبی در آن صدق می کند. ما در این بخش، امکان دوم را پیگیری می کنیم. چون در بحث های پیشین که بر مبنای معادله ی شرودینگر قرار داشتند این گونه تفسیر کردیم که وارونی زمان به نوعی با مزدوج مختلط گرفتن، در ارتباط است.

تعریف. به تبدیل

$$|\alpha\rangle \rightarrow |\tilde{\alpha}\rangle = \theta|\alpha\rangle, \quad |\beta\rangle \rightarrow |\tilde{\beta}\rangle = \theta|\beta\rangle \quad (12-4-4)$$

پادیکانی گفته می شود اگر:

$$\langle \tilde{\beta} | \tilde{\alpha} \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle^* \quad (\text{الف } 13-4-4)$$

$$\theta(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle) = c_1^*\theta|\alpha\rangle + c_2^*\theta|\beta\rangle \quad (\text{ب } 13-4-4)$$

در چنین حالتی به عملگر θ ، عملگر پادیکانی گفته می شود. رابطه ی (۱۳-۴-۴) ب) به تنهایی یک عملگر پادخطی را تعریف می کند.

اکنون ادعا می کنیم که یک عملگر پادیکانی را می توان به شکل زیر نوشت:

$$\theta = UK \quad (14-4-4)$$

که در آن U یک عملگر یکانی و K عملگر مزدوج مختلط گیری است هر ضریبی که در کت ضرب شده باشد مزدوج مختلط می کند (اگر در سمت راست K قرار داشته باشد). قبل از آزمودن (۱۳-۴-۴) بگذارید تا خواص عملگر K را بسنجیم. فرض کنید یک کت را در عدد مختلط c ضرب کنیم. آنگاه داریم:

$$Kc|\alpha\rangle = c^*K|\alpha\rangle \quad (15-4-4)$$

ممکن است بپرسیم، اگر $|\alpha\rangle$ را بر حسب کت های پایه $\{|a'\rangle\}$ بسط دهیم چه اتفاقی می افتد؟ با تأثیر K داریم:

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|\alpha\rangle \xrightarrow{K} |\tilde{\alpha}\rangle = \sum_{a'} \langle a'|\alpha\rangle^* K|a'\rangle \\ &= \sum_{a'} \langle a'|\alpha\rangle^* |a'\rangle \end{aligned} \quad (16-4-4)$$

توجه کنید که با تأثیر K بر کت های پایه، تغییری در کت های پایه ایجاد نمی شود. شکل صریح $|a'\rangle$ به صورت زیر است:

$$|a'\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

و بنابراین تحت اثر K تغییری در آن رخ نمی‌دهد. شاید برای خواننده سؤال باشد که برای یک سیستم اسپین $\frac{1}{2}$ ، ویژه‌کت‌های S_y ، چطور تحت K تغییر می‌کنند؟ جواب این است که اگر ویژه‌کت‌های S_z به‌عنوان کت‌های پایه استفاده شده باشند می‌باید ویژه‌کت‌های S_y را تغییر داد. چون ویژه‌کت‌های S_y (۱-۱-۱۴) تحت تأثیر K به‌صورت زیر تغییر می‌یابند:

$$K \left(\frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle \pm \frac{i}{\sqrt{2}} |-\rangle \right) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle \mp \frac{i}{\sqrt{2}} |-\rangle \quad (۱۸-۴-۴)$$

از طرف دیگر اگر از خود ویژه‌کت‌های S_y به‌عنوان کت‌های پایه استفاده شود، نمی‌توانیم ویژه‌کت‌های S_y را تحت K تغییر دهیم. بنابراین اثر K با انتخاب پایه‌ها تغییر می‌کند. به‌عنوان یک نتیجه، تشکیل U در (۱۴-۴-۴) به‌نحوی شکل نمایش (یعنی، انتخاب کت‌های پایه) نیز بستگی دارد. گاتفرید به‌طور ماهرانه‌ای می‌گوید: "اگر پایه‌ها تغییر کنند، کار U و K باید دوباره بررسی شود."

دوباره به‌عبارت $UK = \theta$ و رابطه‌ی (۱۳-۴-۴) بازمی‌گردیم. بگذارید ابتدا خاصیت (۴-۴-۱۳) را

بیازماییم. داریم:

$$\begin{aligned} \theta(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle) &= UK(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle) \\ &= c_1^*UK|\alpha\rangle + c_2^*UK|\beta\rangle \\ &= c_1^*\theta|\alpha\rangle + c_2^*\theta|\beta\rangle \end{aligned} \quad (۱۹-۴-۴)$$

یعنی (۴-۴-۱۳) برقرار است. قبل از آزمودن (۴-۴-۱۳ الف)، ادعا می‌کنیم که صحیح‌تر آن است که θ را تنها روی کت‌ها اثر دهیم. تنها با نگرستن به کت‌های پایه‌ی متناظر با براها می‌توان نحوه‌ی تغییر براها را بدست آورد. به‌ویژه، لازم نیست که فرض کنیم θ روی براها از سمت راست اعمال می‌شود و یا اینکه لازم نیست θ^\dagger را تعریف کنیم. داریم:

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle \xrightarrow{\theta} |\bar{\alpha}\rangle &= \sum_{a'} \langle a'|\alpha\rangle^* UK|a'\rangle \\ &= \sum_{a'} \langle a'|\alpha\rangle^* U|a'\rangle \\ &= \sum_{a'} \langle \alpha|a'\rangle U|a'\rangle \end{aligned} \quad (۲۰-۴-۴)$$

همین طور برای $|\beta\rangle$ داریم:

$$\begin{aligned} |\tilde{\beta}\rangle &= \sum_{a'} \langle a'|\beta\rangle^* U|a'\rangle \stackrel{DC}{\leftrightarrow} \langle\tilde{\beta}| = \sum_{a'} \langle a'|\beta\rangle \langle a'|U^\dagger \\ \langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle &= \sum_{a''} \sum_{a'} \langle a''|\beta\rangle \langle a''|U^\dagger U|a'\rangle \langle\alpha|a'\rangle \\ &= \sum_{a'} \langle\alpha|a'\rangle \langle a'|\beta\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle \\ &= \langle\beta|\alpha\rangle^* \end{aligned} \quad (21-4-4)$$

بنابراین این رابطه برقرار است. برای برقرار بودن (۴-۴-۱۰)، از نظر فیزیکی تنها کافی است دو نوع تبدیل، یعنی تبدیل یکانی و پادیکانی را در نظر بگیریم. بقیه‌ی تبدیل‌ها تنها می‌توانند منجر به یک تغییر فاز گردند. اثبات این ادعا در عمل بسیار سخت است و فرا از بحث این کتاب است (گاتفرید ۱۹۶۶، ۲۸-۲۶).

عملگر وارونی زمان

سرانجام در موقعیتی قرار گرفتیم که می‌توانیم یک نظریه‌ی کلی برای وارونی زمانی ارائه دهیم. اجازه دهید که عملگر وارونی زمانی را با Θ مشخص کنیم تا با θ که در حالت کلی معرف عملگر پادیکانی است، متمایز باشد. فرض کنید:

$$|\alpha\rangle \rightarrow \Theta|\alpha\rangle \quad (22-4-4)$$

که در آن $|\alpha\rangle$ حالت وارونه زمان است. اگر $|\alpha\rangle$ ویژه حالت تکانه $|\mathbf{p}'\rangle$ باشد، آنگاه بهتر است که به $|\alpha\rangle$ حالت وارونه حرکت گفته شود. انتظار داریم، همان‌طور که \mathcal{J} تحت وارونگی زمان معکوس می‌شد، $|\alpha\rangle$ صرف نظر از فاز، برابر با $|\mathbf{p}'\rangle$ باشد.

با نگاه به تحول زمانی یک حالت وارونه زمان می‌توانیم به خاصیت بنیادین عملگر وارونی زمان پی ببریم. فرض کنید که یک سیستم فیزیکی در $t = 0$ با کت $|\alpha\rangle$ نشا داده می‌شود. آنگاه کمی بعد در زمان $t = \delta t$ ، سیستم در حالت زیر یافت می‌شود:

$$|\alpha, t_0 = 0; t = \delta t\rangle = \left(1 - \frac{iH}{\hbar} \delta t\right) |\alpha\rangle \quad (23-4-4)$$

که در آن H ، هامیلتونی مسأله است و تحول زمانی را مشخص می‌کند. به جای معادله‌ی قبلی، فرض کنید که ما ابتدا Θ را در $t = 0$ اعمال می‌کردیم و آنگاه اجازه می‌دادیم که سیستم تحت تأثیر هامیلتونی H تحول پیدا کند. آنگاه در زمان δt داشتیم:

$$\left(1 - \frac{iH\delta t}{\hbar}\right) \Theta|\alpha\rangle \quad (24-4-4) \text{ الف}$$

اگر حرکت تحت وارونی زمانی متقارن باشد، انتظار داریم که کت حالت قبل، به چیزی مثل آنچه در زیر آمده است، برود:

$$\Theta|\alpha, t_0 = 0; t = -\delta t\rangle \quad (۲۴-۴-۴) \text{ ب}$$

یعنی، ابتدا فرض می‌کنیم که کت حالت در زمان پیشین $t = -\delta t$ قرار دارد و آنگاه p و \mathbf{J} را معکوس می‌کنیم. شکل ۴-۱۱ را ببینید. از نظر ریاضیاتی:

$$\left(1 - \frac{iH}{\hbar}\delta t\right)\Theta|\alpha\rangle = \Theta\left(1 - \frac{iH}{\hbar}(-\delta t)\right)|\alpha\rangle \quad (۲۵-۴-۴)$$

اگر روابط قبل برای هر کتی درست باشد، باید داشته باشیم:

$$-iH\Theta = \Theta iH \quad (۲۶-۴-۴)$$

که در آن کت نانوشته $|\alpha\rangle$ به این اشاره دارد که رابطه‌ی (۲۶-۴-۴) برای هر کتی درست است. حال استدلال می‌کنیم که اگر زمان وارون: بامعنی باشد، Θ نمی‌تواند یکانی باشد. فرض کنید که Θ یکانی باشد. آنگاه حذف کردن آنها از دو طرف (۲۶-۴-۴) صحیح است و معادله‌ی عملگر زیر برقرار است:

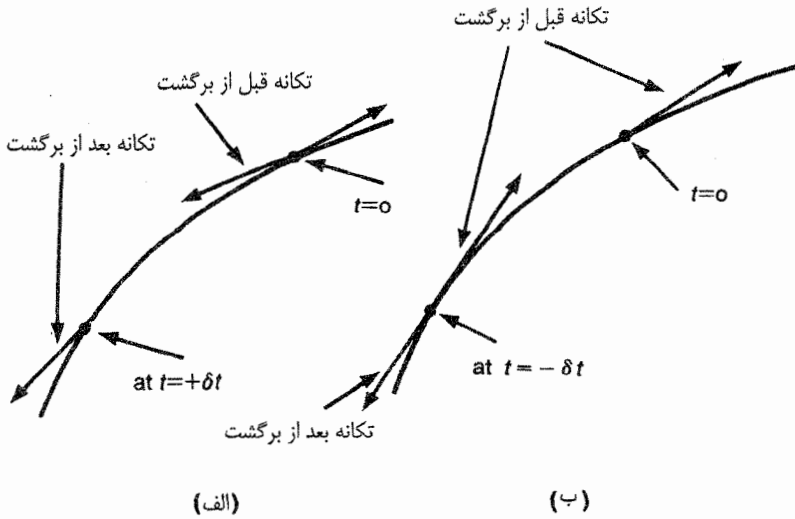
$$-H\Theta = \Theta H \quad (۲۷-۴-۴)$$

ویژه کت انرژی $|n\rangle$ با ویژه مقدار انرژی E_n را در نظر بگیرید. حالت وارونه زمان متناظر را با $\Theta|n\rangle$ نشان می‌دهیم. با استفاده از (۲۷-۴-۴) خواهیم داشت:

$$H\Theta|n\rangle = -\Theta H|n\rangle = (-E_n)\Theta|n\rangle \quad (۲۸-۴-۴)$$

این معادله می‌گوید که $\Theta|n\rangle$ یک ویژه کت هامیلتونی با ویژه مقدار انرژی E_n است. اما این حتی برای مقدماتی‌ترین مورد یعنی ذره‌ی آزاد هم، بی‌معنی است. می‌دانیم که طیف انرژی ذره‌ی آزاد از 0 تا $+\infty$ در نیمه‌ی مثبت اعداد قرار دارد. یعنی حالتی پایین‌تر از ذره‌ای که ساکن است وجود ندارد (ویژه حالت تکانه با ویژه مقدار تکانه صفر). طیف انرژی از $-\infty$ تا 0 کاملاً غیرقابل دسترس است. با نگاه کردن به ساختار هامیلتونی ذره‌ی آزاد نیز می‌توان این مطلب را دید. انتظار داریم که علامت \mathbf{p} تغییر یابد، اما \mathbf{p}^2 نه. اما رابطه‌ی (۲۷-۴-۴) نتیجه می‌دهد:

$$\Theta^{-1} \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \Theta = \frac{-\mathbf{p}^2}{2m} \quad (۲۹-۴-۴)$$



شکل ۴-۱۱: تکانه، قبل و بعد از وارونی زمان

همه‌ی این نتایج نشان می‌دهند که اگر بخواهیم وارونی زمانی سودمند باشد، اجازه نداریم که آنها را از دو طرف (۴-۴-۲۶) حذف کنیم. بنابراین، بهتر است که Θ پادیکانی باشد. در این مورد طرف راست رابطه‌ی (۴-۴-۲۶) می‌شود:

$$\Theta iH| \rangle = -i\Theta H| \rangle \quad (۴-۴-۳۰)$$

بنا به خاصیت پادمتقارنی (۴-۴-۱۳ ب)، حال می‌توانیم آنها را از دو طرف (۴-۴-۲۶) حذف کنیم. در نهایت بنا به (۴-۴-۳۰) نتیجه می‌شود که:

$$\Theta H = H\Theta \quad (۴-۴-۳۱)$$

معادله‌ی (۴-۴-۳۱) خاصیت بنیادی هامیلتونی را تحت وارونی زمان مشخص می‌کند. با وجود این معادله، پیچیدگی‌هایی که پیش از وجود داشت [(۴-۴-۲۷) تا (۴-۴-۲۹) را ببینید] دیگر حضور ندارند و می‌توانیم نتایج معنی‌داری به دست آوریم. به این ترتیب می‌بینیم که Θ همواره پادمتقارن است.

قبلاً گفتیم، بهتر است که از اثر دادن یک عملگر پادیکانی از سمت راست بر روی یک خودداری کنیم. با این حال می‌توان نوشت:

$$\langle \beta | \Theta | \alpha \rangle \quad (۴-۴-۳۲)$$

که همواره به شکل زیر شناخته می‌شود:

$$(\langle \beta |) \cdot (\Theta | \alpha \rangle) \quad (۴-۴-۳۳)$$

و هیچ گاه به شکل زیر نیست:

$$\langle \beta | \Theta | \alpha \rangle \quad (۳۴-۴-۴)$$

در واقع حتی سعی نمی‌کنیم که $\langle \beta | \Theta$ را تعریف کنیم. در این جا نمادگذاری براکت دیراک کمی گیج کننده است. اما باید گفت که این نمادگذاری برای کار با عملگرهای خطی ساخته شده است، نه عملگرهای پادخطی.

با این تذکر احتیاط آمیز، در موقعیتی هستیم که می‌توانیم درباره‌ی رفتار عملگرها تحت وارونی زمانی بحث کنیم. با این نقطه نظر که عملگر Θ روی کت‌ها عمل می‌کند کار را ادامه می‌دهیم:

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \Theta|\alpha\rangle, \quad |\tilde{\beta}\rangle = \Theta|\beta\rangle \quad (۳۵-۴-۴)$$

گاهی مناسب تر است که درباره‌ی عملگرهایی - در حالت خاص، مشاهده پذیرها - که تحت وارونی زمانی زوج یا فرد هستند، صحبت کنیم. با معادله‌ی بسیار مهم زیر کار را آغاز می‌کنیم.

$$\langle \beta | \otimes | \alpha \rangle = \langle \tilde{\alpha} | \Theta \otimes \Theta^{-1} | \tilde{\beta} \rangle \quad (۳۶-۴-۴)$$

که در آن \otimes یک عملگر خطی است. این معادله، منحصرأ از طبیعت پادیکانی عملگر Θ تبعیت می‌کند. برای اثبات اجازه دهید تا تعریف زیر را انجام دهیم:

$$|\gamma\rangle \equiv \otimes^\dagger |\beta\rangle \quad (۳۷-۴-۴)$$

با دوگان گیری متناظر داریم:

$$|\gamma\rangle \stackrel{DC}{\leftrightarrow} \langle \beta | \otimes = \langle \gamma | \quad (۳۸-۴-۴)$$

بنابراین

$$\begin{aligned} \langle \beta | \otimes | \alpha \rangle &= \langle \gamma | \alpha \rangle = \langle \tilde{\alpha} | \tilde{\gamma} \rangle \\ &= \langle \tilde{\alpha} | \Theta \otimes \Theta^\dagger | \beta \rangle = \langle \tilde{\alpha} | \Theta \otimes \Theta^\dagger \Theta^{-1} \Theta | \beta \rangle \\ &= \langle \tilde{\alpha} | \Theta \otimes \Theta^\dagger \Theta^{-1} | \tilde{\beta} \rangle \end{aligned} \quad (۳۹-۴-۴)$$

که این اثبات معادله است. در حالت خاص، برای مشاهده پذیر هر میتی A داریم:

$$\langle \beta | A | \alpha \rangle = \langle \tilde{\alpha} | \Theta A \Theta^{-1} | \tilde{\beta} \rangle \quad (۴۰-۴-۴)$$

این که مشاهده پذیر تحت وارونی زمانی زوج یا فرد باشد بستگی به این دارد که کدام یک از علامت‌های پایین یا بالا در معادله‌ی زیر برقرار باشد:

$$\Theta A \Theta^{-1} = \pm A \quad (۴۱-۴-۴)$$

توجه کنید که این معادله، به همراه معادله‌ی (۴-۴-۴)، یک قید فازی بر روی آرایه‌های ماتریسی A که با توجه به حالت‌های وارونه زمان به شکل زیر به دست آمده‌اند، قرار می‌دهد.

$$\langle \beta | A | \alpha \rangle = \pm \langle \tilde{\beta} | A | \tilde{\alpha} \rangle^* \quad (۴۲-۴-۴)$$

اگر $|\beta\rangle$ برابر با $|\alpha\rangle$ باشد، آن وقت راجع به مقدار انتظاری حرف خواهیم زد. داریم:

$$\langle \alpha | A | \alpha \rangle = \pm \langle \tilde{\alpha} | A | \tilde{\alpha} \rangle \quad (۴۳-۴-۴)$$

که در آن $\langle \tilde{\alpha} | A | \tilde{\alpha} \rangle$ مقدار انتظاری است که با توجه به حالت وارونه زمان به دست می‌آید.

به عنوان یک مثال بگذارید تا مقدار انتظاری p را بنگریم. منطقی است، متوقع باشیم که مقدار انتظاری

p با توجه به حالت وارونه زمان، تغییر علامت دهد. بنابراین:

$$\langle \alpha | p | \alpha \rangle = - \langle \tilde{\alpha} | p | \tilde{\alpha} \rangle \quad (۴۴-۴-۴)$$

بنابراین p یک عملگر فرد است، داریم:

$$\Theta p \Theta^{-1} = -p \quad (۴۵-۴-۴)$$

از این رابطه نتیجه می‌گیریم که:

$$\begin{aligned} p \Theta |p'\rangle &= - \Theta p \Theta^{-1} \Theta |p'\rangle \\ &= (-p') \Theta |p'\rangle \end{aligned} \quad (۴۶-۴-۴)$$

معادله‌ی (۴۶-۴-۴) با ادعای پیشین ما، مبنی بر این که $\Theta |p'\rangle$ یک ویژه‌کت تکانه با ویژه مقدار $-p'$ است، سازگار می‌باشد. می‌توان $\Theta |p'\rangle$ را با یک انتخاب فاز مناسب برابر با خود $|p'\rangle$ گرفت. به همین صورت داریم:

$$\begin{aligned} \Theta x \Theta^{-1} &= x \\ \Theta |x'\rangle &= |x'\rangle \quad (\text{up to a phase}) \end{aligned} \quad (۴۷-۴-۴)$$

با استفاده از الزامات منطقی اولیه:

$$\langle \alpha | x | \alpha \rangle = \langle \tilde{\alpha} | x | \tilde{\alpha} \rangle \quad (۴۸-۴-۴)$$

اکنون می‌توانیم ناوردایی رابطه جابه‌جایی بنیادی را بیازماییم:

$$[x_i, p_j] | \rangle = i\hbar \delta_{ij} | \rangle \quad (۴۹-۴-۴)$$

که در آن کت نانوشتته Θ | بیان کننده‌ی هر کتی می‌تواند باشد. با اعمال Θ به هر دو سمت (۴-۴-۴۹) داریم:

$$\Theta [x_i, p_j] \Theta^{-1} \Theta | \rangle = \Theta i\hbar \delta_{ij} | \rangle \quad (۵۰-۴-۴)$$

که نتیجه می‌دهد، بعد از عبور Θ از $i\hbar$:

$$[x_i, (-p_j)] \Theta | \rangle = -i\hbar \delta_{ij} \Theta | \rangle \quad (۵۱-۴-۴)$$

توجه کنید که رابطه‌ی جابه‌جایی بنیادی $[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$ با استفاده از این واقعیت که Θ پادیکانی است معتبر باقی می‌ماند. این مسأله دلیل دیگری است مبنی بر این که چرا Θ پادیکانی در نظر گرفته شد. در غیر این صورت مجبور بودیم که یکی از روابط (۴-۴-۴۵) یا (۴-۴-۴۷) را نداشته باشیم. به همین صورت برای پایستگی

$$[J_i, J_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_k \quad (۵۲-۴-۴)$$

باید عملگر تکانه‌ی زاویه‌ای تحت وارونی زمانی فرد باشد. یعنی:

$$\Theta \mathbf{J} \Theta^{-1} = -\mathbf{J} \quad (۵۳-۴-۴)$$

این رابطه برای سیستم‌های بدون اسپین که در آن \mathbf{J} برابر با $\mathbf{x} \times \mathbf{p}$ است، برقرار می‌باشد. برای اثبات این رابطه باید استنباط کنیم که عملگر چرخش و عملگر وارونی زمانی با هم جابه‌جا می‌شوند (به i اضافه توجه کنید).

تابع موج

فرض کنید در یک زمان مثلاً $t = 0$ ، یک سیستم تک ذره‌ای بدون اسپین در حالتی یافت می‌شود که آن را با $|\alpha\rangle$ نشان می‌دهیم. تابع موج آن $\langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle$ به عنوان ضریب بسط در نمایش مکان ظاهر می‌شود.

$$|\alpha\rangle = \int d^3x' |\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \quad (۵۴-۴-۴)$$

با اعمال عملگر وارونی زمان داریم:

$$\begin{aligned} \Theta |\alpha\rangle &= \int d^3x' \Theta |\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle^* \\ &= \int d^3x' |\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle^* \end{aligned} \quad (۵۵-۴-۴)$$

که در آن با انتخاب فاز مناسب می توان $\Theta|x'\rangle$ را به خود $|x'\rangle$ تبدیل کرد. به این صورت رابطه‌ی زیر حاصل می‌شود:

$$\psi(x') \rightarrow \psi^*(x') \quad (۵۶-۴-۴)$$

این رابطه را قبلاً با نگاه به معادله‌ی موج شرودینگر $[(۵-۴-۴) \text{ را ببینید}]$ به دست آوردیم. قسمت زاویه‌ای تابع موج به وسیله‌ی هماهنگ‌های کروی Y_l^m به دست می‌آید. با قرارداد فازی معمولی داریم:

$$Y_l^m(\theta, \phi) \rightarrow Y_l^{m*}(\theta, \phi) = (-1)^m Y_l^{-m}(\theta, \phi) \quad (۵۷-۴-۴)$$

حال $Y_l^m(\theta, \phi)$ تابع موج $|l, m\rangle$ است $[(۲۳-۶-۳) \text{ را ببینید}]$. بنابراین از $(۵۶-۴-۴)$ نتیجه می‌گیریم:

$$\Theta|l, m\rangle = (-1)^m |l, -m\rangle \quad (۵۸-۴-۴)$$

اگر چگالی جریان احتمال $(۱۶-۴-۲)$ را برای تابعی از نوع $(۲۲-۶-۳)$ که به شکل $R(r)Y_l^m$ است، بررسی کنیم، می‌توانیم نتیجه بگیریم که برای $m > 0$ وقتی از جهت مثبت محور z نگاه کنیم شار جریان در خلاف جهت عقربه‌های ساعت است. تابع موج برای حالت وارونه زمان متناظر، دارای شارش جریان احتمال در خلاف جهت قبل است چون علامت m برعکس شده است. تمام این گفته‌ها بسیار منطقی است. به عنوان یک نتیجه‌ی غیردیهی از ناوردایی وارونی زمانی، قضیه‌ی بسیار مهمی را بیان می‌کنیم که در ارتباط با ویژه تابع انرژی یک ذره‌ی بدون اسپین است.

قضیه. فرض کنید که هامیلتونی تحت وارونی زمانی ناوردا و ویژه کت انرژی $|n\rangle$ غیرتبهگن باشند. آنگاه ویژه تابع متناظر حقیقی است (یا به طور عام، برابر با یک تابع حقیقی ضربدر یک عامل فاز مستقل از x است).

اثبات. برای اثبات این قضیه، ابتدا باید توجه کرد که:

$$H\Theta|n\rangle = \Theta H|n\rangle = E_n \Theta|n\rangle \quad (۵۹-۴-۴)$$

بنابراین $|n\rangle$ و $\Theta|n\rangle$ انرژی یکسانی دارند. ناتبهگنی موجود در فرض، ما را مجبور می‌کند که، نتیجه بگیریم که $|n\rangle$ و $\Theta|n\rangle$ باید حالت یکسانی را ارائه دهند. در غیر این صورت دو حالت متفاوت با انرژی یکسان E_n خواهیم داشت که این یک تناقض آشکار است. اجازه دهید تا یادآوری کنیم که تابع موج $|n\rangle$ و $\Theta|n\rangle$ به ترتیب برابر با $\langle x'|n\rangle$ و $\langle x'|n\rangle^*$ هستند. که این دو باید یکسان باشند. یعنی:

$$\langle x'|n\rangle = \langle x'|n\rangle^* \quad (۶۰-۴-۴)$$

این رابطه برای تمام مقاصد عملی برقرار است. یا می‌توان به طور دقیق‌تر این طور بیان کرد که این دو می‌توانند حداکثر در یک عامل فاز مستقل از x با هم متفاوت باشند. □

بنابراین، برای مثال اگر یک حالت مقید غیرتبهگن داشته باشیم، تابع موج آن همواره حقیقی است. از طرف دیگر، در اتم هیدروژن با $l \neq 0$ و $m \neq 0$ ، ویژه تابع انرژی که با تعریف اعداد کوانتومی (n, l, m) مشخص می شود، مختلط است، چون Y_l^m مختلط است. این نقضی بر قضیه‌ی ما وارد نمی کند چون $|n, l, m\rangle$ و $|n, l, -m\rangle$ تبهگن هستند. به همین صورت، تابع موج یک موج تخت $e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar}$ مختلط است، اما این حالت با $e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar}$ تبهگن است.

دیدیم که برای یک سیستم بدون اسپین، تابع موج حالت وارونه زمان، مثلاً در زمان $t = 0$ به سادگی با گرفتن همیوگ مختلط به دست می آید. برای کت $|\alpha\rangle$ که به صورت $(4-4-16)$ یا $(4-4-54)$ نوشته می شود. عملگر Θ همان عملگر همیوگ مختلط K است چون K و Θ وقتی روی کت پایه‌ی $|a'\rangle$ (یا $|x'\rangle$) اثر می کنند، اثر یکسانی دارند. اما، توجه می کنیم که این وضعیت، با وقتی که کت $|\alpha\rangle$ را برحسب جملات ویژه کت تکانه بسط می دهیم کاملاً متفاوت است، چون Θ باید $|\mathbf{p}'\rangle$ را به $|\mathbf{p}'\rangle$ تغییر دهد. به طوری که:

$$\Theta|\alpha\rangle = \int d^3p' |-\mathbf{p}'\rangle \langle \mathbf{p}'|\alpha\rangle^* = \int d^3p' |\mathbf{p}'\rangle \langle -\mathbf{p}'|\alpha\rangle^* \quad (4-4-61)$$

آشکار است که تابع موج در فضای تکانه برای یک حالت وارونه زمان فقط با همیوگ مختلط کردن تابع موج در فضای تکانه‌ی اصلی به دست نمی آید، بلکه باید $\Phi^*(-\mathbf{p}')$ را به عنوان تابع موج فضای تکانه برای حالت وارونه زمان تعریف کنیم. این وضعیت یک بار دیگر این نکته اساسی را مشخص می کند که شکل خاص Θ به نمایش خاصی که به کار می بریم بستگی دارد.

وارونی زمان برای یک سیستم اسپین $\frac{1}{2}$

این وضعیت در حالت خاص برای یک ذره با اسپین $\frac{1}{2}$ جالب تر می شود. از بخش ۳-۲ یادآوری می کنیم که می توان ویژه کت $\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}}$ با ویژه مقدار $\hat{\mathbf{n}}$ را به شکل زیر نوشت:

$$|\hat{\mathbf{n}}; +\rangle = e^{-iS_z\alpha/\hbar} e^{-iS_y\beta/\hbar} |+\rangle \quad (4-4-62)$$

که در آن $\hat{\mathbf{n}}$ به ترتیب با زاویه‌های قطبی و سمتی α و β مشخص می شود. با استفاده از $(4-4-53)$ داریم:

$$\Theta|\hat{\mathbf{n}}; +\rangle = e^{-iS_z\alpha/\hbar} e^{-iS_y\beta/\hbar} \Theta|+\rangle = \eta|\hat{\mathbf{n}}; -\rangle \quad (4-4-63)$$

از طرف دیگر، به سادگی می توان نشان داد که:

$$|\hat{\mathbf{n}}; -\rangle = e^{-i\alpha S_z/\hbar} e^{-i(\pi+\beta)S_y/\hbar} |+\rangle \quad (4-4-64)$$

در حالت عام، قبل تر نشان دادیم که ضرب UK یک عملگر پادیکانی است. با مقایسه‌ی (۴-۴-۶۳) و (۴-۴-۶۴) و با قراردادن Θ به جای UK و توجه به این نکته که با اعمال K روی کت پایه‌ی $|+\rangle$ خود $|+\rangle$ به دست می‌آید. می‌بینیم که:

$$\Theta = \eta e^{-i\pi S_y / \hbar} K = -i\eta \left(\frac{2S_y}{\hbar} \right) K \quad (۴-۴-۶۵)$$

که در آن η بیان کننده‌ی یک فاز اختیاری است (یک عدد مختلط با اندازه‌ی واحد). راه دیگر برای به دست آوردن (۴-۴-۶۵) این است که نشان دهیم اگر $\chi(\hat{n}; +)$ ویژه اسپینور دومؤلفه‌ای متناظر با $|+\rangle$ باشد، آنگاه:

$$\sigma \cdot \hat{n} \chi(\hat{n}; +) = \chi(\hat{n}; +), \text{ then} \\ -i\sigma_y \chi^*(\hat{n}; +) \quad (۴-۴-۶۶)$$

(به مزدوج مختلط دقت کنید!) ویژه اسپینور متناظر با $|-\rangle$ است. باز هم با از یک عامل فاز صرف نظر می‌کنیم، مسأله‌ی ۱۷ فصل را ببینید. ظاهر S_y یا σ_y این طور نشان می‌دهد که ما در نمایشی کار می‌کنیم که در آن S_z قطری است و آرایه‌های غیرصفر ماتریس S_y کاملاً موهومی هستند. توجه می‌کنیم که:

$$e^{-i\pi S_y / \hbar} |+\rangle = + |-\rangle, \quad e^{-i\pi S_y / \hbar} |-\rangle = - |+\rangle \quad (۴-۴-۶۷)$$

با استفاده از (۴-۴-۶۷)، در موقعیتی هستیم که روی اثر Θ - که به صورت (۴-۴-۶۵) نوشته شده است - بر کلی‌ترین کت اسپین $\frac{1}{2}$ کار کنیم:

$$\Theta (c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle) = + \eta c_+^* |-\rangle - \eta c_-^* |+\rangle \quad (۴-۴-۶۸)$$

بگذارید تا یک بار دیگر Θ را اثر دهیم:

$$\Theta^2 (c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle) = - |\eta|^2 c_+ |+\rangle - |\eta|^2 c_- |-\rangle \\ = - (c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle) \quad (۴-۴-۶۹)$$

یا

$$\Theta^2 = -1 \quad (۴-۴-۷۰)$$

(که در آن ۱- یعنی ۱- ضربدر عملگر واحد) این رابطه برای تمام جهت گیری‌های اسپینی برقرار است. این یک نتیجه‌ی غیرعادی است. توجه به این نکته مهم است که نتیجه‌گیری ما کاملاً مستقل از انتخاب فاز

است. به ازای هر η ، (η, η) برقرار است. در عوض می‌توانیم ببینیم که دو بار اعمال متوالی Θ بر یک حالت بدون اسپین می‌دهد:

$$\Theta^2 = +1 \quad (71-4-4)$$

این رابطه از $(58-4-4)$ نیز مشهود است.

در حالت کلی‌تر، اکنون ثابت می‌کنیم که:

$$\Theta^2 |j \text{ نیم صحیح}\rangle = - |j \text{ نیم صحیح}\rangle \quad (72-4-4 \text{ الف})$$

$$\Theta^2 |j \text{ صحیح}\rangle = + |j \text{ صحیح}\rangle \quad (72-4-4 \text{ ب})$$

بنابراین ویژه مقدار Θ^2 با $(-1)^{2j}$ به دست می‌آید. ابتدا توجه می‌کنیم که $(65-4-4)$ برای زاختیاری به صورت زیر تعمیم داده می‌شود:

$$\Theta = \eta e^{-i\pi J_y / \hbar} K \quad (73-4-4)$$

برای کت $|\alpha\rangle$ که بر حسب ویژه کت‌های $|j, m\rangle$ بسط داده شده است، داریم:

$$\begin{aligned} \Theta (\Theta \sum |jm\rangle \langle jm|\alpha\rangle) &= \Theta (\eta \sum e^{-i\pi J_y / \hbar} |jm\rangle \langle jm|\alpha\rangle^*) \\ &= |\eta|^2 e^{-2i\pi J_y / \hbar} \sum |jm\rangle \langle jm|\alpha\rangle \end{aligned} \quad (74-4-4)$$

اما

$$e^{-2i\pi J_y / \hbar} |jm\rangle = (-1)^{2j} |jm\rangle \quad (75-4-4)$$

همان‌طور که از خاصیت ویژه کت‌های تکانه‌ی زاویه‌ای تحت چرخش 2π نیز مشهود است.

در $(72-4-4 \text{ ب})$ ، $|j \text{ صحیح}\rangle$ را می‌توان برای بیان حالت اسپین به کار برد:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle - |-\rangle) \quad (76-4-4)$$

این حالت می‌تواند یک سیستم دو الکترونی یا یک حالت مداری $|l, m\rangle$ برای یک ذره‌ی بدون اسپین باشد. این مهم است که z در این جا صحیح است. در حالی که $|j \text{ نیم صحیح}\rangle$ برای مثال می‌تواند بیان‌کننده‌ی یک سیستم سه الکترونی با هر نوع ترکیب‌بندی باشد. در واقع، برای سیستم‌هایی که منحصرأً از الکترون‌ها ساخته شده است، هر سیستمی که تعداد الکترون آن فرد (یا زوج) باشد - بدون توجه به جهت‌گیری فضایی برای مثال تکانه‌ی زاویه‌ای نسبی مداری - تحت اثر Θ^2 فرد (یا زوج) است. حتی لازم نیست که این حالت‌ها، ویژه حالت J^2 باشند!

در این جا تذکراتی راجع به انتخاب فاز می دهیم. در بحث قبلی که بر پایه‌ی نمایش مکان استوار بود، دیدیم که با قرارداد معمولی برای هماهنگ‌های کروی، طبیعی است که فاز اختیاری که برای $|l, m\rangle$ تحت وارونی زمانی انتخاب می کنیم، به صورتی باشد که:

$$\Theta|l, m\rangle = (-1)^m |l, -m\rangle \quad (۷۷-۴-۴)$$

بعضی از نویسندگان مشتاقند تا این قرارداد را برای رابطه‌ی زیر هم در نظر بگیرند:

$$\Theta|j, m\rangle = (-1)^m |j, -m\rangle \quad (\text{ز یک عدد صحیح است}) \quad (۷۸-۴-۴)$$

بدون توجه به اینکه ز در ارتباط با l یا s باشد (برای یک سیستم با اسپین صحیح). طبیعی است که بررسییم، آیا برای یک سیستم اسپین $\frac{1}{2}$ ، $|j, m\rangle$ که با توجه به روش ویگنر و شوینگر به صورت یک موجود اسپین $\frac{1}{2}$ "اولیه" ساخته می شود با رابطه‌ی (۷۲-۴-۴) سازگار است؟ به سادگی می توان دید که این سازگاری وقتی رخ می دهد که η در (۷۳-۴-۴) برابر با i باشد. در واقع به طور عام می توانیم داشته باشیم:

$$\Theta|j, m\rangle = i^{2m} |j, -m\rangle \quad (۷۹-۴-۴)$$

که این رابطه برای هر زای برقرار است، حال می خواهد ز نیم صحیح باشد یا اینکه صحیح باشد. مسأله‌ی ۱۰ این فصل را ببینید. به خواننده تذکر می دهیم که این تنها قراردادی نیست که در متون یافت می شود (برای مثال فراونفلدر و هانلی ۱۹۷۴ را ببینید). برای برخی از کاربردهای فیزیکی، بهتر است که از انتخاب‌های دیگر استفاده کنیم. برای مثال، قرارداد فازی که آرایه‌های ماتریسی عملگر J_{\pm} را ساده می کند، قرارداد فازی‌ای نیست که خواص عملگر وارونی زمان را ساده می سازد. یک بار دیگر تأکید می کنیم که (۷۰-۴-۴) کاملاً مستقل از قرارداد فازی است.

با به دست آوردن رفتار ویژه کت‌های تکانه‌ی زاویه‌ای تحت وارونی زمان، در موقعیتی هستیم که یکبار دیگر مقادیر انتظاری یک عملگر هرمیتی را مورد مطالعه قرار دهیم. با یادآوری (۴۳-۴-۴) تحت وارونی زمانی به دست می آوریم (عامل i^{2m} حذف می شود)

$$\langle \alpha, j, m | A | \alpha, j, m \rangle = \pm \langle \alpha, j, -m | A | \alpha, j, -m \rangle \quad (۸۰-۴-۴)$$

حال فرض می کنیم که A مؤلفه‌ای از تانسور کروی $T_q^{(k)}$ است. به خاطر قضیه‌ی ویگنر-اکارت، تنها کافی است که آرایه‌ی ماتریسی مؤلفه‌ی $q = 0$ را بیازماییم. در حالت کلی $T^{(k)}$ (هرمیتی فرض می شود) بنا به این که مؤلفه‌ی $q = 0$ کدام یک از علامت‌های مثبت یا منفی را در رابطه‌ی زیر برقرار سازد، تحت وارونی زمانی، زوج یا فرد گفته می شود:

$$\Theta T_{q=0}^{(k)} \Theta^{-1} = \pm T_{q=0}^{(k)} \quad (۸۱-۴-۴)$$

معادله‌ی (۴-۴-۸۰) برای $A = T_0^{(k)}$ می‌شود:

$$\langle \alpha, j, m | T_0^{(k)} | \alpha, j, m \rangle = \pm \langle \alpha, j, -m | T_0^{(k)} | \alpha, j, -m \rangle \quad (۴-۴-۸۲)$$

با استفاده از (۴-۴-۴۶) تا (۴-۴-۴۹) انتظار داریم که صرف نظر از یک عامل فضا $|\alpha, j, -m\rangle = \mathcal{D}(0, \pi, 0) |\alpha, j, m\rangle$ باشد. سپس از (۳-۱۰-۲۲) برای $T_0^{(k)}$ استفاده می‌کنیم که نتیجه می‌دهد:

$$\mathcal{D}^\dagger(0, \pi, 0) T_0^{(k)} \mathcal{D}(0, \pi, 0) = (-1)^k T_0^{(k)} + (q \neq 0 \text{ مولفه‌های}) \quad (۴-۴-۸۳)$$

که در آن از $\mathcal{D}_{00}^{(k)}(0, \pi, 0) = P_k(\cos \pi) = (-1)^k$ و اینکه مؤلفه‌های $q = 0$ وقتی بین $|\alpha, j, m\rangle$ و $|\alpha, j, m\rangle$ قرار می‌گیرند صفر می‌شوند، استفاده کرده‌ایم. نتیجه‌ی کلی عبارت است از:

$$\langle \alpha, j, m | T_0^{(k)} | \alpha, j, m \rangle = \pm (-1)^k \langle \alpha, j, m | T_0^{(k)} | \alpha, j, m \rangle \quad (۴-۴-۸۴)$$

به‌عنوان یک مثال $k=1$ را انتخاب می‌کنیم. مقدار انتظاری $\langle x \rangle$ با توجه به ویژه حالت‌های m و z صفر می‌شود. ممکن است استدلال کنیم که ما قبلاً با توجه به ملاحظات پاریته می‌دانستیم که اگر مقدار انتظاری برحسب ویژه حالت‌های پاریته گرفته شود آنگاه $\langle x \rangle = 0$ است [۴-۲-۴۱] را ببینید. اما باید توجه کرد که در اینجا لازم نیست که $|\alpha, j, m\rangle$ ویژه‌کت‌های پاریته باشند! برای مثال $|\alpha, j, m\rangle$ برای ذرات اسپین $\frac{1}{2}$ باید به صورت $\langle c_s | s_{1/2} \rangle + c_p | p_{1/2} \rangle$ باشد.

برهم‌کنش با میدان الکتریکی و مغناطیسی: تبهگنی گرامرز

یک ذره‌ی باردار را در یک میدان الکتریکی یا مغناطیسی فرض کنید. اگر تنها یک میدان الکتریکی داشته باشیم که با ذره‌ی باردار ما برهم‌کنش می‌کند، قسمت برهم‌کنشی هامیلتونی تنها برابر است با:

$$V(x) = e\phi(x) \quad (۴-۴-۸۵)$$

که در آن $\phi(x)$ پتانسیل الکتریکی است. از آن‌جا $\phi(x)$ یک تابع حقیقی از عملگر x است و تحت وارونی زمانی زوج است، داریم:

$$[\Theta, H] = 0 \quad (۴-۴-۸۶)$$

برخلاف مورد پاریته (۴-۴-۸۶) منجر به یک قانون پایستگی جذاب نمی‌شود. به این دلیل که:

$$\Theta U(t, t_0) \neq U(t, t_0) \Theta \quad (۴-۴-۸۷)$$

حتی اگر (۴-۴-۸۶) برقرار باشد، بحث ما در بخش ۴-۱ که به (۴-۱-۹) منجر شد نقض می شود. به عنوان یک نتیجه می توان دید که هیچ چیزی همچون "پایستگی عدد کوانتومی برگشت زمانی" وجود ندارد. اما همان طور که قبلاً ذکر کردیم. الزام (۴-۴-۸۶) به یک قید غیربدیهی روی فاز منتهی می شود که عبارت است از حقیقی بودن توابع موج غیرتبهگن برای سیستم بدون اسپین [(۴-۴-۵۹) و (۴-۴-۶۰) را ببینید].

یکی دیگر از نتایج ناوردایی تحت وارونی زمان تبهگنی کرامرز است. فرض کنید که H و Θ با هم جابه جا می شوند و $|n\rangle$ و $\Theta|n\rangle$ به ترتیب ویژه کت انرژی و حالت وارونه زمان آن باشند. از رابطه (۴-۴-۸۶) پیداست که $|n\rangle$ و $\Theta|n\rangle$ ویژه مقدار یکسان E_n را دارند ($\Theta H|n\rangle = H\Theta|n\rangle = E_n\Theta|n\rangle$). سؤال این است: آیا $|n\rangle$ و $\Theta|n\rangle$ توصیف گر حالت یکسانی هستند؟ اگر جواب مثبت باشد، $|n\rangle$ و $\Theta|n\rangle$ می توانند در یک عامل فاز با هم فرق داشته باشند. بنابراین:

$$\Theta|n\rangle = e^{i\delta}|n\rangle \quad (۴-۴-۸۸)$$

با اعمال دوباره Θ بر روی (۴-۴-۸۸) داریم:

$$\Theta^2|n\rangle = \Theta e^{i\delta}|n\rangle = e^{-i\delta}\Theta|n\rangle = e^{-i\delta}e^{i\delta}|n\rangle$$

بنابراین:

$$\Theta^2|n\rangle = +|n\rangle \quad (۴-۴-۸۹)$$

اما این رابطه برای سیستم هایی که دارای Z نیم صحیح هستند، غیرممکن است. برای چنین سیستم هایی Θ^2 همواره برابر با -1 است. بنابراین اجازه دهید تا این طور نتیجه بگیریم که $|n\rangle$ و $\Theta|n\rangle$ ، که دارای انرژی یکسانی هستند، متناظر با حالت هایی متفاوت با هم باشند. یعنی می باید یک تبهگنی وجود داشته باشد. این بدان معنی است که، برای مثال، در سیستمی که با تعداد فردی از الکترون تشکیل شده است و در یک میدان خارجی E قرار دارد، هر کدام از ترازهای انرژی می باید تبهگنی دو گانه داشته باشند و برای برقرار بودن این مسأله، پیچیدگی های ممکن E مهم نیست. در نظر گرفتن این مسأله برای الکترون های کریستال ها کاربردهای جالبی دارد که با استفاده از آن می توان دید که سیستم هایی که تعداد الکترون زوج و یا فرد دارند رفتارهای بسیار متفاوتی از خود نشان می دهند. از نظر تاریخی، کرامرز نخستین کسی بود که با حل صریح معادله ی شرودینگر تبهگنی این گونه را شناخت. پس از او، ویگنر تبهگنی کرامرز را به عنوان نتیجه ای از ناوردایی تحت وارونی زمانی بیان کرد.

حال بگذارید تا به بررسی برهم کنش با میدان مغناطیسی بپردازیم. در این حالت هامیلتونی H شامل جملاتی به صورت زیر است:

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{B}, \quad \mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}, \quad (\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}) \quad (۴-۴-۹۰)$$

که در آن میدان مغناطیسی، خارجی در نظر گرفته شده است. عملگرهای S و p تحت اثر وارونی زمانی فرد هستند. بنابراین این جملات برهم کنشی، نتیجه می گیریم که:

$$\Theta H \neq H \Theta \quad (91-4-4)$$

به عنوان یک مثال واضح، برای یک سیستم اسپین $\frac{1}{2}$ ، که اسپین آن رو به بالا است، حالت را با $|+\rangle$ نشان می دهیم که حالت وارونه زمان آن $|-\rangle$ می شود. این دو حالت در حضور میدان مغناطیسی خارجی، انرژی یکسانی ندارند. در حالت کلی، تهنگی کرامرز در سیستمی که شامل تعداد فردی از الکترون هاست با اعمال یک میدان مغناطیسی خارجی از بین می رود.

به این نکته توجه کنید که وقتی B را خارجی در نظر می گیریم، با وارونی زمان نمی توانیم B را تغییر دهیم. این بدان خاطر است که عملگر وارونی زمان، تنها روی الکترون اتمی که به عنوان یک سیستم کوانتومی بسته قلمداد می شود، اثر می کند. این مسأله را نباید با ناوردایی معادلات ماکسول (4-4-2) و معادله ی نیروی لورنتس تحت $t \rightarrow -t$ و (4-4-3)، که قبلاً مورد بحث قرار گرفت، اشتباه بگیریم. در آن جا وارونی زمان را روی تمام جهات اثر می دادیم. برای مثال، این وارونی زمانی حتی روی جریان موجود در سیم که میدان B را تولید می کرد، نیز اثر می نمود.

مسائل

۱- سه تراز پایین انرژی را به همراه تهنگی های آن ها برای سیستم های زیر بیابید (فرض کنید ذرات دارای جرم مساوی هستند و تمیز پذیرند)

الف- سه ذره با اسپین $\frac{1}{2}$ که با هم برهم کنشی ندارند و در جعبه ای به طول L واقع شده اند.

ب- چهار ذره با اسپین $\frac{1}{2}$ که با هم برهم کنشی ندارند و در جعبه ای به طول L واقع شده اند.

۲- بگذارید تا \mathcal{T}_a بیان گر عملگر انتقال [بردار جابه جایی \mathbf{d} است] و $\mathcal{D}(\hat{\mathbf{n}}, \phi)$ نشان دهنده ی عملگر چرخش $\hat{\mathbf{n}}$ و ϕ به ترتیب برابر با محور چرخش و زاویه ی چرخش هستند و π عملگر پاریته باشد. کدام یک از عملگرهای قسمت های سؤال با هم جابه جا می شوند؟ چرا؟

الف- \mathcal{T}_a و \mathcal{T}_a' (\mathbf{d} و \mathbf{d}' در جهت های مختلفی هستند).

ب- $\mathcal{D}(\hat{\mathbf{n}}, \phi)$ و $\mathcal{D}(\hat{\mathbf{n}}', \phi')$ ($\hat{\mathbf{n}}$ و $\hat{\mathbf{n}}'$ در جهت های مختلفی هستند).

ج- \mathcal{T}_a و π

د- $\mathcal{D}(\hat{\mathbf{n}}, \phi)$ و π

۳- حالت کوانتومی Ψ ، ویژه حالت همزمان عملگرهای هرمیتی A و B است که پاد جابه جا گردند:

$$AB + BA = 0$$

در رابطه با ویژه مقادیر A و B در حالت Ψ چه می توان گفت؟ با استفاده از عملگر پاریته (که می توان آنرا طوری انتخاب کرد که $\pi = \pi^{-1} = \pi^\dagger$ برقرار باشد) و عملگر تکانه، پاسخ خود را تشریح کنید.

۴- یک ذره با اسپین $\frac{1}{2}$ ، با یک پتانسیل خاص، به یک مرکز ثابت مقید شده است.

الف- تابع زاویه ای اسپین $\mathcal{Y}_{j=0}^{m=1/2}$ ، را بنویسید.

ب- عبارت $\mathcal{Y}_{j=0}^{m=1/2}(\sigma \cdot \mathbf{x})$ را بر حسب $\mathcal{Y}_{j,m}$ های دیگر، بنویسید.

ج- نشان دهید که نتیجه ی شما در قسمت (ب)، از نقطه نظر خواص انتقالی عملگر $\mathbf{S} \cdot \mathbf{x}$ ، تحت چرخش و وارونی فضایی (پاریته)، قابل درک است.

۵- به خاطر وجود برهم کنش های ضعیف (جریان طبیعی) یک پتانسیل ناقص پاریته، بین الکترون اتمی و هسته به شکل زیر وجود دارد:

$$V = \lambda [\delta^{(3)}(\mathbf{x}) \mathbf{S} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{S} \cdot \mathbf{p} \delta^{(3)}(\mathbf{x})]$$

که در آن \mathbf{S} و \mathbf{p} عملگرهای اسپین و تکانه ی الکترون هستند و فرض شده است که هسته در مبدا واقع است. به عنوان نتیجه، حالت پایه ی اتم قلیایی که معمولاً با $|n, l, j, m\rangle$ مشخص می شود، در عمل شامل سهم بسیار کمی از سایر ویژه حالت ها نیز هست، به طوری که:

$$|n, l, j, m\rangle \rightarrow |n, l, j, m\rangle + \sum_{n'l'j'm'} C_{n'l'j'm'} |n', l', j', m'\rangle$$

تنها با در نظر گرفتن خاصیت های تقارنی، در مورد (n', l', j', m') هایی که سهم غیر صفر دارند چه می توانید بگویید؟ فرض کنید که توابع موج شعاعی و ترازهای انرژی همگی معلوم باشند. مشخص کنید که چطور می توان $C_{n'l'j'm'}$ را محاسبه کرد؟ آیا قیده های بیشتری برای (n', l', j', m') به دست می آوریم؟

۶- یک چاه پتانسیل دو گانه ی مستطیلی متقارن، در نظر بگیرید:

$$V = \begin{cases} \infty & \text{برای } |x| > a + b \\ 0 & \text{برای } a < |x| < a + b \\ V_0 > 0 & \text{برای } |x| < a \end{cases}$$

فرض کنید که V_0 در مقایسه با انرژی های ترازهای پایین قابل مقایسه باشد. عبارتی تقریبی برای جدا شدگی انرژی، بین دو حالتی که پایین ترین انرژی را دارند به دست آورید.

۷- الف- فرض کنید که $\Psi(\mathbf{x}, t)$ تابع موج ذره بدون اسپینی متناظر با موج تخت در سه بعد باشد. نشان دهید که $\Psi^*(\mathbf{x}, -t)$ تابع موج یک موج تخت، با جهت تکانه ی برعکس است.

ب- فرض کنید که $\chi(\hat{n})$ ، ویژه اسپینور $\sigma \cdot \hat{n}$ با ویژه مقدار +1 باشد. با استفاده از شکل صریح $\chi(\hat{n})$ (برحسب زوایای قطبی β و سمتی γ که با \hat{n} مشخص می‌شوند) نشان دهید که $-i\sigma_2 \chi^*(\hat{n})$ ویژه اسپینور دو مؤلفه‌ای با جهت اسپین برعکس است.

۸- الف. فرض کنید که هامیلتونی تحت وارونی زمان ناوردا باشد، اثبات کنید که تابع موج یک سیستم بدون اسپین غیرتبهگن، در هر لحظه‌ای از زمان حقیقی است.

ب. تابع موج برای یک حالت موج تخت در $t = 0$ با تابع مختلط $e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}/\hbar}$ داده می‌شود. چرا این مسأله ناوردایی وارونی زمان را نقض نمی‌کند؟

۹- الف. $\Phi(\mathbf{p}')$ را تابع موج در فضای تکانه، برای حالت $|\alpha\rangle$ در نظر بگیرید، یعنی $\langle \mathbf{p}' | \alpha \rangle = \Phi(\mathbf{p}')$. تابع موج در فضای تکانه، برای حالت وارونه زمان $\Theta|\alpha\rangle$ با کدام یک از حالت‌های $\Phi(\mathbf{p}')$ ، $\Phi(-\mathbf{p}')$ ، $\Phi^*(\mathbf{p}')$ یا $\Phi^*(-\mathbf{p}')$ داده می‌شود؟ پاسخ خود را شرح دهید.

۱۰- الف. حالت وارونه زمان متناظر با $\mathcal{D}(R)|j, m\rangle$ کدام است؟

ب. با استفاده از خواص وارونی زمان و چرخش‌ها، ثابت کنید که:

$$\mathcal{D}_{m' m}^{(j)*}(R) = (-1)^{m-m'} \mathcal{D}_{-m', -m}^{(j)}(R)$$

ج. ثابت کنید که $\Theta|j, m\rangle = i^{2m}|j, -m\rangle$.

۱۱- یک ذره‌ی بدون اسپین را در نظر بگیرید که با پتانسیل $V(\mathbf{x})$ آنچنان به یک مرکز ثابت شده است که هیچ کدام از ترازهای انرژی آن تبهگن نیستند. با استفاده از ناوردایی وارونی زمانی ثابت کنید که برای هر ویژه حالتی:

$$\langle \mathbf{L} \rangle = 0$$

(این حالت به فروکشی تکانه‌ی زاویه‌ای مداری معروف است.) اگر تابع موج چنین حالتی به ویژه حالت‌های غیرتبهگن به صورت زیر بسط داده شود:

$$\sum_l \sum_m F_{lm}(r) Y_l^m(\theta, \phi)$$

چه نوع قیدی برای فاز بر روی $F_{lm}(r)$ به دست می‌آوریم؟

۱۲- هامیلتونی یک سیستم اسپین ۱ با رابطه‌ی زیر داده می‌شود:

$$H = AS_x^2 + B(S_x^2 - S_y^2)$$

با پیدا کردن دقیق ویژه حالت‌های بهنجار شده‌ی انرژی و ویژه مقادیر آن‌ها این مسأله را حل کنید. (در عمل چنین هامیلتونی وابسته به اسپینی، در فیزیک کریستال‌ها کاربرد دارد.) آیا این هامیلتونی تحت وارونی زمان

ناوردا است؟ ویژه حالت‌های بهنجار تحت تبدیل وارونی زمانی چطور تغییر می‌کنند؟

فصل پنجم

روش‌های تقریبی

در مکانیک کوانتومی مسائل کمی (چه با هامیلتونی‌های مستقل از زمان و چه با هامیلتونی‌های وابسته به زمان) به‌طور دقیق قابل حل هستند. بنابراین ناگزیر هستیم که دست به دامن برخی از روش‌های تجربی گردیم. ممکن است تصور کنید که با در اختیار داشتن یک کامپیوتر پرسرعت همیشه می‌توان با استفاده از روش‌های حل عددی این مسائل را با درجه‌ی دقت دلخواه حل کرد. با این حال قبل از آن که به چنین کامپیوتر پرسرعتی دسترسی پیدا کنیم، مهم است که فیزیک اساسی این روش‌های تقریبی را بدانیم. این فصل به روش‌های تقریبی مسائل حالت مقید اختصاص یافته است.

۱.۵ نظریه‌ی اختلال مستقل از زمان: حالت غیرتبهگن

شرح مسأله

روش تقریبی مورد بحث در این جا، نظریه‌ی اختلال مستقل از زمان است که گاهی به آن نظریه‌ی اختلال رایلی-شرودینگر گفته می‌شود. هامیلتونی مستقل از زمان H را طوری در نظر می‌گیریم که بتوان آن را به‌صورت دو قسمت جداگانه به‌شکل زیر نوشت:

$$H = H_0 + V \quad (1-1-5)$$

در حالتی که $V = 0$ است فرض می‌شود که مسأله قابل حل می‌باشد، یعنی هم ویژه‌کت‌های انرژی $|n^{(0)}\rangle$ و هم ویژه مقادیر انرژی $E_n^{(0)}$ به‌طور دقیق معلومند:

$$H_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle \quad (2-1-5)$$

اما ما می‌خواهیم ویژه‌کت‌ها و ویژه مقادیر تقریبی هامیلتونی کل مسأله را به‌دست آوریم:

$$(H_0 + V) |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (3-1-5)$$

که در آن V به اختلال معروف است. در این جا V نشان دهنده عملگر پتانسیل کل نیست. برای مثال فرض کنید که اتم هیدروژن در یک میدان الکتریکی یا مغناطیسی خارجی قرار گیرد. هامیلتونی مختل نشده H_0 یک انرژی جنبشی $\mathbf{p}^2/2m$ و یک پتانسیل کولنی ناشی از حضور پروتون‌های هسته به اندازه $e^2/r -$ است. تنها آن قسمت از پتانسیل که ناشی از به هم کشش با میدان خارجی \mathbf{E} یا \mathbf{B} است، با اختلال V نشان داده می‌شود.

به جای (۳-۱-۵) مرسوم است که عبارت زیر را حل کنیم:

$$(H_0 + \lambda V)|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (۴-۱-۵)$$

که λ در آن یک کمیت حقیقی پیوسته است. این کمیت برای این منظور وارد می‌شود که تعداد وارد شدن اختلال را به دست آوریم. در پایان محاسبات با قرار دادن $\lambda \rightarrow 1$ می‌توان به حالت اولیه برگشت. به عبارت دیگر می‌توان شدت اختلال را تحت کنترل قرار داد، مؤلفه λ را می‌توان به عنوان پارامتری که از ۰ تا ۱ تغییر می‌کند در نظر گرفت. مورد $\lambda = 0$ مربوط به حالتی است که مسئله بدون اختلال در نظر گرفته شده است و حالت $\lambda = 1$ متناظر با حالت مسأله با اختلال بسیار قوی در (۳-۱-۵) است. در حالت‌های فیزیکی که در آن این روش تقریبی قابل قبول است، انتظار داریم که وقتی λ از ۰ به ۱ می‌رود گذار آرامی از $|n^0\rangle$ به $|n\rangle$ و از $E_n^{(0)}$ به E_n رخ دهد.

روش کار بر اساس بسط ویژه مقادیر ویژه کت‌های انرژی، بر پایه λ است. این گفته بدان معنی است که ما به طور ضمنی فرض کرده‌ایم که ویژه کت‌ها و ویژه مقادیر انرژی در صفحه‌ی مختلط λ ، حول $\lambda = 0$ تحلیلی‌اند. البته این روش عملاً در صورتی جالب است که با به دست آوردن تنها یک یا دو جمله‌ی بسط، بتوان به تقریب خوبی دست یافت.

مسأله‌ی دو حالت

قبل از آن که یک نمایش اصولی از روش خود ارائه دهیم، اجازه دهید ببینیم که چگونه بسط بر حسب λ ، برای یک مسأله‌ی دو حالت که بارها به آن رجوع خواهیم کرد معتبر است؟ فرض کنید هامیلتونی‌ای داریم که به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$H = E_1^{(0)}|1^{(0)}\rangle\langle 1^{(0)}| + E_2^{(0)}|2^{(0)}\rangle\langle 2^{(0)}| \\ + \lambda V_{12}|1^{(0)}\rangle\langle 2^{(0)}| + \lambda V_{21}|2^{(0)}\rangle\langle 1^{(0)}| \quad (۵-۱-۵)$$

که در آن $|1^{(0)}\rangle$ و $|2^{(0)}\rangle$ ویژه‌کتهای انرژی برای مسأله‌ی $\lambda = 0$ هستند و ما حالتی را فرض می‌کنیم که در آن $V_{11} = V_{22} = 0$ است. در این نمایش می‌توان H را به شکل یک ماتریس مربعی به شکل زیر نشان داد:

$$H = \begin{pmatrix} E_1^{(0)} & \lambda V_{12} \\ \lambda V_{21} & E_2^{(0)} \end{pmatrix} \quad (۶-۱-۵)$$

که در آن از پایه‌هایی استفاده کرده‌ایم که با توجه به ویژه‌کتهای انرژی ساخته شده‌اند. البته ماتریس V باید هرمیتی باشد. اجازه دهید وقتی که V_{21} و V_{12} حقیقی هستند این مسأله را حل کنیم.

$$V_{12} = V_{12}^*, \quad V_{21} = V_{21}^* \quad (۷-۱-۵)$$

بنابر هرمیتی بودن، می‌توان نوشت:

$$V_{12} = V_{21} \quad (۸-۱-۵)$$

با تغییر دادن فاز $|2^{(0)}\rangle$ نسبت به $|1^{(0)}\rangle$ می‌توان همواره این سازگاری را برقرار ساخت. مسأله‌ی به دست آوردن ویژه‌مقادیر انرژی در این‌جا کاملاً شبیه حل مسأله‌ی جهت‌گیری اسپین است. نظیر (۶-۱-۵) داریم:

$$H = a_0 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_0 + a_3 & a_1 \\ a_1 & a_0 - a_3 \end{pmatrix} \quad (۹-۱-۵)$$

در آن فرض کرده‌ایم که $\mathbf{a} = (a_1, 0, a_3)$ کوچک است و a_0 ، a_1 و a_2 همگی حقیقی‌اند. ویژه‌مقادیر این مسأله معلوم‌اند و برابرند با:

$$E = a_0 \pm \sqrt{a_1^2 + a_3^2} \quad (۱۰-۱-۵)$$

بنابر تشابه، ویژه‌مقادیر متناظر با (۶-۱-۵) برابرند با:

$$\begin{Bmatrix} E_1 \\ E_2 \end{Bmatrix} = \frac{(E_1^{(0)} + E_2^{(0)})}{2} \pm \sqrt{\left[\frac{(E_1^{(0)} - E_2^{(0)})^2}{4} + \lambda^2 |V_{12}|^2 \right]} \quad (۱۱-۱-۵)$$

بگذارید فرض کنیم که $\lambda |V_{12}|$ در مقایسه با مقیاس انرژی وابسته، کوچک است. این مقیاس همان اختلاف ویژه‌مقادیر انرژی در این مسأله است.

$$\lambda |V_{12}| \ll |E_1^{(0)} - E_2^{(0)}| \quad (۱۲-۱-۵)$$

سپس می‌توانیم با استفاده از:

$$\sqrt{1 + \varepsilon} = 1 + \frac{1}{2}\varepsilon - \frac{\varepsilon^2}{8} + \dots \quad (۱۳-۱-۵)$$

بسط ویژه مقادیر انرژی را در حضور اختلال $\lambda|V_{12}|$ به دست آوریم، داریم:

$$E_1 = E_1^{(0)} + \frac{\lambda^2 |V_{12}|^2}{(E_1^{(0)} - E_2^{(0)})} + \dots$$

$$E_2 = E_2^{(0)} + \frac{\lambda^2 |V_{12}|^2}{(E_2^{(0)} - E_1^{(0)})} + \dots \quad (14-1-5)$$

این عبارت‌ها را به زودی با فرمول بندی کلی‌ای که ارائه می‌دهیم، به آسانی به دست می‌آوریم. همچنین نوشتن ویژه‌کت‌های انرژی با مقایسه‌ی مسئله‌ی جهت گیری اسپین نیز امری ممکن است. ممکن است خواننده به این معتقد شده باشد که بسط اختلالی همیشه برای اختلالی که به اندازه‌ی کافی ضعیف است، وجود دارد. اما متأسفانه این شرط برای وجود بسط اختلالی کافی نیست. به عنوان یک مثال مقدماتی، فرض کنید که ذره‌ای به جرم m در یک چاه پتانسیل مربعی یک بعدی بسیار ضعیف به عمق V_0 قرار گرفته است ($|x| > a$ برای $V = 0$ ، برای $-a < x < a$ ، $V = -V_0$). این مسأله یک حالت مقید انرژی را مجاز می‌داند:

$$E = - (2ma^2/\hbar^2) |\lambda V|^2, \quad \lambda > 0 \quad (15-1-5)$$

شاید چاه مربعی را به عنوان اختلال بسیار ضعیفی بدانیم که به هامیلتونی ذره‌ای آزاد اضافه شده و نتیجه‌ی (15-1-5) را نیز به عنوان جابه‌جایی انرژی حالت پایه از صفر به $|\lambda V|^2$ تفسیر کنیم. به ویژه از آنجا که در (15-1-5) وابستگی درجه‌ی دوم به V وجود دارد، ممکن است گمراه شویم و تصور کنیم که این جابه‌جایی انرژی حالت پایه، مطابق با نظریه‌ی اختلال مرتبه دوم محاسبه شده است. اما این نقطه نظر اشتباهی است چون اگر این مسأله وجود داشت، سیستم باید در گرفتن حالت‌های $E < 0$ برای مورد پتانسیل دافع، با λ منفی، مجاز باشد. که این مطلقاً بی‌معنی است.

اکنون بگذارید تا شعاع همگرایی سری‌های بسط (14-1-5) را بیازماییم. اگر به عبارت صریح (15-1-5) بازگردیم و آن را به عنوان تابعی از متغیر مختلط λ در نظر بگیریم، می‌بینیم که با افزایش $|\lambda|$ از صفر، در

$$\lambda|V_{12}| = \frac{\pm i(E_1^{(0)} - E_2^{(0)})}{2} \quad (16-1-5)$$

با نقاط انشعاب مواجه می‌شویم. شرط همگرایی سری‌های بسط برای مورد بسیار قوی $\lambda = 1$ عبارت است از:

$$|V_{12}| < \frac{|E_1^{(0)} - E_2^{(0)}|}{2} \quad (17-1-5)$$

اگر این شرط برآورده نشود، بسط اختلالی (14-1-5) بی‌معنی خواهد بود.*

* بحث همگرایی را به شکل عام‌تر در ادامه‌ی (1-5-44) ببینید.

گسترش تفصیلی بسط اختلالی

حال با دقت بیشتری به حل مسأله‌ی که می‌خواهیم حل کنیم، می‌پردازیم. فرض می‌کنیم که ویژه‌کت‌ها و ویژه‌مقادیر انرژی به‌طور دقیق و کامل در رابطه‌ی زیر صدق می‌کنند:

$$H_0|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle \quad (18-1-5)$$

مجموعه‌ی $\{|n^{(0)}\rangle\}$ کامل است. به این معنی که رابطه‌ی تمامیت $\langle n^{(0)}|n^{(0)}\rangle = 1$ برقرار می‌ماند. همچنین در این جا فرض کرده‌ایم که طیف انرژی غیر تبه‌گن است. در بخش بعدی این فرض را از شرایط مسأله کم می‌کنیم. می‌خواهیم ویژه‌مقادیر و ویژه‌کت‌های انرژی را برای مسأله‌ای که با (۴-۱-۵) تعریف شد، به دست آوریم. برای سازگاری با (۱۸-۱-۵) باید (۴-۱-۵) را به شکل زیر نوشت:

$$(H_0 + \lambda V)|n\rangle_\lambda = E_n^{(\lambda)}|n\rangle_\lambda \quad (19-1-5)$$

توجه می‌کنیم که ویژه‌مقادیر انرژی $E_n^{(\lambda)}$ و ویژه‌کت‌های انرژی $|n\rangle_\lambda$ توابعی از پارامتر پیوسته‌ی λ هستند. اما معمولاً برای آنکه از سختی در نمادگذاری اجتناب کنیم، از درج (λ) صرف نظر کنیم.

همین‌طور که مؤلفه‌ی پیوسته‌ی λ از صفر افزایش می‌یابد انتظار داریم که ویژه‌مقادیر انرژی E_n برای n امین ویژه‌کت از مقدار مختل نشده‌ی $E_n^{(0)}$ دور شود. بنابراین انتقال انرژی را برای n امین تراز به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$\Delta_n \equiv E_n - E_n^{(0)} \quad (20-1-5)$$

معادله‌ی اصلی شرو دینگری که باید (به‌طور تقریبی) حل شود عبارت است از:

$$(E_n^{(0)} - H_0)|n\rangle = (\lambda V - \Delta_n)|n\rangle \quad (21-1-5)$$

ممکن است بخواهیم که عملگر $E_n^{(0)} - H_0$ را معکوس کنیم. اما در حالت کلی، عملگر $1/(E_n^{(0)} - H_0)$ خوش رفتار نیست زیرا ممکن است این عملگر روی $|n^{(0)}\rangle$ اثر کند. خوشبختانه در مورد ما، $\langle n^{(0)}|(\lambda V - \Delta_n)|n\rangle$ مؤلفه‌ای در راستای $|n^{(0)}\rangle$ ندارد. به سادگی می‌توان دید که با ضرب دو طرف (۲۱-۱-۵) در $\langle n^{(0)}|$ از طرف چپ، این مطلب به اثبات می‌رسد:

$$\langle n^{(0)}|(\lambda V - \Delta_n)|n\rangle = 0 \quad (22-1-5)$$

فرض کنید که عملگر تصویر مکمل را به شکل زیر تعریف می‌کنیم:

$$\phi_n \equiv 1 - |n^{(0)}\rangle\langle n^{(0)}| = \sum_{k \neq n} |k^{(0)}\rangle\langle k^{(0)}| \quad (23-1-5)$$

وقتی که عملگر $1/(E_n^{(0)} - H_0)$ را از سمت راست در ϕ_n ضرب می‌کنیم، این عملگر خوش رفتار نیست. به طور صریح داریم:

$$\frac{1}{E_n^{(0)} - H_0} \phi_n = \sum_{k \neq n} \frac{1}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |k^{(0)}\rangle \langle k^{(0)}| \quad (24-1-5)$$

همچنین از (۲۲-۱-۵) و (۲۳-۱-۵) بدیهی است که:

$$(\lambda V - \Delta_n)|n\rangle = \phi_n(\lambda V - \Delta_n)|n\rangle \quad (25-1-5)$$

همچنین ممکن است بخواهیم که (۲۱-۱-۵) را به شکل زیر بنویسیم:

$$|n\rangle \stackrel{?}{=} \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0} \phi_n(\lambda V - \Delta_n)|n\rangle \quad (26-1-5)$$

اما این عبارت صحیح نیست چون به ازای $\lambda \rightarrow 0$ باید داشته باشیم: $|n\rangle \rightarrow |n^{(0)}\rangle$ و $\Delta_n \rightarrow 0$. با این وجود حتی برای $\lambda \neq 0$ همواره می‌توانیم جواب معادله‌ی همگن (۱۸-۱-۵)، مثلاً $c_n |n^{(0)}\rangle$ ، را به $|n\rangle$ اضافه کنیم. بنابراین شکل نهایی عبارت است از:

$$|n\rangle = c_n(\lambda) |n^{(0)}\rangle + \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0} \phi_n(\lambda V - \Delta_n)|n\rangle \quad (27-1-5)$$

که در آن:

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} c_n(\lambda) = 1 \quad (28-1-5)$$

توجه کنید که:

$$c_n(\lambda) = \langle n^{(0)}|n\rangle \quad (29-1-5)$$

بنا به دلایلی که بعداً می‌بینیم، بهتر است که از قرارداد بهنجارش معمول:

$$\langle n|n\rangle = 1 \quad (30-1-5)$$

دور شویم و به جای آن قرار دهیم:

$$\langle n^{(0)}|n\rangle = c_n(\lambda) = 1 \quad (31-1-5)$$

حتی برای $\lambda \neq 0$ اگر در مورد بهنجارش نگرانی نداشته باشیم همواره می‌توانیم این کار را انجام دهیم. چون تنها اثر قرار دادن $c_n \neq 1$ وارد کردن یک عامل ضرب مشترک است. بنابراین اگر بخواهیم می‌توانیم در پایان محاسبات خود کت را بهنجار کنیم. همچنین مرسوم است که بنویسیم:

$$\frac{1}{E_n^{(0)} - H_0} \phi_n \rightarrow \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0} \quad (32-1-5)$$

و به همین صورت:

$$\frac{1}{E_n^{(0)} - H_0} \phi_n = \phi_n \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0} = \phi_n \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0} \phi_n \quad (۳۳-۱-۵)$$

بنابراین داریم:

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0} (\lambda V - \Delta_n) |n\rangle \quad (۳۴-۱-۵)$$

همچنین با توجه به (۲۲-۱-۵) و (۳۱-۱-۵) داریم:

$$\Delta_n = \lambda \langle n^{(0)} | V | n \rangle \quad (۳۵-۱-۵)$$

همه چیز وابسته به دو معادله‌ی (۳۴-۱-۵) و (۳۵-۱-۵) است. استراتژی اصلی ما بر مبنای بسط $|n\rangle$ و Δ_n بر حسب توان‌های λ و سپس جور کردن ضرایب مناسب است. این امری توجیه‌پذیر است. چون (۳۴-۱-۵) و (۳۵-۱-۵) برای تمام مقادیر λ بین ۰ و ۱ برقرارند. با نوشتن

$$\begin{aligned} |n\rangle &= |n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \dots \\ \Delta_n &= \lambda \Delta_n^{(1)} + \lambda^2 \Delta_n^{(2)} + \dots \end{aligned} \quad (۳۶-۱-۵)$$

شروع می‌کنیم. با جایگذاری (۳۶-۱-۵) در (۳۵-۱-۵) و برابر گرفتن ضرایب توان‌های مختلف λ ، داریم:

$$\begin{aligned} 0(\lambda^1): \quad \Delta_n^{(1)} &= \langle n^{(0)} | V | n^{(0)} \rangle \\ 0(\lambda^2): \quad \Delta_n^{(2)} &= \langle n^{(0)} | V | n^{(1)} \rangle \\ &\vdots \\ 0(\lambda^N): \quad \Delta_n^{(N)} &= \langle n^{(0)} | V | n^{(N-1)} \rangle \\ &\vdots \end{aligned} \quad (۳۷-۱-۵)$$

بنابراین برای محاسبه‌ی جابه‌جایی انرژی تا مرتبه‌ی λ^N ، کافی است که $|n\rangle$ را تنها تا مرتبه‌ی λ^{N-1} بدانیم. حال به (۳۴-۱-۵) نگاه می‌کنیم. وقتی که این رابطه را با استفاده از (۳۶-۱-۵) بسط می‌دهیم داریم:

$$\begin{aligned} &|n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \dots \\ &= |n^{(0)}\rangle + \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0} (\lambda V - \lambda \Delta_n^{(1)} - \lambda^2 \Delta_n^{(2)} - \dots) \\ &\quad \times (|n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \dots) \end{aligned} \quad (۳۸-۱-۵)$$

با محاسبه‌ی ضریب توان λ ، داریم:

$$0(\lambda): |n^{(1)}\rangle = \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0} V |n^{(0)}\rangle. \quad (39-1-5)$$

که در آن از $\phi_n \Delta_n^{(1)} |n^{(0)}\rangle = 0$ استفاده کرده‌ایم. با استفاده از $|n^{(1)}\rangle$ می‌توانیم بسط پیشین خود را برای $\Delta_n^{(2)}$ بازنویسی کنیم:

$$\Delta_n^{(2)} = \langle n^{(0)} | V \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0} V |n^{(0)}\rangle \quad (40-1-5)$$

با دانستن $\Delta_n^{(2)}$ و همچنین استفاده از (39-1-5)، می‌توانیم جملات λ^2 را در معادله‌ی (5-1-38) استخراج کنیم:

$$0(\lambda^2): |n^{(2)}\rangle = \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0} V \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0} V |n^{(0)}\rangle - \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0} \langle n^{(0)} | V |n^{(0)}\rangle \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0} V |n^{(0)}\rangle \quad (41-1-5)$$

پیداست که می‌توانیم این رویه‌ی را تا جایی که بخواهیم، ادامه دهیم. روش عملگری ما بسیار فشرده است. لازم نیست که اندیس‌ها را هر بار بنویسیم، البته برای محاسبات عملی می‌باید در پایان شکل صریح ϕ_n را به صورتی که در (5-1-23) داده شده بنویسیم.

برای دیدن اینکه چطور همه‌ی این کارها رخ می‌دهد. بسط صریح زیر را برای جابه‌جایی انرژی می‌نویسیم:

$$\begin{aligned} \Delta_n &\equiv E_n - E_n^{(0)} \\ &= \lambda V_{nn} + \lambda^2 \sum_{k \neq n} \frac{|V_{nk}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + \dots \end{aligned} \quad (42-1-5)$$

که در آن

$$V_{nk} \equiv \langle n^{(0)} | V |k^{(0)}\rangle \neq \langle n | V |k\rangle \quad (43-1-5)$$

یعنی آرایه‌های ماتریسی که با توجه به کت‌های مختل نشده داده شده‌اند. توجه کنید که وقتی بسط را بر روی مسأله‌ی دو حالت اعمال می‌کنیم عبارت قبلی (5-1-14) را به دست می‌آوریم. بسط کت مختل نشده به شکل زیر است:

$$\begin{aligned}
 |n\rangle = & |n^{(0)}\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} |k^{(0)}\rangle \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \\
 & + \lambda^2 \left(\sum_{k \neq n} \sum_{l \neq n} \frac{|k^{(0)}\rangle V_{kl} V_{ln}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})(E_n^{(0)} - E_l^{(0)})} - \sum_{k \neq n} \frac{|k^{(0)}\rangle V_{nn} V_{kn}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} \right) \\
 & + \dots
 \end{aligned}
 \tag{۴۴-۱-۵}$$

معادله‌ی (۴۴-۱-۵) بیان می‌کند که n امین تراز، تنها با کت مختل نشده‌ی $|n^{(0)}\rangle$ متناسب نیست، بلکه مؤلفه‌های دیگر کت‌های مختل نشده را نیز شامل می‌شود. به بیان دیگر، اختلال V ، ویژه‌کت‌های انرژی مختل نشده‌ی مختلفی را در هم می‌آمیزد.

چند نکته‌ی کلی در اینجا باقی می‌ماند. نخست، برای به دست آوردن نخستین مرتبه‌ی جابه‌جایی انرژی، کافی است که مقدار انتظاری V را با توجه به کت‌های مختل نشده به دست آوریم. دوم، از رابطه‌ی جابه‌جایی مرتبه‌ی دوم انرژی (۴۲-۱-۵) بدیهی است که وقتی دو تراز انرژی نظیر تراز i ام و j ام با V_{ij} به هم وصل می‌شوند تمایل دارند که یکدیگر را دفع کنند. تراز پایین، مثلاً تراز i ام به عنوان نتیجه‌ای از در هم آمیختگی با تراز j ، تمایل دارد که به اندازه‌ی $|V_{ij}|^2 / (E_j^{(0)} - E_i^{(0)})$ پایین رود، در حالی که انرژی i امین تراز به همان اندازه بالا می‌رود. این مسأله یک مورد خاص از قضیه‌ی در هم نیامیختگی ترازهای انرژی است که بیان می‌کند، دو تراز انرژی که با پتانسیل اختلالی به هم وابسته‌اند، با تغییر قدرت اختلال، یکدیگر را قطع نمی‌کنند.

فرض کنید که بیش از دو تراز انرژی با آرایه‌های ماتریسی وجود دارد. اگر کت $|n\rangle$ مربوط به حالت پایه باشد، آنگاه هر کدام از جملات در (۴۲-۱-۵) برای جابه‌جایی مرتبه دوم انرژی منفی است. این گفته بدان معنی است که جابه‌جایی مرتبه دوم انرژی برای حالت پایه، همیشه منفی است. اختلال باعث می‌شود که حالت پایه تمایل به کاهش داشته باشد.

واضح است که اگر $|V_{ii}| / (E_i^{(0)} - E_i^{(0)})$ به اندازه‌ی کافی کوچک باشد، بسط‌های اختلالی (۴۴-۱-۵) و (۴۲) همگرا خواهند بود. حالت خاص وقتی است که H_0 به طور ساده، همان عملگر انرژی جنبشی باشد (آنگاه بسط اختلالی رایلی-شرویدینگر، همان سری بورن خواهد بود)؛ در انرژی H_0 ، سری بورن همگرا خواهد بود، اگر و تنها اگر، $H_0 + V$ و $H_0 - V$ ، تراز انرژی مقیدی در $E \leq E_0$ نداشته باشند (آر. جی. نیوتن ۱۹۸۲ و صفحه‌ی ۲۳۳).

بازبهنجارش تابع موج

اکنون در موقعیتی هستیم که می‌توانیم بهنجارش کت مختل شده را مورد بررسی قرار دهیم. قرار داد بهنجارش را که در (۳۱-۱-۵) به کار بردیم به یاد می‌آوریم و می‌بینیم که کت مختل شده $|n\rangle$ در حالت عادی، بهنجار نشده است. با تعریف زیر می‌توانیم کت مختل شده را بازبهنجارش کنیم.

$$|n\rangle_N = Z_n^{1/2} |n\rangle \quad (۴۵-۱-۵)$$

که در آن Z_n ثابتی است که در شرط ${}_N \langle n|n\rangle = 1$ صدق می‌کند. با ضرب $|n^{(0)}\rangle$ از سمت چپ داریم [به‌خاطر (۳۱-۱-۵)]:

$$Z_n^{1/2} = \langle n^{(0)}|n\rangle_N \quad (۴۶-۱-۵)$$

معنای فیزیکی Z_n چیست؟ از آن‌جا که $|n\rangle_N$ الزام معمولی بهنجارش (۳۰-۱-۵) را برآورده می‌کند، Z_n را می‌توان به‌عنوان احتمال این که ویژه حالت انرژی مختل شده در ویژه حالت انرژی مختل نشده‌ی متناظر یافت شود توصیف کرد، توجه کنید:

$${}_N \langle n|n\rangle = Z_n \langle n|n\rangle = 1 \quad (۴۷-۱-۵)$$

داریم:

$$\begin{aligned} Z_n^{-1} &= \langle n|n\rangle = (\langle n^{(0)}| + \lambda \langle n^{(1)}| + \lambda^2 \langle n^{(2)}| + \dots) \\ &\quad \times (|n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \dots) \\ &= 1 + \lambda^2 \langle n^{(1)}|n^{(1)}\rangle + O(\lambda^3) \\ &= 1 + \lambda^2 \sum_{k \neq n} \frac{|V_{kn}|^2}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} + O(\lambda^3) \end{aligned} \quad (۴۸-۱-الف)$$

صرف نظر از مرتبه‌های بالاتر λ^2 ، احتمال یافتن حالت مختل شده در حالت مختل نشده‌ی متناظر عبارت است از:

$$Z_n = 1 - \lambda^2 \sum_{k \neq n} \frac{|V_{kn}|^2}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} \quad (۴۸-۱-ب)$$

دومین جمله در (۴۸-۱-ب) نشان‌دهنده‌ی احتمال "تراوش" به حالت‌هایی غیر از $|n^{(0)}\rangle$ است. توجه کنید همان‌طور که از مبانی تعبیرهای احتمالاتی برای Z بر می‌آید Z_n کوچک‌تر از ۱ است.

همچنین این نکته جالب توجه است که، با مشتق‌گیری از E_n نسبت به $E_n^{(0)}$ ، تا مرتبه‌ی λ^2 در (۵-۱-۴۲)، Z به شکل زیر به دست می‌آید:

$$Z_n = \frac{\partial E_n}{\partial E_n^{(0)}} \quad (۴۹-۱-۵)$$

البته می‌دانیم که در مشتق‌گیری E_n نسبت به $E_n^{(0)}$ می‌بایست آرایه‌های ماتریسی V را با کمیت‌های ثابتی در نظر بگیریم. نتیجه‌ی (۵-۱-۴۹) در واقع، نتیجه‌ای کاملاً کلی است و تنها به نظریه‌ی اختلال مرتبه دوم محدود نمی‌شود.

مثال‌های ابتدایی

برای روشن کردن روش اختلالی که در این جا مورد بحث قرار دادیم، بگذارید تا به دو مثال پردازیم. اولین مثال، یک نوسان‌گر هماهنگ ساده است که هامیلتونی مختل نشده‌ای آن عبارت است از:

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (۵۰-۱-۵)$$

فرض کنید که ثابت فنر $k = m\omega^2$ کمی تغییر کند. می‌توانیم با افزودن یک پتانسیل اضافی این تغییر را اعمال کنیم:

$$V = \frac{1}{2}\varepsilon m\omega^2 x^2 \quad (۵۱-۱-۵)$$

که در آن ε یک پارامتر بدون بُعد است به طوری که $\varepsilon \ll 1$ می‌باشد. مطمئناً این ساده‌لوحانه‌ترین مسئله‌ای است که می‌توان در دنیا برای به کار بستن نظریه‌ی اختلال طرح کرد. جواب صریح را می‌توان صریحاً با تغییر ω به صورت زیر به دست آورد.

$$\omega \rightarrow \sqrt{1 + \varepsilon} \omega \quad (۵۲-۱-۵)$$

با این حال مثالی آموزنده است. چون این مسأله می‌تواند مقایسه‌ای بین حل تقریبی اختلالی و حل دقیق برای ما فراهم آورد.

در این جا ما با یک کت حالت پایه‌ی جدید $|0\rangle$ در حضور V و جابه‌جایی انرژی حالت پایه‌ی Δ_0 سرو کار داریم:

$$|0\rangle = |0^{(0)}\rangle + \sum_{k \neq 0} |k^{(0)}\rangle \frac{V_{k0}}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} + \dots \quad (۵۳-۱-۵) \text{ (الف)}$$

$$\Delta_0 = V_{00} + \sum_{k \neq 0} \frac{|V_{k0}|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} + \dots \quad (۵۳-۱-۵)$$

آرایه‌های ماتریسی مربوط به این مسأله عبارتند از (مسئله‌ی ۵ این فصل را ببینید):

$$V_{00} = \left(\frac{\epsilon m \omega^2}{2} \right) \langle 0^{(0)} | x^2 | 0^{(0)} \rangle = \frac{\epsilon \hbar \omega}{4}$$

$$V_{20} = \left(\frac{\epsilon m \omega^2}{2} \right) \langle 2^{(0)} | x^2 | 0^{(0)} \rangle = \frac{\epsilon \hbar \omega}{2\sqrt{2}} \quad (۵۴-۱-۵)$$

بقیه‌ی آرایه‌های ماتریسی که به شکل V_{k0} هستند، صفر می‌شوند. توجه کنید که تفاضل انرژی‌های غیرصفری که در مخرج‌های (۵۳-۱-۵ الف) و (۵۳-۱-۵ ب) هستند برابر $2\hbar\omega - 2\hbar\omega$ است. با در نظر گرفتن تمام این گفته‌ها داریم:

$$|0\rangle = |0^{(0)}\rangle - \frac{\epsilon}{4\sqrt{2}} |2^{(0)}\rangle + O(\epsilon^2) \quad (۵۵-۱-۵)$$

و

$$\Delta_0 = E_0 - E_0^{(0)} = \hbar\omega \left[\frac{\epsilon}{4} - \frac{\epsilon^2}{16} + O(\epsilon^3) \right] \quad (۵۵-۱-۵)$$

به‌عنوان نتیجه‌ای از اختلال توجه کنید که وقتی کت حالت پایه را برحسب ویژه‌کت‌های مختل نشده‌ی اصلی $\{|n^{(0)}\rangle\}$ بسط می‌دهیم، مؤلفه‌ای در امتداد دومین حالت برانگیخته پیدا می‌کنند. نبود یک مؤلفه در راستای اولین حالت برانگیخته امری غریب نیست، چون H کلی ما تحت اثر پاریتته، ناورد است. بنابراین انتظار داریم که ویژه حالت انرژی یک ویژه حالت پاریتته نیز باشد.

بین این جواب و جوابی که از روش حل دقیق که به‌صورت زیر است:

$$\frac{\hbar\omega}{2} \rightarrow \left(\frac{\hbar\omega}{2} \right) \sqrt{1+\epsilon} = \left(\frac{\hbar\omega}{2} \right) \left[1 + \frac{\epsilon}{2} - \frac{\epsilon^2}{8} + \dots \right] \quad (۵۶-۱۰-۵)$$

مقایسه‌ای صورت می‌دهیم. مشاهده می‌کنیم که این جواب با (۵۵-۱-۵) کاملاً در توافق است. همین‌طور برای یک کت مختل شده، تغییر در تابع موج را مورد بررسی قرار می‌دهیم. در نبود V تابع موج حالت پایه عبارت است از:

$$\langle x | 0^{(0)} \rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{x_0}} e^{-x^2/2x_0^2} \quad (۵۷-۱-۵)$$

که در آن

$$x_0 \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (58-1-5)$$

جایگذاری (52-1-5) نتیجه می‌دهد:

$$x_0 \rightarrow \frac{x_0}{(1+\epsilon)^{1/4}} \quad (59-1-5)$$

بنابراین:

$$\begin{aligned} \langle x|0^{(0)}\rangle &\rightarrow \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}}(1+\epsilon)^{1/8} \exp\left[-\left(\frac{x^2}{2x_0^2}\right)(1+\epsilon)^{1/2}\right] \\ &\approx \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{x_0}} e^{-x^2/2x_0^2} + \frac{\epsilon}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}} e^{-x^2/2x_0^2} \left[\frac{1}{8} - \frac{1}{4} \frac{x^2}{x_0^2}\right] \\ &= \langle x|0^{(0)}\rangle - \frac{\epsilon}{4\sqrt{2}} \langle x|2^{(0)}\rangle \end{aligned} \quad (60-1-5)$$

که در آن از رابطه‌ی زیر استفاده کرده‌ایم:

$$\begin{aligned} \langle x|2^{(0)}\rangle &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \langle x|0^{(0)}\rangle H_2\left(\frac{x}{x_0}\right) \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{x_0}} e^{-x^2/2x_0^2} \left[-2 + 4\left(\frac{x}{x_0}\right)^2\right] \end{aligned} \quad (61-1-5)$$

و $H_2(x/x_0)$ چندجمله‌ای مرتبه ۲ هرمیت است.

به‌عنوان مثال روشن‌کننده‌ی دیگری برای نظریه‌ی اختلال غیرتهگن، اثر اشتراک مربعی را مورد بحث قرار می‌دهیم. یک اتم تک‌الکترونی -اتم هیدروژن یا یک اتم هیدروژن مانند با یک الکترون ظرفیت بیرون پسته‌ی مرکزی (تقارن کروی)- در معرض یک میدان الکتریکی در راستای z قرار می‌گیرد. هامیلتونی به دو بخش تقسیم می‌شود:

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_0(r) \quad \text{and} \quad V = -e|\mathbf{E}|z \quad (e < 0 \text{ برای الکترون}) \quad (62-1-5)$$

[یادداشت ویراستار: وقتی که به‌ازای $z \rightarrow -\infty$ ، $V \rightarrow -\infty$ برود ذرات محدود شده با H_0 می‌توانند فرار کنند و تمام حالت‌های مقید قبلی، نیمه‌عمر محدودی پیدا می‌کنند. با این حال هنوز می‌توانیم هرچند نه

چندان صحیح، برای محاسبه‌ی انتقال انرژی از نظریه‌ی اختلال استفاده کنیم. (قسمت موهومی این انتقال که می‌توان در این جا از آن صرف نظر کرد، نیمه عمر حالت یا پهنای تشدید متناظر با آن را می‌دهد.)
فرض می‌کنیم که ویژه‌کت‌های انرژی برای مسأله‌ی مختل نشده (فقط H_0) کاملاً شناخته شده است. در این مسأله می‌توان از اسپین الکترون صرف نظر کرد. وقتی که درجات آزادی را از مسأله خارج کنیم، هیچ کدام از ترازهای انرژی تبهگن نمی‌شوند. این فرض برای ترازهای $n \neq 1$ اتم هیدروژن که در آن‌ها V_0 پتانسیل کولنی خالص است، برقرار نمی‌ماند. به این مورد بعداً رسیدگی می‌کنیم. جابه‌جایی انرژی عبارت است از:

$$\Delta_k = -e|\mathbf{E}|z_{kk} + e^2|\mathbf{E}|^2 \sum_{j \neq k} \frac{|z_{kj}|^2}{E_k^{(0)} - E_j^{(0)}} + \dots \quad (5-1-63)$$

در این رابطه از k به جای n استفاده کرده‌ایم تا از اشتباه شدن با عدد کوانتومی اصلی n ، جلوگیری به عمل آید. در نبود تبهگنی، انتظار داریم که $\langle k^{(0)} |$ یک ویژه حالت پارته باشد. بنابراین:

$$z_{kk} = 0 \quad (5-1-64)$$

همان‌طور که در بخش ۴-۲ دیدیم. از نظر فیزیکی گفته می‌شود که اثر اشتراک خطی وجود ندارد یعنی، هیچ جمله‌ی جابه‌جایی انرژی متناسب با $|\mathbf{E}|$ وجود ندارد، چون دو قطبی الکتریکی اتم صفر است. بنابراین اگر از جملات $|\mathbf{E}|^3$ یا بالاتر صرف نظر کنیم، جابه‌جایی انرژی برای $|\mathbf{E}|$ مربعی خواهد بود.

حال بگذارید تا توجه خود را به z_{kj} معطوف کنیم که در (۵-۱-۶۳) ظاهر شد. در این جا k (یا j) اندیس تجمعی است که بیان‌کننده‌ی (n, l, m) و (n', l', m') می‌باشد. نخست قاعده‌ی گزینش را به یاد می‌آوریم [رابطه‌ی (۳-۱۰-۳۹) را ببینید]:

$$\langle n', l', m' | z | n, l, m \rangle = 0 \quad \text{مگر اینکه} \quad \begin{cases} l' = l \pm 1 \\ m' = m \end{cases} \quad (5-1-65)$$

که از تکانه‌ی زاویه‌ای (قضیه‌ی ویگنر-اکارت با $T_q^{(1)}$) و ملاحظات پارته تبعیت می‌کند.

راه دیگری برای قاعده‌ی گزینش m وجود دارد. در حضور V ، تقارن کروی کامل هامیلتونی به وسیله‌ی میدان الکتریکی خارجی که در راستای z انتخاب شده است، از بین می‌رود. V (و بنابراین کل H) همچنان تحت چرخش حول محور z ناوردا است. به عبارت دیگر، هنوز یک تقارن استوانه‌ای داریم. این مسأله بیان‌گر این واقعیت است که:

$$[V, L_z] = 0 \quad (5-1-66)$$

این به معنی آن است که L_z ، حتی در حضور V ، هنوز یک عدد کوانتومی خوب است. به عنوان یک نتیجه، اختلال را می‌توان به شکل یک برهم نهی از ویژه کت‌های L_z با m ‌های یکسان (در این مورد $m=0$) نوشت. این گفته برای تمام مرتبه‌های اختلال به خصوص برای کت مرتبه اول درست است. همچنین، از آن‌جا که جابه‌جایی مرتبه دوم انرژی از کت مرتبه اول به دست می‌آید [(۴۰-۱-۵)] را ببینید] این مسأله همچنان صادق است. می‌توانیم بفهمیم که چرا فقط جملات $m=0$ در جمع سهم دارند.

قطبیدگی α یک اتم بر حسب جابه‌جایی انرژی حالت اتمی به شکل زیر تعریف می‌شود:

$$\Delta = -\frac{1}{2}\alpha|\mathbf{E}|^2 \quad (۶۷-۱-۵)$$

بگذارید تا در حالت خاص به حالت پایه‌ی اتم هیدروژن پردازیم. با وجود این که در حالت‌های برانگیخته‌ی اتم هیدروژن تبهگنی وجود دارد، حالت پایه (صرف نظر از اسپین) غیرتبهگن است. بنابراین فرمول‌بندی نظریه‌ی اختلال غیرتبهگن در اینجا قابل اعمال است. حالت پایه‌ی $|0^{(0)}\rangle$ در نمایش $|n, l, m\rangle$ با $(1, 0, 0)$ نشان داده می‌شود. بنابراین:

$$\alpha = -2e^2 \sum_{k \neq 0}^{\infty} \frac{| \langle k^{(0)} | z | 1, 0, 0 \rangle |^2}{[E_0^{(0)} - E_k^{(0)}]} \quad (۶۸-۱-۵)$$

که در آن جمع روی k نه تنها شامل حالت‌های مقید $|n, l, m\rangle$ (برای $n > 1$) می‌شود، بلکه حالت‌های پیوسته انرژی‌های مثبت را نیز شامل می‌شود.

راه‌های زیادی برای تخمین تقریبی یا حل دقیق جمع در (۶۸-۱-۵) با درجات مختلف پیچیدگی وجود دارد. در این‌جا ما ساده‌ترین راه را ارائه می‌دهیم. فرض کنید مخرج کسر در (۶۸-۱-۵) ثابت باقی بماند. آنگاه با در نظر گرفتن رابطه‌ی زیر، جمع را بدست آوریم:

$$\begin{aligned} \sum_{k \neq 0} | \langle k^{(0)} | z | 1, 0, 0 \rangle |^2 &= \sum_{\text{all } k} | \langle k^{(0)} | z | 1, 0, 0 \rangle |^2 \\ &= \langle 1, 0, 0 | z^2 | 1, 0, 0 \rangle \end{aligned} \quad (۶۹-۱-۵)$$

که در آخرین مرحله از رابطه‌ی تمامیت استفاده کرده‌ایم. اما به راحتی می‌توانیم $\langle z^2 \rangle$ را برای حالت پایه به شکل زیر محاسبه کنیم:

$$\langle z^2 \rangle = \langle x^2 \rangle = \langle y^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle r^2 \rangle \quad (۷۰-۱-۵)$$

و با استفاده از شکل صریح تابع موج داریم:

$$\langle z^2 \rangle = a_0^2$$

که در آن a_0 بیانگر شعاع بور است. متأسفانه عبارت قطبیدگی α در مخرج، وابسته به انرژی $E_k^{(0)}$ است. اما می‌دانیم که نامساوی:

$$-E_0^{(0)} + E_k^{(0)} \geq -E_0^{(0)} + E_1^{(0)} = \frac{e^2}{2a_0} \left[1 - \frac{1}{4} \right] \quad (۷۱-۱-۵)$$

برای مخرج کسر (۶۸-۱-۵) همواره برقرار است. به‌عنوان یک نتیجه، می‌توانیم یک حد بالا، برای قطبیدگی حالت پایه‌ی اتم هیدروژن به‌دست آوریم، داریم:

$$\alpha < \frac{16a_0^3}{3} \approx 5.3a_0^3 \quad (۷۲-۱-۵)$$

با محاسبه‌ی صریح جمع در (۶۸-۱-۵) به روش آدالگارنو و جی.تی.لوپس، نیز می‌توانستیم به این عبارت برسیم (برای مثال، مرزباخر ۱۹۷۰، صفحه‌ی ۴۲۴). این مقدار با مقداری که در آزمایشگاه اندازه‌گیری شد، در توافق است. مقدار آزمایشگاهی برابر است با:

$$\alpha = \frac{9a_0^3}{2} = 4.5a_0^3 \quad (۷۳-۱-۵)$$

با محاسبه‌ی صریح معادله‌ی شرودینگر در مختصات کروی (بدون استفاده از نظریه‌ی اختلال) نیز نتیجه‌ی یکسانی به‌دست می‌آوریم.

۲.۵ نظریه‌ی اختلال مستقل از زمان: مورد تبه‌گن

در حالتی که ویژه‌کتهای انرژی مختل نشده، تبه‌گن باشند، روش اختلالی ما که در بخش قبل گسترش پیدا کرد، با شکست مواجه می‌شود. در روش بخش قبل فرض کردیم که اگر در کت مختل شده $0 \rightarrow \lambda$ برود به یک کت انرژی مختل نشده‌ی خوش رفتار و یکتا خواهیم رسید. اما در حضور تبه‌گنی ترکیب‌های خطی از کتهای مختل نشده، ممکن است انرژی غیراختلالی یکسانی داشته باشند. در چنین حالتی از قبل معلوم نیست که در حد $0 \rightarrow \lambda$ کت مختل شده به سمت کدام یک از ترکیب‌های خطی کتهای منتقل نشده می‌رود. در این جا مشخص کردن ویژه مقدار انرژی به‌تنهایی کافی نیست. برای کامل شدن این تصویر برخی مشاهده پذیرهای دیگر نیز لازم‌اند. برای این که بهتر مشخص شود، در حضور تبه‌گنی می‌توانیم کتهای پایه‌ی خود را ویژه‌کتهای همزمان H_0 و مشاهده‌پذیر دیگری همچون A فرض کنیم. حال می‌توانیم ویژه‌کتهای مختل نشده‌ی انرژی را با $|k^{(0)}\rangle$ مشخص کنیم. که در آن k یک اندیس تجمعی است که هم بیان‌کننده‌ی ویژه مقدار انرژی و هم مبین ویژه مقدار A است. وقتی که عملگر

اختلال V با A جابه‌جا نشود، در واقع صفرمین مرتبه‌ی ویژه‌کت‌های H (شامل اختلال) ویژه‌کت‌های A نیستند.

از نقطه‌نظر علمی‌تر، یک راه‌برد کورکورانه نظیر فرمول‌های (۵-۱-۴۲) و (۵-۱-۴۴) به‌وضوح به مشکلاتی می‌انجامد چون در:

$$\frac{V_{nk}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (۱-۲-۵)$$

اگر V_{nk} غیرصفر باشد و $E_n^{(0)}$ و $E_k^{(0)}$ برابر باشند، تکنیکی خواهیم داشت. برای مقابله با چنین وضعیتی می‌باید روش بخش قبل را اصلاح کرد.

هرگاه که تبهگنی وجود داشته باشد، آزادیم که کت‌های پایه‌ی خود را از بین کت‌های مختل نشده انتخاب کنیم. اما به هر حال باید از این آزادی حداکثر استفاده را ببریم. بدیهی است که انتظار می‌رود با انتخاب کت‌های پایه به‌طوری که V ، آرایه‌های ماتریسی غیرقطری نداشته باشد (به‌طوری که در (۵-۲-۱) داشته باشیم $V_{nk} = 0$) از مشکل صفر شدن مخرج اجتناب شود. به‌عبارت دیگر باید از ترکیب خطی کت‌های مختل نشده‌ی تبهگنی استفاده کنیم که در زیرفضایی که با کت‌های مختل نشده‌ی تبهگن تشکیل می‌شود، H قطری شود. در واقع این روش صحیحی است که باید به کار گرفته شود.

فرض کنید که قبل از آنکه اختلال V روشن شود، تبهگنی g گانه وجود داشته باشد. این بدان معناست که g ویژه‌کت مختلف وجود دارند که همگی دارای یک انرژی مختل نشده‌ی $E_D^{(0)}$ هستند. بگذارید تا این کت‌ها را با $\{|m^{(0)}\rangle\}$ نشان دهیم. در حالت کلی، اختلال به‌نحوی تبهگنی را از بین می‌برد که هر کدام از ویژه‌کت‌های مختل شده‌ی g انرژی متفاوتی می‌گیرند. بگذارید تا مجموعه این کت‌ها را $\{|l\rangle\}$ بنامیم. هنگامی که l به سمت صفر می‌رود، $\{|l^{(0)}\rangle\} \rightarrow |l^{(0)}\rangle$ می‌رود. $\{|l^{(0)}\rangle\}$ ‌های متفاوت، ویژه‌کت‌های H_0 هستند که همگی انرژی $E_m^{(0)}$ دارند. اما لزومی ندارد که مجموعه‌ی $\{|l^{(0)}\rangle\}$ با $\{|m^{(0)}\rangle\}$ مطابق باشد گرچه دو مجموعه ویژه‌کت‌های مختل نشده بین زیرفضای تبهگن یکسانی باشند که آن را D نامیده‌ایم. می‌توانیم بنویسیم:

$$|l^{(0)}\rangle = \sum_{m \in D} \langle m^{(0)} | l^{(0)} \rangle |m^{(0)}\rangle$$

که در آن جمع روی ویژه‌کت‌های انرژی در زیرفضای تبهگن است.

قبل از آنکه برحسب l بسط دهیم، آرایش مجددی از معادله‌ی شرودینگر وجود دارد که انجام این بسط را بسیار ساده‌تر می‌کند. بگذارید تا P_0 را عملگر تصویر به فضای تعریف شده توسط $\{|m^{(0)}\rangle\}$

بنامیم. $P_1 = 1 - P_0$ تصویر به حالت‌های باقی‌مانده خواهد بود. در این حالت می‌توانیم معادله‌ی شرودینگر را برای حالت‌های $\{|l\rangle\}$ به شکل زیر بنویسیم:

$$\begin{aligned} 0 &= (E - H_0 - \lambda V)|l\rangle \\ &= (E - E_D^{(0)} - \lambda V)P_0|l\rangle + (E - H_0 - \lambda V)P_1|l\rangle \end{aligned} \quad (2-2-5)$$

سپس معادله‌ی (۲-۲-۵) را با اثر دادن P_1 و P_0 از سمت چپ، به دو معادله تقسیم می‌کنیم:

$$(E - E_D^{(0)} - \lambda P_0 V)P_0|l\rangle - \lambda P_0 V P_1|l\rangle = 0 \quad (3-2-5)$$

$$-\lambda P_1 V P_0|l\rangle + (E - H_0 - \lambda P_1 V)P_1|l\rangle = 0 \quad (4-2-5)$$

می‌توانیم (۴-۲-۵) را در زیرفضای P_1 حل کنیم چون $P_1(E - H_0 - \lambda P_1 V P_1)$ در این زیرفضا تکیه نیست و وقتی که E به $E_D^{(0)}$ نزدیک می‌شود، ویژه مقادیر $P_1 H_0 P_1$ همگی با $E_D^{(0)}$ فرق خواهند داشت. بنابراین می‌توانیم بنویسیم:

$$P_1|l\rangle = P_1 \frac{\lambda}{E - H_0 - \lambda P_1 V P_1} P_1 V P_0|l\rangle \quad (5-2-5)$$

یا می‌توانیم وقتی که $|l\rangle$ برحسب $|l^{(0)}\rangle + \lambda|l^{(1)}\rangle + \dots$ بسط داده می‌شود، $P_1|l\rangle$ را صریحاً برحسب $|l\rangle$ بنویسیم:

$$P_1|l^{(1)}\rangle = \sum_{k \neq D} \frac{|k^{(0)}\rangle V_{kl}}{E_D^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (6-2-5)$$

برای محاسبه‌ی $P_0|l\rangle = 0$ می‌توانیم (۵-۲-۵) را در (۳-۲-۵) جایگذاری کنیم:

$$\left(E - E_D^{(0)} - \lambda P_0 V P_0 - \lambda^2 P_0 V P_1 \frac{1}{E - H_0 - \lambda V} P_1 V P_0 \right) P_0|l\rangle = 0 \quad (7-2-5)$$

هرچند یک جمله از مرتبه‌ی λ^2 در (۷-۲-۵) وجود دارد که نتیجه‌ی جایگذاری است، بعداً خواهیم دید که می‌توان این جمله را در حالت $P_0|l\rangle$ ، برحسب مرتبه‌ی λ نوشت. در مرتبه‌ی λ ، معادله‌ای برای انرژی‌های مرتبه λ و ویژه توابع مرتبه صفر به دست می‌آوریم:

$$(E - E_D^{(0)} - \lambda P_0 V P_0)(P_0|l^{(0)}\rangle) = 0 \quad (8-2-5)$$

این معادله‌ای در زیرفضای تبه‌گن g بعدی است و به‌وضوح به این معناست که ویژه بردارها همان ویژه بردارهای ماتریس $g \times g$ $P_0 V P_0$ بوده و ویژه مقادیر $E^{(1)}$ نیز ریشه‌های معادله‌ی مشخصه‌ی:

$$\det[V - (E - E_D^{(0)})] = 0 \quad (9-2-5)$$

هستند که در آن V همان ماتریس P_0VP_0 با آرایه‌های ماتریسی $\langle m^{(0)}|V|m'^{(0)}\rangle$ است. به‌طور صریح به‌شکل ماتریسی داریم:

$$\begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} & \cdots \\ V_{21} & V_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle 1^{(0)}|l^{(0)}\rangle \\ \langle 2^{(0)}|l^{(0)}\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = \Delta_l^{(1)} \begin{pmatrix} \langle 1^{(0)}|l^{(0)}\rangle \\ \langle 2^{(0)}|l^{(0)}\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (10-2-5)$$

ریشه‌ها مشخص‌کننده ویژه مقادیر $\Delta_l^{(1)}$ هستند (که روی هم g تا هستند) و با جایگذاری آن‌ها در (10-2-5) می‌توانیم برای $\langle m^{(0)}|l^{(0)}\rangle$ ها به‌ازای هر کدام از l ها راه حلی ارائه دهیم (صرف‌نظر از یک ثابت بهنجارش کلی). بنابراین با حل مسأله‌ی ویژه مقاداری با یک تیر دو نشان زده‌ایم، هم جابه‌جایی مرتبه اول انرژی را به‌دست آورده‌ایم و هم مرتبه صفرم ویژه‌کت‌ها را مشخص کرده‌ایم. توجه کنید که کت‌های مرتبه صفرمی که به‌ازای $0 \rightarrow \lambda$ به‌دست آورده‌ایم همان ترکیب خطی $\langle m^{(0)}|$ های متفاوت است که اختلال V را قطری می‌کنند. آرایه‌های قطری سریعاً جابه‌جایی رتبه اول را به‌دست می‌دهند:

$$\Delta_l^{(1)} = \langle l^{(0)}|V|l^{(0)}\rangle \quad (11-2-5)$$

همچنین توجه کنید که اگر زیرفضای تبهگن برابر با کل فضا باشد، با این روش مسأله را به‌طور دقیق حل کرده‌ایم. ویژه‌کت‌های مختل نشده‌ی "دور" که به زیرفضای تبهگن تعلق ندارند، تنها در مراتب بالاتر حضور پیدا می‌کنند (مرتبه‌ی اول و بالاتر برای ویژه‌کت‌ها و بالاتر برای ویژه مقادیر انرژی).

عبارت (11-2-5) دقیقاً شبیه جابه‌جایی مرتبه اول انرژی در حالت غیرتبهگن است [(5-1-37) را ببینید]. به‌جز این که در این جا مطمئن هستیم که کت‌های پایه‌ی به کار رفته طوری هستند که در زیرفضایی که با ویژه‌کت‌های مختل نشده‌ی تبهگن ساخته می‌شود، آرایه‌های غیرقطری ماتریس V غیرصفر هستند، اگر عملگر V در نمایش کت‌های پایه‌ای که استفاده کرده‌ایم قطری باشد درست شبیه حالت غیرتبهگن، سریعاً می‌توانیم جابه‌جایی مرتبه اول را با گرفتن مقدار انتظاری V به‌دست آوریم.

حال بگذارید به (5-2-7) نگاه کنیم. برای اطمینان، تمام جملات را در هامیلتونی مؤثر $g \times g$ که در (5-2-7) ظاهر شده تا مرتبه‌ی λ^2 به‌دست می‌آوریم. اگرچه $P_0|l\rangle$ را تنها تا مرتبه‌ی λ می‌خواهیم.

$$\left(E - E_D^{(0)} - \lambda P_0VP_0 - \lambda^2 P_0VP_1 \frac{1}{E_D^{(0)} - H_0} P_1VP_0 \right) P_0|l\rangle = 0 \quad (12-2-5)$$

بگذارید تا ویژه مقادیر ماتریس $g \times g$ P_0VP_0 را v_i و ویژه بردارها را $\langle P_0|l_i^{(0)}\rangle$ بنامیم. انرژی‌های ویژه‌ی مرتبه‌ی اول برابر با $E_i^{(1)} = E_D^{(0)} + \lambda v_i$ هستند. فرض می‌کنیم که تبهگنی کاملاً حل شده است.

بنابراین $E_i^{(1)} - E_j^{(1)} = \lambda(v_i - v_j)$ همگی غیر صفرند. حال می‌توانیم نظریه‌ی اختلال غیر تبه‌گن (۵-۲-۱) را بر هامیلتونی $g \times g$ بعدی که در (۵-۲-۱۲) ظاهر شد، اعمال کنیم. در نتیجه تصحیح بر ویژه بردارهای $P_0|l_i^{(0)}\rangle$ عبارتند از:

$$P_0|l_i^{(1)}\rangle = \sum_{j \neq i} \lambda \frac{P_0|l_j^{(0)}\rangle}{v_j - v_i} \langle l_j^{(0)}|VP_1 \frac{1}{E_D^{(0)} - H_0} P_1V|l_i^{(0)}\rangle \quad (۵-۲-۱۳)$$

یا به‌طور صریح‌تر:

$$P_0|l_i^{(1)}\rangle = \sum_{j \neq i} \lambda \frac{P_0|l_j^{(0)}\rangle}{v_j - v_i} \sum_{k \in D} \langle l_j^{(0)}|V|k\rangle \frac{1}{E_D^{(0)} - E_k^{(0)}} \langle k|V|l_i^{(0)}\rangle \quad (۵-۲-۱۴)$$

بنابراین اگر چه سومین جمله در هامیلتونی مؤثر، که در (۵-۲-۱۲) ظاهر شد از مرتبه‌ی λ^2 است اما با تقسیم بر بعد انرژی از مرتبه‌ی λ ، برای ایجاد تصحیح روی ویژه بردار، همان جمله‌ی مرتبه‌ی λ را می‌دهد. اگر (۵-۲-۶) و (۵-۲-۱۴) را با هم جمع کنیم، ویژه بردار مرتبه‌ی λ را به دست می‌آوریم.

همانند مورد غیر تبه‌گن، بهتر است که قرارداد بهنجارش را به شکل $\langle l^{(0)}|l\rangle = 1$ قرار دهیم. آنگاه خواهیم داشت $\lambda \langle l^{(0)}|V|l\rangle = \Delta_l = \lambda \Delta_l^{(1)} + \lambda^2 \Delta_l^{(2)} + \dots$ جملات مرتبه‌ی λ دوباره (۵-۲-۱۱) را تولید می‌کنند. به همین صورت برای جملات λ^2 داریم:

$$\Delta_l^{(2)} = \langle l^{(0)}|V|l^{(1)}\rangle = \langle l^{(0)}|V|P_1l^{(1)}\rangle + \langle l^{(0)}|V|P_0l^{(1)}\rangle$$

وقتی که بردارهای $P_0|l_j^{(0)}\rangle$ ویژه بردارهای V باشند، تصحیح بر بردار (۵-۲-۱۴)، هیچ سهمی روی جابه‌جایی مرتبه دوم انرژی ندارد. بنابراین با استفاده از (۵-۲-۶) داریم:

$$\Delta_l^{(2)} = \sum_{k \in D} \frac{|V_{kl}|^2}{E_D^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (۵-۲-۱۵)$$

فرآیندی که به کار می‌بریم برای مواردی است که تبه‌گنی در ریشه‌های معادله‌ی مشخصه‌ی (۵-۲-۹) وجود نداشته باشد. در غیر این صورت، همچنان با این ابهام روبه‌رو هستیم که کدام یک از ترکیب‌های خطی کت‌های مختل نشده تبه‌گن را در $0 \rightarrow \lambda$ به‌طور کامل از بین ببریم. یک چالش برای حرفه‌ای‌ترها وجود دارد: اگر تبه‌گنی مرتبه‌ی اول به‌طور کامل از بین نرود، یعنی برخی از ریشه‌های معادله‌ی مشخصه با هم برابر باشند باید چه کرد؟ (مسأله‌ی ۱۲ این فصل را ببینید)

حال بگذارید تا فرآیند اصلی نظریه‌ی اختلال تبهگن را خلاصه‌وار بنویسیم:

۱- مشخص کردن کت‌های مختل نشده‌ی تبهگن و تشکیل ماتریس اختلال V ، که اگر تبهگنی g گانه باشد، یک ماتریس $g \times g$ خواهد بود.

۲- قطری کردن ماتریس اختلال که به‌طور معمول با حل معادله‌ی مشخصه‌ی مناسب صورت می‌گیرد.

۳- تطبیق ریشه‌های معادله مشخصه با جابه‌جایی مرتبه اول انرژی. کت‌های پایه‌ای که ماتریس V را قطری کرده‌اند، کت‌های مرتبه صفر هستند که کت‌های مختل شده در حد $\lambda \rightarrow 0$ به سمت آنها میل می‌کنند.

۴- برای مرتبه‌های بالاتر از فرمول‌های متناظر با نظریه‌ی اختلال غیرتبهگن استفاده می‌شود به‌جز این که در جمع‌ها، سهم تمام کت‌های مختل نشده در زیرفضای تبهگن D را خارج می‌کنیم.

اثر اشتراک خطی

به‌عنوان مثالی از نظریه‌ی اختلال تبهگن، بگذارید تا اثر یک میدان خارجی یکنواخت را بر روی حالت‌های برانگیخته‌ی اتم هیدروژن مطالعه کنیم. همان‌طور که می‌دانیم در نظریه‌ی شرودینگر با یک پتانسیل کولنی خالص و بدون در نظر گرفتن وابستگی اسپینی، حالت‌های مقید اتم هیدروژن تنها به عدد کوانتومی اصلی n وابسته‌اند. این امر منجر به تبهگنی برای تمام حالت‌ها به غیر از حالت پایه می‌شود چون مقادیر مجاز l به‌ازای یک n مشخص عبارتند از:

$$0 \leq l < n \quad (۱۶-۲-۵)$$

مثلاً برای تراز $n = 2$ یک حالت $l = 0$ وجود دارد که به آن $2s$ گفته می‌شوند و نیز سه حالت $l = 1$ ($m = \pm 1, 0$) موجود است که به $2p$ معروفند. تمام این حالت‌ها انرژی یکسان $-e^2/8a_0$ دارند. وقتی که ما یک میدان الکتریکی یکنواخت را در راستای z اعمال می‌کنیم، پتانسیل اختلالی مناسب عبارت است از:

$$V = -ez|\mathbf{E}| \quad (۱۷-۲-۵)$$

که باید آن را قطری کرد. قبل از آن که با جزییات به محاسبه‌ی آرایه‌های ماتریسی در پایه‌های معمول (nlm) پردازیم، دقت می‌کنیم که اختلال (۱۷-۲-۵) تنها بین حالت‌هایی با پارته‌ی مخالف جواب غیرصفر دارد. یعنی در مثال ما وقتی که $l = 0$ و $l = 1$ است جواب مخالف صفر می‌گردد. به‌علاوه برای

توجه کنید که نسبت شدت میدان الکتریکی به جابه‌جایی، خطی است و به همین خاطر این اثر، به اثر اشتراک خطی معروف است. راهی که می‌توان با آن وجود این اثر را نشان داد توجه به این نکته است که ویژه‌کت‌های انرژی (۲-۲-۲۱)، ویژه حالت‌های پارینه نیستند و بنابراین مجازند که تکانه‌ی دو قطبی الکتریکی دائمی غیرصفر داشته باشند. همان‌طور که با محاسبه‌ی $\langle Z \rangle$ به راحتی می‌توانیم این مسأله را ببینیم. به‌طور کلی برای یک حالت انرژی که می‌توان آن را به شکل برهم نهی حالت‌های مخالف پارینه نوشت ممکن است که یک تکانه‌ی دو قطبی وجود داشته باشند که اثر اشتراک از همین جا نشأت می‌گیرد.

اکنون می‌توانیم یک سؤال جالب پرسیم. اگر اتم هیدروژن "واقعی" را بررسی کنیم، در واقع ترازهای $2s$ و $2p$ تبهگن نیستند. همان‌طور که در بخش بعد نشان خواهیم داد، به خاطر نیروی اسپین مداری، $2p_{3/2}$ از $2p_{1/2}$ مجزاست و حتی تبهگنی بین ترازهای $2s_{1/2}$ و $2p_{1/2}$ که در نظریه‌ی تک ذره‌ای دیراک بر آن تأکید می‌شود، توسط اثرات الکترودینامیک کوانتومی (جابه‌جایی لمپ) از بین می‌رود. بنابراین می‌توانیم پرسیم، آیا به کار بردن نظریه‌ی اختلال تبهگن برای این مسأله واقع‌گرایانه است؟ مقایسه با جواب‌های دقیق نشان می‌دهد که اگر آرایه‌های ماتریس اختلال، در مقایسه با جداشدگی جابه‌جایی لمپ بسیار بزرگ باشند، آنگاه جابه‌جایی انرژی برای تمام مقاصد عملی با $|E|$ رابطه‌ی خطی دارد و فرمول‌بندی نظریه‌ی اختلال تبهگن در این جا قابل استفاده است. از طرف دیگر، اگر آرایه‌های ماتریس اختلال در مقایسه با جداشدگی جابه‌جایی لمپ کوچک باشند، آنگاه جابه‌جایی انرژی درجه‌ی دوم خواهد بود و ما می‌توانیم نظریه‌ی اختلال غیرتبهگن را به کار ببریم. مسأله‌ی ۱۳ این فصل را ببینید. این ملاحظات نشان می‌دهند که هنوز وقتی در مقایسه با مقیاس تعریف شده توسط آرایه‌های ماتریس اختلال، ترازهای انرژی تبهگن باشند، فرمول‌بندی نظریه‌ی اختلال تبهگن، کارایی دارد. در حالت‌های میانی باید کار سخت‌تری را انجام دهیم. مطمئن‌تر است که برای قطری کردن دقیق هامیلتونی در فضایی که با همه‌ی ترازهای نزدیک به هم ساخته می‌شود، تلاش کنیم.

۳.۵ اتم‌های هیدروژن گونه: ساختار ریز و اثر زیمان

برهم کنش اسپین مدار و ساختار ریز

در این بخش ترازهای اتمی و اتم‌های هیدروژن گونه را مورد مطالعه قرار می‌دهیم. اتم‌های هیدروژن گونه اتم‌هایی هستند که در لایه‌ی ظرفیت خود یک الکترون دارند. اتم‌های آلکالی نظیر سدیم (Na) و پتاسیم (K) به این دسته تعلق دارند.

پتانسیل مرکزی (وابسته به اسپین) $V_c(r)$ ، مناسب برای الکترون ظرفیت، دقیقاً به شکل پتانسیل کولنی خالص نیست. به این خاطر که پتانسیل الکترواستاتیکی $\phi(r)$ که در

$$V_c(r) = e\phi(r) \quad (۱-۳-۵)$$

ظاهر می شود، تنها ناشی از بار الکتریکی هسته $|e|Z$ نیست. بلکه باید اثر بارهای منفی قرار گرفته در لایه های درونی تر را نیز به حساب آوریم. شکل دقیق $\phi(r)$ مورد نظر ما نیست. به طور ساده یادآوری می کنیم که مشخصه ی تبهگنی پتانسیل کولنی خالص در این جا حذف می شود به طوری که حالت های بالاتر l ، یک لایه ی n بالاتر را اتخاذ می کنند. از نظر فیزیکی این بالا رفتن به این خاطر است که حالت های با l بالاتر نسبت به رانش ابر الکترونی حساس ترند.

به جای مطالعه ی جزییات $V_c(r)$ که ساختار بزرگ اتم هیدروژن را مشخص می کند، در مورد اثر برهم کنش اسپین مدار ($\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$) که منجر به ساختار ریز می شود، بحث می کنیم. وجود این برهم کنش را به طور کیفی در ادامه خواهیم فهمید. به خاطر نیروی مرکزی (۱-۳-۵) الکترون ظرفیت در معرض میدان الکتریکی:

$$\mathbf{E} = -\left(\frac{1}{e}\right)\nabla V_c(r) \quad (۲-۳-۵)$$

قرار می گیرد. اما هرگاه که یک بار متحرک تحت میدان الکتریکی قرار گیرد، میدان مغناطیسی "مؤثری" را درک می کند، که با رابطه ی زیر داده می شود:

$$\mathbf{B}_{\text{eff}} = -\left(\frac{\mathbf{v}}{c}\right) \times \mathbf{E} \quad (۳-۳-۵)$$

از آن جا که الکترون یک تکانه ی مغناطیسی N به شکل زیر دارد:

$$\mu = \frac{e\mathbf{S}}{m_e c} \quad (۴-۳-۵)$$

حدس می زنیم که یک پتانسیل اسپین-مداری V_{LS} در هامیلتونی وجود داشته باشد.

$$\begin{aligned} H_{LS} &\stackrel{?}{=} -\mu \cdot \mathbf{B}_{\text{eff}} \\ &= \mu \cdot \left(\frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{E}\right) \\ &= \left(\frac{e\mathbf{S}}{m_e c}\right) \cdot \left[\frac{\mathbf{p}}{m_e c} \times \left(\frac{\mathbf{x}}{r}\right) \frac{1}{(-e)} \frac{dV_c}{dr}\right] \\ &= \frac{1}{m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV_c}{dr} (\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}) \end{aligned} \quad (۵-۳-۵)$$

وقتی که این عبارت با برهم کنش اسپین - مدار مشاهده شده، مقایسه می‌شود به نظر می‌رسد که علامت این عبارت درست اما بزرگی آن به اندازه‌ی یک ضریب دو بزرگ‌تر است. توصیفی کلاسیکی برای این مسأله بر مبنای حرکت تقدیمی اسپین وجود دارد (بعد از کار آل. اچ. توماس، به حرکت تقدیمی توماس معروف شد)، اما ما خود را در مورد شرح آن به زحمت نمی‌اندازیم (به عنوان مثال به جکسون ۱۹۷۵ مراجعه کنید). برای سادگی، برهم کنش اسپین - مدار را مسأله‌ای ساختار شناسانه می‌گوییم و V_{LS} را یک دوم (۵-۳-۵) می‌گیریم. توضیح کوانتوم مکانیکی صحیح این اختلاف را باید در نظریه‌ی دیراک (نسبیتی) الکترون جستجو کرد (برای نمونه رجوع شود به ساکورایی ۱۹۶۷).

حال در موقعیتی هستیم که نظریه‌ی اختلال را بر اتم‌های هیدروژن گونه اعمال کنیم و V_{LS} را به عنوان اختلال در نظر بگیریم (V در بخش ۵-۱ و ۵-۲). هامیلتونی مختل نشده H_0 با رابطه‌ی زیر داده می‌شود:

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_c(r) \quad (۶-۳-۵)$$

که در آن پتانسیل مرکزی V_c برای اتم‌های آلکالی به شکل پتانسیل کولنی خالص نیست. با این H_0 آزادیم که یکی از کت‌های پایه‌ی زیر را انتخاب کنیم.

مجموعه‌ی ۱: ویژه کت‌های L^2, L_z, S^2, S_z

مجموعه‌ی ۲: ویژه کت‌های L^2, S^2, J^2, J_z

(۷-۳-۵)

در غیاب V_{LS} (یا H_{LS}) هر کدام از مجموعه‌های بالا مقصود ما را برآورده می‌سازند. به این معنی که، این کت‌های پایه‌ی ویژه کت‌های انرژی هم هستند. اما وقتی که H_{LS} اضافه می‌شود ملزم می‌شویم که از مجموعه ۲ در (۷-۳-۵) استفاده کنیم. چون $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ با L_z و S_z جابه‌جا نمی‌شود در حالی که با J^2 و J_z جابه‌جا پذیر است. قانون اصلی را به یاد بیاورید: کت‌های مختل نشده‌ای را انتخاب می‌کنیم که اختلال را قطری کنند. اگر کسی از ویژه کت‌های S_z و L_z [مجموعه‌ی ۱ در (۷-۳-۵)] به عنوان کت‌های پایه در این مسأله استفاده کند یا باید دیوانه باشد و یا خود آزاری (مازوخیسم) داشته باشد. اگر به طور کورکورانه در نظریه‌ی اختلال تبهگن از مجموعه‌ی ۱ به عنوان کت‌های پایه استفاده کنیم مجبوریم که ماتریس V_{LS} (یا H_{LS}) را در نمایش S_z و L_z قطری کنیم. پس از انجام جبر بسیار سختی، نتایج بدست آمده همان ویژه کت‌های J_z و J^2 هستند که به عنوان کت‌های مختل نشده‌ی مرتبه‌ی صفرم مورد استفاده قرار می‌گیرند.

در نظریه‌ی اختلال تبهکن، اگر اختلال در نمایشی که به کار می‌بریم از قبل قطری باشد، برای به دست آوردن جابه‌جایی انرژی باید مقدار انتظاری بگیریم. تابع موج به شکل دو مؤلفه‌ای صریحاً به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r) y_l^{j=l \pm 1/2, m} \quad (۸-۳-۵)$$

که در آن $y_l^{j=l \pm 1/2, m}$ تابع اسپین-زاویه‌ای بخش ۳-۷ است [۳-۷-۶۴] را ببینید. برای جابه‌جایی مرتبه اول به دست می‌آوریم:

$$\Delta_{nlj} = \frac{1}{2m_e^2 c^2} \left\langle \frac{1}{r} \frac{dV_c}{dr} \right\rangle_{nl} \frac{\hbar^2}{2} \left\{ \begin{array}{l} l \\ -(l+1) \end{array} \right\} \quad \begin{array}{l} j=l+\frac{1}{2} \\ j=l-\frac{1}{2} \end{array} \quad (۹-۳-۵)$$

$$\left\langle \frac{1}{r} \frac{dV_c}{dr} \right\rangle_{nl} \equiv \int_0^\infty R_{nl} \frac{1}{r} \frac{dV_c}{dr} R_{nl} r^2 dr$$

که در آن از اتحاد مستقل از m استفاده کرده‌ایم [۳-۷-۶۵] را ببینید:

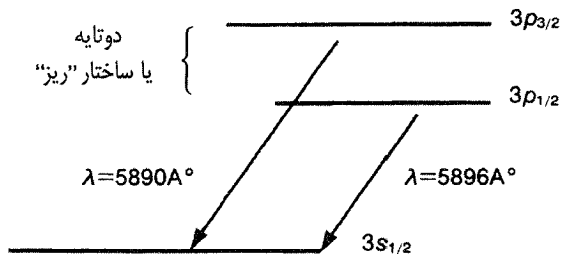
$$\int y_l^\dagger \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} y_l d\Omega = \frac{1}{2} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \hbar^2 = \frac{\hbar^2}{2} \left\{ \begin{array}{l} l \\ -(l+1) \end{array} \right\} \quad \begin{array}{l} j=l+\frac{1}{2} \\ j=l-\frac{1}{2} \end{array} \quad (۱۰-۳-۵)$$

معادله‌ی (۹-۳-۵) به قانون بازه‌ی لانده معروف است.

برای روشن شدن بحث، یک اتم سدیم را در نظر بگیرید. با استفاده از نمادگذاری استاندارد اتمی آرایش حالت پایه‌ی این اتم عبارت است از:

$$(1s)^2 (2s)^2 (2p)^6 (3s) \quad (۱۱-۳-۵)$$

۱۰ الکترون داخلی این اتم را می‌توان به شکل متقارن کروی ابر الکترونی نشان داد. ما به برانگیختگی الکترون یازدهم از $3s$ به تراز بالاتر علاقه‌مندیم. نزدیک‌ترین امکان برانگیختگی به $3p$ است. از آنجا که پتانسیل ما به شکل کولنی صرف نیست، $3p$ و $3s$ جدا می‌شوند. ساختار ریز ناشی از V_{LS} حتی یک جدایش در $3p$ به وجود می‌آورد و آن را به $3p_{1/2}$ و $3p_{3/2}$ تقسیم می‌کند. که در آن اندیس، نماینده‌ی j است.



شکل ۲-۵: نمایش خطوط $3s$ و $3p$. از آن‌جا که $V_c(r)$ به‌جای پتانسیل کولنی خالص، پتانسیل پوششی کولنی ناشی از هسته‌ی الکترون‌ها است، تبهگنی $3s$ و $3p$ از بین می‌رود. V_{LS} نیز تبهگنی $3p_{1/2}$ و $3p_{3/2}$ را از بین می‌برد.

در آزمایشگاه، دو خط زرد مجزای نزدیک به هم رویت می‌کنیم که به خطوط D سدیم معروف‌اند. طول موج یکی از این خطوط 5896 \AA و طول موج دیگری 5890 \AA است. شکل ۲-۵ را ببینید. دقت کنید که خط $3p_{3/2}$ بالاتر است، چون انتگرال شعاعی در (۵-۳-۹) مثبت است.

برای ارزیابی مرتبه‌ی بزرگی جداشدگی ساختار ریز اجازه دهید برای $Z=1$ بنویسیم:

$$\left\langle \frac{1}{r} \frac{dV_c}{dr} \right\rangle_{ni} \sim \frac{e^2}{a_0^3} \quad (12-3-5)$$

این رابطه تنها بر مبنای ملاحظات ابعادی نوشته شده است. بنابراین جداشدگی ساختار ریز از مرتبه‌ی $(e^2/a_0^3)(\hbar/m_e c)^2$ است که با جداشدگی بالمر از مرتبه‌ی e^2/a_0 قابل مقایسه است.

مفید است که در این جا یادآوری کنیم، شعاع کلاسیکی الکترون، طول موج کامپتون الکترون و شعاع بور رابطه‌ی زیر را دارند:

$$\frac{e^2}{m_e c^2} : \frac{\hbar}{m_e c} : a_0 :: 1 : 137 : (137)^2 \quad (13-3-5)$$

که در آن از رابطه‌ی زیر استفاده کرده‌ایم:

$$\frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137} \quad (14-3-5)$$

به همین صورت، جداشدگی ساختار ریز با جداشدگی بالمر به‌شکل زیر رابطه دارد:

$$\left(\frac{e^2}{a_0^3} \frac{\hbar^2}{m_e^2 c^2} \right) : \left(\frac{e^2}{a_0} \right) :: \left(\frac{1}{137} \right)^2 : 1 \quad (15-3-5)$$

که با استفاده از آن می‌توان خاستگاه عنوان ساختار ریز را شرح داد. اثرات دیگری با همین مرتبه‌ی بزرگی وجود دارند. مخصوصاً تصحیح نسیتی جرم، که از بسط:

$$\sqrt{m_e^2 c^4 + p^2 c^2} - m_e c^2 \approx \frac{p^2}{2m_e} - \frac{p^4}{8m_e^3 c^2} \quad (۱۶-۳-۵)$$

به‌دست می‌آید، از همین مرتبه است.

اثر زیمان

اکنون به بحث درباره‌ی هیدروژن یا اتم‌های هیدروژن گونه (تک الکترون) در یک میدان یکنواخت مغناطیسی (اثر زیمان) می‌پردازیم. وقتی که اسپین الکترون را به حساب می‌آوریم به آن اثر زیمان نابهنجار گفته می‌شود. یادآوری می‌کنیم که میدان مغناطیسی یکنواخت B با مشتق‌گیری از پتانسیل برداری به‌دست می‌آید.

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}(\mathbf{B} \times \mathbf{r}) \quad (۱۷-۳-۵)$$

اگر B در جهت مثبت محور Z باشد ($\mathbf{B} = B\hat{z}$)

$$\mathbf{A} = -\frac{1}{2}(By\hat{x} - Bx\hat{y}) \quad (۱۸-۳-۵)$$

که در آن B بیان‌کننده‌ی $|\mathbf{B}|$ است. جدا از جمله‌ی اسپین، بر هم کنش هامیلتونی با جایگذاری زیر تعمیم داده می‌شود:

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c} \quad (۱۹-۳-۵)$$

بنابراین داریم:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + V_c(r) - \frac{e}{2m_e c}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) + \frac{e^2 \mathbf{A}^2}{2m_e c^2} \quad (۲۰-۳-۵)$$

چون

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}' | \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}) | \rangle &= -i\hbar \nabla' \cdot [\mathbf{A}(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' |] \\ &= \langle \mathbf{x}' | \mathbf{A}(\mathbf{x}') \cdot \mathbf{p} | \rangle + \langle \mathbf{x}' | \rangle [-i\hbar \nabla' \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}')] \end{aligned} \quad (۲۱-۳-۵)$$

منطقی است که $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}$ را با $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ عوض کنیم، هرگاه داشته باشیم:

$$\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}) = 0 \quad (۲۲-۳-۵)$$

که برای پتانسیل برداری (۵-۳-۱۸) برقرار است. توجه کنید:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} &= |\mathbf{B}| \left(-\frac{1}{2} y p_x + \frac{1}{2} x p_y \right) \\ &= \frac{1}{2} |\mathbf{B}| L_z \end{aligned} \quad (۲۳-۳-۵)$$

$$A^2 = \frac{1}{4} |\mathbf{B}|^2 (x^2 + y^2) \quad (۲۴-۳-۵)$$

برای (۵-۳-۲۰) به دست می‌آوریم:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + V_c(r) - \frac{e}{2m_e c} |\mathbf{B}| L_z + \frac{e^2}{8m_e c^2} |\mathbf{B}|^2 (x^2 + y^2) \quad (۲۵-۳-۵)$$

برای این کار می‌توانیم برهم کنش تکانه‌ی مغناطیسی اسپین را اضافه کنیم:

$$-\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = \frac{-e}{m_e c} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} = \frac{-e}{m_e c} |\mathbf{B}| S_z \quad (۲۶-۳-۵)$$

جمله‌ی درجه دوم $|\mathbf{B}|^2 (x^2 + y^2)$ برای اتم تک الکترونی مهم نیست. این جمله برای حالت پایه‌ی اتم هلیوم که در آن $L_z^{(tot)}$ و $S_z^{(tot)}$ هر دو صفر می‌شوند، اهمیت دارد. خواننده وقتی به این مسأله باز خواهد گشت که در تمرین‌های ۱۸ و ۱۹ این فصل، پذیرفتاری دیامغناطیسی را محاسبه کند.

به‌طور خلاصه با حذف جمله‌ی مربعی هامیلتونی کلی از سه جمله‌ی زیر ساخته شده است:

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + V_c(r) \quad (الف) \quad (۲۷-۳-۵)$$

$$H_{LS} = \frac{1}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV_c(r)}{dr} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad (ب) \quad (۲۷-۳-۵)$$

$$H_B = \frac{-e|\mathbf{B}|}{2m_e c} (L_z + 2S_z) \quad (ج) \quad (۲۷-۳-۵)$$

به ضریب ۲ در جلوی S_z دقت کنید. این ضریب به این خاطر است که ضریب g الکترون برابر با ۲ است.

فرض کنید که H_B به شکل یک اختلال کوچک رفتار می‌کند. می‌توانیم اثر H_B را با استفاده از ویژه‌کت‌های $H_B + H_{LS}$ (ویژه‌کت‌های \mathbf{J}^2 و J_z) به عنوان کت‌های پایه مورد مطالعه قرار دهیم. توجه کنید که:

$$L_z + 2S_z = J_z + S_z \quad (۲۸-۳-۵)$$

جابه‌جایی مرتبه اول را می‌توان به شکل زیر نوشت:

$$\frac{-e|\mathbf{B}|}{2m_e c} \langle J_z + S_z \rangle_{j=l \pm 1/2, m} \quad (29-3-5)$$

مقدار انتظاری S_z بلافاصله $m\hbar$ را می‌دهد. به همین صورت برای $\langle S_z \rangle$ ابتدا یادآوری می‌کنیم:

$$\begin{aligned} \left| j = l \pm \frac{1}{2}, m \right\rangle &= \pm \sqrt{\frac{l \pm m + \frac{1}{2}}{2l+1}} \\ \times \left| m_l = m - \frac{1}{2}, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle &+ \sqrt{\frac{l \mp m + \frac{1}{2}}{2l+1}} \left| m_l = m + \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2} \right\rangle \end{aligned} \quad (30-3-5)$$

مقدار انتظاری S_z را می‌توان به آسانی محاسبه کرد:

$$\begin{aligned} \langle S_z \rangle_{j=l \pm 1/2, m} &= \frac{\hbar}{2} (|c_+|^2 - |c_-|^2) \\ &= \frac{\hbar}{2} \frac{1}{(2l+1)} \left[\left(l \pm m + \frac{1}{2} \right) - \left(l \mp m + \frac{1}{2} \right) \right] = \pm \frac{m\hbar}{(2l+1)} \end{aligned} \quad (31-3-5)$$

به این ترتیب فرمول لانده را برای انرژی به دست می‌آوریم (ناشی از میدان \mathbf{B}):

$$\Delta E_B = \frac{-e\hbar B}{2m_e c} m \left[1 \pm \frac{1}{(2l+1)} \right] \quad (32-3-5)$$

می‌بینیم که جابه‌جایی انرژی (۳۲-۳-۵) متناسب با m است. برای فهمیدن خاستگاه فیزیکی این مطلب، روش دیگری برای استخراج (۳۱-۳-۵) ارائه می‌کنیم. یادآوری می‌کنیم که با استفاده از قضیه‌ی تصویر که در بخش ۳-۱۰ بیان شد نیز مقدار انتظاری S_z به دست می‌آید. داریم [۳-۱۰-۴۵] را ببینید:

$$\begin{aligned} \langle S_z \rangle_{j=l \pm 1/2, m} &= \left[\langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{J} \rangle_{j=l \pm 1/2} \right] \frac{m\hbar}{\hbar^2 j(j+1)} \\ &= \frac{m \langle \mathbf{J}^2 + \mathbf{S}^2 - \mathbf{L}^2 \rangle_{j=l \pm 1/2}}{2\hbar j(j+1)} \\ &= m\hbar \left[\frac{(l \pm \frac{1}{2})(l \pm \frac{1}{2} + 1) + \frac{3}{4} - l(l+1)}{2(l \pm \frac{1}{2})(l \pm \frac{1}{2} + 1)} \right] \\ &= \pm \frac{m\hbar}{(2l+1)} \end{aligned} \quad (33-3-5)$$

که با (۳-۳۱-۵) در توافق کامل است. در بحث بالا میدان مغناطیسی به صورت یک اختلال کوچک عمل می‌کرد. اکنون حالت مخالف را در نظر می‌گیریم (حد پاشن-بک) که در آن میدان مغناطیسی آنقدر قوی است که H_B بسیار مهم‌تر از H_{LS} می‌شود. به طوری که می‌توانیم H_{LS} را بعداً به صورت یک اختلال کوچک اضافه کنیم. با داشتن $H_0 + H_B$ اعداد کوانتومی قابل استفاده، فقط L_z و S_z هستند. حتی J^2 نیز قابل استفاده نیست. چون با داشتن میدان مغناطیسی قوی در یک جهت خاص مثلاً جهت z تقارن کروی به کلی از بین می‌رود. در اینجا تنها تقارن استوانه‌ای وجود دارد، یعنی یک ناوردایی تحت چرخش پیرامون محور z وجود دارد. بنابراین ویژه کت‌های L_z و S_z ، $|l, s = \frac{1}{2}, m_l, m_s\rangle$ به عنوان کت‌های پایه مورد استفاده قرار می‌گیرند. اثر جمله‌ی اصلی H_B به راحتی محاسبه می‌شود:

$$\langle H_B \rangle_{m_l, m_s} = \frac{-e|\mathbf{B}|\hbar}{2m_e c} (m_l + 2m_s) \quad (۳۴-۳-۵)$$

تبهگنی $2(2l+1)$ در m_l و m_s که از ابتدا در H_0 وجود داشت [۳-۲۷-الف] را ببینید] اینک با H_B به حالت‌هایی با $(2m_s) + (m_l)$ یکسان تقلیل یافته است. مثلاً $(1) + (m_l)$ و $(-1) + (m_l + 2)$ واضح است که باید مقدار انتظاری $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ را با توجه $|m_l, m_s\rangle$ محاسبه کنیم.

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \rangle &= \langle L_z S_z + \frac{1}{2}(L_+ S_- + L_- S_+) \rangle_{m_l, m_s} \\ &= \hbar^2 m_l m_s \end{aligned} \quad (۳۵-۳-۵)$$

که در آن از

$$\langle L_{\pm} \rangle_{m_l} = 0, \quad \langle S_{\pm} \rangle_{m_s} = 0 \quad (۳۶-۳-۵)$$

استفاده کرده‌ایم. بنابراین:

$$\langle H_{LS} \rangle_{m_l, m_s} = \frac{\hbar^2 m_l m_s}{2m_e^2 c^2} \left\langle \frac{1}{r} \frac{dV_c}{dr} \right\rangle \quad (۳۷-۳-۵)$$

در بسیاری از کتاب‌های مقدماتی توضیح تصویری نتایج میدان ضعیف (۳-۳۲-۵) نتایج میدان قوی (۳-۳۴-۵) وجود دارد اما این توضیح را در این جا بیان نمی‌کنیم. ما به طور خلاصه نتایج خود را در جدول ۱-۵ بیان کرده‌ایم که در آن قدرت و ضعف میدان‌های \mathbf{B} با مقایسه‌ی بزرگی $e\hbar\mathbf{B}/2m_e c$ و $(1/137)^2 e^2/a_0$ درجه‌بندی شده است. در این جدول تقریباً خوب یعنی تا جایی خوب که بشود از برهم کنش ضعیف‌تر صرف نظر کرد.

جدول ۱-۵

	بر همکنش	تقریباً خوب	بد	همیشه خوب
B ضعیف	H_{LS}	$J^2(L.S)$	L_z, S_z	L^2, S^2, J_z
B قوی	H_B	L_z, S_z	$J^2(L.S)$	

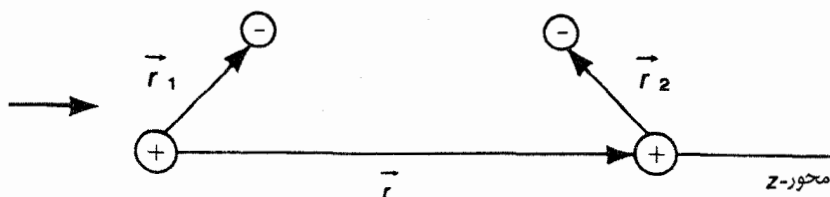
در حالت خاص بگذارید تا تراز p الکترون یعنی $l = 1$ را در نظر بگیریم ($P_{3/2}, P_{1/2}$). در میدان ضعیف **B** جابه‌جایی‌های انرژی نسبت به **B** خطی هستند که شیب آن با رابطه‌ی:

$$m \left[1 \pm \left(\frac{1}{2l+1} \right) \right]$$

مشخص می‌شود. همان‌طور که **B** را افزایش می‌دهیم، آمیختگی بین حالت‌هایی که مقدار m یکسان دارند (مثلاً با $p_{3/2}$ با $m = \pm \frac{1}{2}$ و $p_{1/2}$ با $m = \pm \frac{1}{2}$) ممکن می‌شود. در این ارتباط توجه کنید که عملگر $L_z + 2S_z$ که در H_B ظاهر می‌شود ($[J^2 - 3J_z^2]$) تانسور مرتبه ۱، $T_{q=0}^{(k=1)}$ با مؤلفه‌ی $q=0$ است. در حد مقادیر میانی **B** (**B**)‌هایی که نه زیاد کوچک‌اند و نه زیاد بزرگ (برای به‌دست آوردن مقدار انتظاری، فرمول‌های ساده‌ای همچون (۳-۳۲) و (۳-۳۴) اعتبار ندارد. در واقع لازم است که در این جا ماتریس 2×2 مناسب را قطری کرد (گاتفرید ۱۹۶۶- صفحه‌ی ۳۷۳-۳۷۱). در حد میدان قوی **B**، جابه‌جایی‌های انرژی دوباره متناسب با $|B|$ هستند. این مطلب را در (۳-۳۴) دیدیم. در این جا شیب با $m_l + 2m_s$ مشخص می‌شود.

برهم‌کنش و اندر والس

یکی از کاربردهای مهم و خوب نظریه‌ی اختلال ریلی- شرودینگر، محاسبه‌ی برهم‌کنش بلند برد یا واندروالس، بین حالت‌های پایه‌ی دو اتم هیدروژن است. نشان دادن این که انرژی بین دو اتم با فاصله‌ی دور r ، جاذبه است و با نسبت r^{-6} تغییر می‌کند، کار ساده‌ای است.



شکل ۳-۵: دو اتم هیدروژن که پروتون‌هایی در فاصله‌ی ثابت r دارند و جابجایی الکترون‌های آن‌ها r_1 است.

دو پروتون دو اتم هیدروژن را در نظر بگیرید که در یک فاصله r مشخص (در امتداد محور z) قرار گرفته‌اند. بردار \mathbf{r}_1 برداری است که اولین پروتون را به الکترون مربوط به آن وصل می‌کند و بردار \mathbf{r}_2 برداری است که دومین پروتون را به الکترونش متصل می‌سازد. شکل ۳-۵ را ببینید. آنگاه هامیلتونی به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$H = H_0 + V$$

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{e^2}{r_1} - \frac{e^2}{r_2}$$

$$V = \frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{|\mathbf{r} + \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r} + \mathbf{r}_2|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} \quad (38-3-5)$$

حل پایین‌ترین انرژی H_0 به‌طور ساده، ضرب توابع موج حالت پایه اتم‌های هیدروژن غیر برهم‌کنشی است.

$$U_0^{(0)} = U_{100}^{(0)}(\mathbf{r}_1)U_{100}^{(0)}(\mathbf{r}_2) \quad (39-3-5)$$

اکنون برای \mathbf{r} ‌های بزرگ (خیلی بزرگ‌تر از شعاع بوهر a_0) اختلال V را برحسب توان‌های a_0 بسط می‌دهیم و به دست می‌آوریم:

$$V = \frac{e^2}{r^3}(x_1x_2 + y_1y_2 - 2z_1z_2) + O\left(\frac{1}{r^4}\right) + \dots \quad (40-3-5)$$

پایین‌ترین مرتبه یعنی جمله r^{-3} در (۴۰-۳-۵) ناشی از برهم‌کنش دو دوقطبی الکتریکی $e\mathbf{r}_2$ و $e\mathbf{r}_1$ است که در فاصله \mathbf{r} از هم قرار دارند. جملات مرتبه بالاتر نشان‌گر برهم‌کنش‌های چند قطبی‌های مرتبه بالاترند و بنابراین تمام جملات V شامل هماهنگ‌های کروی Y_l^m با l_i برای هر اتم هیدروژن هستند. بنابراین برای هر جمله در (۴۰-۳-۵) آرایه‌های ماتریسی مرتبه اول اختلال انرژی $V_{00} = 0$ است. چون حالت پایه‌ی تابع موج $U_0^{(0)}$ ، (۳۹-۳-۵)، دارای $l_i = 0$ است (و $\int d\Omega Y_l^m(\Omega) = 0$ برای l و $m \neq 0$) اختلال مرتبه دوم عبارت است از:

$$E_k^{(2)}(r) = \frac{e^4}{r^6} \sum_{k \neq 0} \frac{|\langle k^{(0)} | x_1x_2 + y_1y_2 - 2z_1z_2 | 0^{(0)} \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (41-3-5)$$

که غیرصفر است. سریعاً می‌بینیم که این برهم‌کنش بستگی به $1/r^6$ دارد و چون $E_k^{(0)} > E_0^{(0)}$ این جمله منفی است. این پتانسیل واندروالس بلند برد $1/r^6$ یک خاصیت کلی برای برهم‌کنش بین حالت پایه‌ی دو اتم است.*

* کار انجام شده در کتاب شیف (۱۹۶۸)، صفحات ۲۶۳-۲۶۱ را ببینید. در آن کتاب ترازهای بالا و پایین پتانسیل واندروالس با استفاده از (۴۱-۳-۵) و نیز روش وروشی به دست آمده است. همچنین به اولین باورقی صفحه‌ی ۲۶۳ کتاب شیف که به اثرات تأخیری می‌پردازد توجه کنید.

۴.۵ روش‌های وروشی

نظریه‌ی اختلالی که در بخش پیش مورد مطالعه قرار گرفت فقط در شرایطی به ما کمک می‌کند که ما جواب‌های دقیق هامیلتونی‌ای که به اندازه‌ی کافی ساده است را بدانیم. در شرایطی که این جواب‌های دقیق مهیا نیستند، روش وروشی که در این جا مورد بحث قرار می‌گیرد می‌تواند برای تخمین انرژی حالت پایه‌ی E_0 مفید واقع شود.

با در نظر گرفتن "کت آزمایشی" $|\tilde{0}\rangle$ سعی می‌کنیم تا انرژی حالت پایه‌ی E_0 را حدس بزنیم. کت آزمایشی، شبیه به کت حالت پایه‌ی اصلی است. برای این کار ابتدا قضیه‌ای را که اهمیت علمی زیادی دارد به دست می‌آوریم. تعریف زیر را انجام می‌دهیم:

$$\bar{H} \equiv \frac{\langle \tilde{0} | H | \tilde{0} \rangle}{\langle \tilde{0} | \tilde{0} \rangle} \quad (۱-۴-۵)$$

که در آن این امکان که ممکن است $|\tilde{0}\rangle$ بهنجار نباشد نیز در نظر گرفته شده است. در ادامه اثبات را ارائه می‌دهیم.

قضیه.

$$\bar{H} \geq E_0 \quad (۲-۴-۵)$$

این نامساوی بدان معنی است که ما می‌توانیم با در نظر گرفتن کت‌های مختلف $|\tilde{0}\rangle$ حد بالایی برای E_0 به دست می‌آوریم.

اثبات: حتی با وجود این که ما، ویژه‌کت انرژی هامیلتونی H را نمی‌دانیم، می‌توانیم تصور کنیم که $|\tilde{0}\rangle$ را می‌توان به شکل زیر بسط داد:

$$|\tilde{0}\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} |k\rangle \langle k | \tilde{0} \rangle \quad (۳-۴-۵)$$

که در آن $|k\rangle$ ویژه‌کت دقیق انرژی H است:

$$H|k\rangle = E_k|k\rangle \quad (۴-۴-۵)$$

وقتی که از $E_k = E_k - E_0 + E_0$ برای محاسبه‌ی \bar{H} در (۱-۴-۵) استفاده کنیم، قضیه‌ی (۲-۴-۵) به دست می‌آید. داریم:

$$\bar{H} = \frac{\sum_{k=0}^{\infty} |\langle k | \tilde{0} \rangle|^2 E_k}{\sum_{k=0}^{\infty} |\langle k | \tilde{0} \rangle|^2} \quad (۵-۴-۵ \text{ الف})$$

$$= \frac{\sum_{k=1}^{\infty} |\langle k|\bar{0}\rangle|^2 (E_k - E_0)}{\sum_{k=0}^{\infty} |\langle k|\bar{0}\rangle|^2} + E_0 \quad (\text{ب } 5-4-5)$$

$$\geq E_0 \quad (\text{ج } 5-4-5)$$

که در آن از این واقعیت استفاده کردیم که $E_k - E_0$ در اولین جمع (ب ۵-۴-۵) الزاماً مثبت است. همچنین مشخص است که علامت تساوی در (۲-۴-۵) تنها وقتی حاصل می‌شود که $|\bar{0}\rangle$ دقیقاً همانند $|0\rangle$ باشد. یعنی اگر ضرایب $\langle k|\bar{0}\rangle$ همه برای k ‌های مخالف صفر، برابر با صفر شوند. □

قضیه (۲-۴-۵) کاملاً قوی است چون \bar{H} یک حد بالا برای انرژی حالت پایه واقعی مهیا می‌کند. به علاوه یک کت آزمایشی نسبتاً ضعیف هم می‌تواند انرژی خوبی را برای حالت پایه تخمین بزند چون اگر

$$\langle k|\bar{0}\rangle \sim 0(\varepsilon) \quad \text{for } k \neq 0 \quad (6-4-5)$$

آنگاه از (۵-۴-۵) داریم:

$$\bar{H} - E_0 \sim 0(\varepsilon^2) \quad (7-4-5)$$

در ادامه یک مثال از این مورد را خواهیم دید. البته این روش چیزی راجع به اختلاف بین \bar{H} و E_0 به ما نمی‌گوید. تنها می‌دانیم که \bar{H} بزرگ‌تر (یا مساوی با) از E_0 است.

راه دیگر برای بیان قضیه این است که ادعا کنیم که \bar{H} نسبت به وردش زیر ثابت است:

$$|\bar{0}\rangle \rightarrow |\bar{0}\rangle + \delta|\bar{0}\rangle \quad (8-4-5)$$

یعنی $\delta\bar{H} = 0$ وقتی رخ می‌دهد که $|\bar{0}\rangle$ منطبق بر $|0\rangle$ باشد. به این ترتیب درمی‌یابیم که اگر $|\bar{0}\rangle + \delta|\bar{0}\rangle$ در (۵-۴-۵) به جای $|\bar{0}\rangle$ به کار رود و ما \bar{H} را محاسبه کنیم آنگاه خطایی که در تقریب مرتکب شده‌ایم شامل $|\bar{0}\rangle$ تا مرتبه $(\delta|\bar{0}\rangle)^2$ است.

روش و روشی در مورد این که برای تخمین انرژی حالت پایه کدام یک از کت‌های آزمایشی به کار گرفته شود چیزی به ما نمی‌گوید. اغلب باید به شهود فیزیکی متوسل شویم (برای مثال رفتار تابع موج در فواصل دور). آنچه در عمل باید انجام دهیم، کاراکتربندی کت‌های آزمایشی برحسب یک یا چند مختصه λ_1 و λ_2 و ... سپس محاسبه‌ی \bar{H} به‌عنوان تابعی از λ_1 و λ_2 و ... است. آنگاه \bar{H} را کمینه می‌کنیم. این کار را در سه مرحله انجام می‌دهیم: (۱) مشتق برحسب مختصه‌ها را برابر با صفر قرار می‌دهیم.

یعنی:

$$\frac{\partial \bar{H}}{\partial \lambda_1} = 0, \quad \frac{\partial \bar{H}}{\partial \lambda_2} = 0, \dots \quad (۹-۴-۵)$$

(۲) مطلوب‌ترین مقادیر را برای λ_1 و λ_2 و به دست می‌آوریم و (۳) آنها را در \bar{H} جایگذاری می‌کنیم. اگر تابع موج کت آزمایشی قبلاً دقیقاً به شکل ویژه تابع انرژی حالت پایه باشد می‌توانیم با این روش تابع انرژی حالت پایه را به دست آوریم. برای مثال فرض کنید که شخصی حدس بزند که تابع موج حالت پایه‌ی اتم هیدروژن باید به شکل زیر باشد:

$$\langle x|0\rangle \propto e^{-r/a} \quad (۱۰-۴-۵)$$

که در آن a پارامتری است که می‌تواند تغییر کند. با کمینه کردن \bar{H} با (۱۰-۴-۵)، انرژی حالت پایه‌ی صحیح برابر با $-e^2/2a_0$ می‌شود. تعجب‌برانگیز نیست، کمینه وقتی به دست می‌آید که a با شعاع بوهر a_0 برابر باشد.

به عنوان مثال دوم سعی می‌کنیم که تا حالت پایه‌ی مسأله‌ی چاه بی‌نهایت (جعبه‌ی یک بعدی) را با

تعریف:

$$V = \begin{cases} 0, & \text{برای } |x| < a \\ \infty, & \text{برای } |x| > a \end{cases} \quad (۱۱-۴-۵)$$

به دست آوریم. البته جواب‌های دقیق معلوم‌اند:

$$\langle x|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right)$$

$$E_0 = \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \left(\frac{\pi^2}{4a^2}\right) \quad (۱۲-۴-۵)$$

اما فرض می‌کنیم که این را نمی‌دانیم از قرار معلوم تابع موج باید در $x = \pm a$ صفر شود. به علاوه برای حالت پایه تابع موج بدون گره است. ساده‌ترین تابع تحلیلی که هر دوی این الزامات را برآورده می‌سازد سهمی‌ای است که بین $x = \pm a$ قرار دارد.

$$\langle x|\bar{0}\rangle = a^2 - x^2 \quad (۱۳-۴-۵)$$

که در آن در مورد بهنجارش $|\bar{0}\rangle$ نگرانی نداریم. در این جا پارامتر و روشی وجود ندارد. می‌توانیم \bar{H} را به صورت زیر محاسبه کنیم:

$$\bar{H} = \frac{\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\right) \int_{-a}^a (a^2 - x^2) \frac{d^2}{dx^2} (a^2 - x^2) dx}{\int_{-a}^a (a^2 - x^2)^2 dx}$$

$$= \left(\frac{10}{\pi^2}\right) \left(\frac{\pi^2 \hbar^2}{8a^2 m}\right) \approx 1.0132 E_0 \quad (14-4-5)$$

قابل توجه است که با این تابع آزمایشی ساده توانستیم با تقریب ۱/۳٪ به جواب درست برسیم. جواب بهتر وقتی حاصل می‌شود که از تابع آزمایشی پرقابلیت تری استفاده کنیم. تابع زیر را می‌آزماییم:

$$\langle x|\bar{0}\rangle = |a|^\lambda - |x|^\lambda \quad (15-4-5)$$

که در آن λ به عنوان پارامتر و روشی محسوب می‌شود. با عملیات جبری سراسر خواهیم داشت:

$$\bar{H} = \left[\frac{(\lambda + 1)(2\lambda + 1)}{(2\lambda - 1)} \right] \left(\frac{\hbar^2}{4ma^2} \right) \quad (16-4-5)$$

که یک کمینه در

$$\lambda = \frac{(1 + \sqrt{6})}{2} \approx 1.72 \quad (17-4-5)$$

دارد که از $\lambda = 2$ (یک سهمی) که پیش تر فرض کردیم، زیاد دور نیست. با این مقدار داریم:

$$\bar{H}_{\min} = \left(\frac{5 + 2\sqrt{6}}{\pi^2} \right) E_0 \approx 1.00298 E_0 \quad (18-4-5)$$

بنابراین روش و روشی با (۱۵-۴-۵) فقط با ۰/۳٪ خطا، جواب صحیح انرژی حالت پایه را می‌دهد. این نتیجه با توجه به سادگی تابع آزمایشی مورد استفاده بسیار جالب توجه و عالی است.

چطور می‌توان برای تابع آزمایشی به‌خوبی از تابع موج حالت پایه الگو گرفت؟ جواب دادن به این سؤال، بدون حل صریح انتگرال همپوشی $\langle 0|\bar{0}\rangle$ بسیار جالب توجه است. فرض می‌کنیم که $|\bar{0}\rangle$ بهنجار است. داریم [از (۱۴-۴-۵) تا (۱۸-۴-۵)]

$$\bar{H}_{\min} = \sum_{k=0}^{\infty} |\langle k|\bar{0}\rangle|^2 E_k$$

$$\geq |\langle 0|\bar{0}\rangle|^2 E_0 + 9E_0 (1 - |\langle 0|\bar{0}\rangle|^2) \quad (19-4-5)$$

که در آن $9E_0$ انرژی دومین حالت برانگیخته است. با توجه به ملاحظات پاریته، اولین حالت برانگیخته ($k=1$) سهمی ندارد. با حل $|\langle 0|\bar{0}\rangle|$ و استفاده از (۱۸-۴-۵) داریم:

$$|\langle 0|\bar{0}\rangle|^2 \geq \frac{9E_0 - \bar{H}_{\min}}{8E_0} = 0.99963 \quad (20-4-5)$$

بنابراین مؤلفه‌ی واحد $\langle \hat{0} |$ کمی از راستای عمود بر $\langle \hat{0} |$ انحراف دارد. اگر در مورد "زاویه" θ که با:

$$\langle \hat{0} | \hat{0} \rangle = \cos \theta \quad (۲۱-۴-۵)$$

تعریف می‌شود، اطلاعات می‌خواهیم، آنگاه (۲۰-۴-۵) متناظر خواهد بود با:

$$\theta \leq 1.1^\circ \quad (۲۲-۴-۵)$$

بنابراین $\langle \hat{0} |$ و $\langle \hat{0} |$ تقریباً موازی هستند.

یکی از اولین کاربردهای روش و روشی انرژی حالت پایه‌ی اتم هلیم است که در بخش ۶-۱ به آن خواهیم پرداخت. همچنین می‌توانیم از روش و روشی برای تخمین انرژی‌های اولین حالت‌های برانگیخته نیز استفاده کنیم. برای این کار باید کت آزمایشی عمود بر تابع موج حالت پایه (اگر به صورت صریح معلوم باشد) یا یک کت تقریبی که از روش و روشی به دست می‌آید را مورد استفاده قرار دهیم.

۵.۵ پتانسیل‌های وابسته به زمان: تصویر برهم‌کنش

بیان مسأله

تا به اینجا در این کتاب با هامیلتونی‌هایی سر و کار داشته‌ایم که صریحاً به زمان بستگی نداشته‌اند. اما در طبیعت سیستم‌های کوانتومی پراهمیت زیادی وجود دارد که وابسته به زمان هستند. در ادامه‌ی این فصل نشان می‌دهیم که چطور با وضعیت‌هایی که در آن پتانسیل وابسته به زمان است، سر و کار داشته باشیم.

فرض می‌کنیم که می‌توانیم هامیلتونی خود را به دو قسمت تقسیم کنیم:

$$H = H_0 + V(t) \quad (۱-۵-۵)$$

که در آن H_0 صریحاً تابع زمان نیست. فرض می‌کنیم که مسأله‌ی $V(t) = 0$ حل شده است. یعنی ویژه‌کت‌های انرژی $|n\rangle$ و ویژه‌مقادیر E_n همگی معلوم‌اند* و به شکل زیر تعریف شده‌اند:

$$H_0 |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (۲-۵-۵)$$

ممکن است وضعیتی را مد نظر داشته باشیم که در آن در آغاز فقط یکی از ویژه‌حالت‌های انرژی H_0 (مثلاً $|i\rangle$) اشغال شده باشد. با گذر زمان حالت‌هایی غیر از $|i\rangle$ اشغال می‌شوند چون وقتی $V(t) \neq 0$ باشد، دیگر با یک مسأله‌ی "پایا" سرو کار نداریم. وقتی که خود H دربرگیرنده‌ی زمان باشد دیگر عملگر

* در (۲-۵-۵) دیگر از نمادهای $|n^{(0)}\rangle$ و $E_n^{(0)}$ استفاده نمی‌کنیم.

تحول زمانی برابر با $e^{-iHt/\hbar}$ نیست. در حالت کلی پتانسیل وابسته به زمان $V(t)$ باعث می‌شود که حالت‌هایی غیر از $|i\rangle$ اشغال گردند. سؤال اصلی این است، احتمال این که سیستم در حالت $|i\rangle$ با $n \neq i$ یافت شود را چطور می‌توان برحسب تابعی از زمان به دست آورد.

به‌طور کلی‌تر می‌خواهیم بدانیم، که چطور یک کت حالت اختیاری با گذر زمان تغییر می‌کند. برای این کت حالت، هامیلتونی کل جمع روی H_0 و $V(t)$ است. فرض کنید در $t = 0$ کت حالت سیستم فیزیکی با رابطه‌ی:

$$|\alpha\rangle = \sum_n c_n(0)|n\rangle \quad (۳-۵-۵)$$

داده می‌شود. ما می‌خواهیم $c_n(t)$ را برای $t > 0$ طوری پیدا کنیم که:

$$|\alpha, t_0 = 0; t\rangle = \sum_n c_n(t)e^{-iE_n t/\hbar}|n\rangle \quad (۴-۵-۵)$$

که در آن کت در طرف چپ بیان‌کننده‌ی کت حالت یک سیستم فیزیکی در تصویر شرودینگر و زمان t است که در $t = 0$ در $|\alpha\rangle$ قرار دارد.

احتمالاً خواننده کنجکاو به روش جدا کردن وابستگی زمانی ضرایب $|n\rangle$ در (۴-۵-۵) دقت کرده است. عامل $e^{-iE_n t/\hbar}$ حتی در غیاب V نیز حضور دارد. این روش نوشتن تحول زمانی روشن می‌کند که تحول زمانی $c_n(t)$ ناشی از حضور $V(t)$ است. اگر V برابر صفر باشد $c_n(t)$ برابر با $c_n(0)$ می‌شود. بنابراین مستقل از t می‌گردد. همان‌طور که به‌زودی خواهیم دید این نحوه‌ی جداسازی مناسب است چون $c_n(t)$ در یک معادله‌ی دیفرانسیل نسبتاً ساده صدق می‌کند. احتمال یافتن $|n\rangle$ با محاسبه‌ی $|c_n(t)|^2$ به دست می‌آید.

تصویر برهم‌کنش

قبل از آن که در مورد معادله‌ی دیفرانسیل برای $c_n(t)$ بحث کنیم به بحث در مورد تصویر برهم‌کنش می‌پردازیم. فرض کنید که یک سیستم فیزیکی داریم به طوری که کت حالت آن در $t = t_0$ نظیر $|\alpha\rangle$ باشد. اغلب t_0 را صفر در نظر می‌گیریم که در آن اندیس S به ما یادآوری می‌کند که با کتی در تصویر شرودینگر سر و کار داریم.

اکنون تعریف می‌کنیم:

$$|\alpha, t_0; t\rangle_I = e^{iH_0 t/\hbar} |\alpha, t_0; t\rangle_S \quad (۵-۵-۵)$$

که در آن $| \rangle_I$ مشخص کننده ی کتی است که شرایط فیزیکی مشابهی را در تصویر شرودینگر بیان می کند. در $t = 0$ کت $| \rangle_I$ همانند $| \rangle_S$ است. برای عملگرها (که مشاهده پذیرها را ارائه می کنند) مشاهده پذیرها را در تصویر برهم کنش به شکل زیر تعریف می کنیم:

$$A_I \equiv e^{iH_0t/\hbar} A_S e^{-iH_0t/\hbar} \quad (6-5-5)$$

به ویژه:

$$V_I = e^{iH_0t/\hbar} V e^{-iH_0t/\hbar} \quad (7-5-5)$$

که در آن V بدون اندیس پتانسیل وابسته به زمان، در تصویر شرودینگر است. خواننده احتمالاً می تواند ارتباط بین تصویر شرودینگر و تصویر هایزنبرگ را به یاد بیاورد:

$$| \alpha \rangle_H = e^{+iHt/\hbar} | \alpha, t_0 = 0; t \rangle_S \quad (8-5-5)$$

$$A_H = e^{iHt/\hbar} A_S e^{-iHt/\hbar} \quad (9-5-5)$$

اختلاف اصلی بین (8-5-5) و (9-5-5) از یک طرف و (6-5-5) و (7-5-5) از طرف دیگر این است که در تابع نهایی به جای H, H_0 ظاهر می شود.

اکنون به استخراج معادله ی دیفرانسیل بنیادی که تحول زمانی کت پایه را در تصویر برهم کنش بیان می کند می پردازیم. حال اجازه دهید از (5-5-5) نسبت به زمان مشتق بگیریم و H را برابر با (1-5-5) قرار دهیم.

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \alpha, t_0; t \rangle_I &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (e^{iH_0t/\hbar} | \alpha, t_0; t \rangle_S) \\ &= -H_0 e^{iH_0t/\hbar} | \alpha, t_0; t \rangle_S + e^{iH_0t/\hbar} (H_0 + V) | \alpha, t_0; t \rangle_S \\ &= e^{iH_0t/\hbar} V e^{-iH_0t/\hbar} e^{iH_0t/\hbar} | \alpha, t_0; t \rangle_S \end{aligned} \quad (10-5-5)$$

بنابراین می بینیم که:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \alpha, t_0; t \rangle_I = V_I | \alpha, t_0; t \rangle_I \quad (11-5-5)$$

این معادله شبیه معادله ی شرودینگر است فقط به جای H, V_I قرار گرفته است. به عبارت دیگر $| \alpha, t_0; t \rangle_I$ در غیاب V_I یک کت ثابت است. همچنین می توانیم نشان دهیم که برای مشاهده پذیر A (که در تصویر شرودینگر به طور صریح شامل زمان t نیست):

$$\frac{dA_I}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [A_I, H_0] \quad (12-5-5)$$

که معادله ی شبیه به معادله شرودینگر است فقط به جای H, H_0 قرار گرفته است.

در بسیاری از جاها، تصویر برهم کنش، یا تصویر دیراک بین تصویر شرودینگر و تصویر هایزنبرگ قرار می‌گیرد. این مسأله در جدول ۵-۲ نمایان است.

جدول ۵-۲

تصویر شرودینگر	تصویر برهم کنش	تصویر هایزنبرگ	
تعیین تحول با H	تعیین تحول با V_I	بدون تغییر	کت حالت
بدون تغییر	تعیین تحول با H_0	تعیین تحول با H	مشاهده پذیر

در تصویر برهم کنش از $|n\rangle$ به عنوان کت‌های پایه استفاده می‌کنیم. بنابراین $I|n\rangle$ را به شکل زیر بسط می‌دهیم:

$$|\alpha, t_0; t\rangle_I = \sum_n c_n(t) |n\rangle \quad (۱۳-۵-۵)$$

اگر t_0 را برابر با صفر بگیریم، می‌بینیم که $c_n(t)$ شبیه به همان $c_n(t)$ می‌شود که پیش‌تر در (۴-۵-۵) دیدیم. با ضرب دو طرف (۴-۵-۵) در $e^{iH_0 t/\hbar}$ و استفاده از (۲-۵-۵) به سادگی می‌توان این مطلب را ثابت کرد.

سرانجام در موقعیتی هستیم که می‌توانیم معادله‌ی دیفرانسیل $c_n(t)$ بنویسیم. دو طرف (۱۱-۵-۵) را از سمت چپ در $|n\rangle$ ضرب می‌کنیم و به دست می‌آوریم:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle n|\alpha, t_0; t\rangle_I = \sum_m \langle n|V_I|m\rangle \langle m|\alpha, t_0; t\rangle_I \quad (۱۴-۵-۵)$$

می‌توانستیم با استفاده از روابط زیر هم این معادله را بنویسیم:

$$\langle n|e^{iH_0 t/\hbar} V(t) e^{-iH_0 t/\hbar} |m\rangle = V_{nm}(t) e^{i(E_n - E_m)t/\hbar}$$

و

$$c_n(t) = \langle n|\alpha, t_0; t\rangle_I$$

[از (۱۳-۵-۵) داریم:

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) = \sum_m V_{nm} e^{i\omega_{nm}t} c_m(t) \quad (۱۵-۵-۵)$$

که در آن:

$$\omega_{nm} \equiv \frac{(E_n - E_m)}{\hbar} = -\omega_{mn} \quad (۱۶-۵-۵)$$

صریحاً داریم:

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}_1 \\ \dot{c}_2 \\ \dot{c}_3 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12}e^{i\omega_{12}t} & \dots \\ V_{21}e^{i\omega_{21}t} & V_{22} & \dots \\ & & V_{33} & \dots \\ \vdots & \vdots & & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (۱۷-۵-۵)$$

این معادله‌ی دیفرانسیل جفت شده‌ی اساسی است که برای به دست آوردن احتمال یافتن $|n\rangle$ به ازای تابعی از t باید حل شود.

مسئله‌های دو حالتی وابسته به زمان: تشدید مغناطیسی هسته‌ای، میزرها و نظایر آن

مسائلی که پتانسیل‌های وابسته به زمان داشته باشند و دارای حل دقیق نیز باشند، نسبتاً کمیاب هستند. در بیشتر موارد برای حل معادله‌ی دیفرانسیل جفت شده‌ی (۱۷-۵-۵) باید به بسط اختلالی متوسل شویم. این فرآیند را در بخش بعد مورد بررسی قرار خواهیم داد. با این حال مسأله‌ای وجود دارد که کاربرد عملی وسیعی دارد و به طور دقیق قابل حل است. این مسأله، مسأله‌ی دو حالتی با پتانسیل نوسانی سینوسی است.

مسأله با اطلاعات زیر تعریف می‌شود:

$$H_0 = E_1|1\rangle\langle 1| + E_2|2\rangle\langle 2| \quad (E_2 > E_1)$$

$$V(t) = \gamma e^{i\omega t}|1\rangle\langle 2| + \gamma e^{-i\omega t}|2\rangle\langle 1| \quad (۱۸-۵-۵)$$

که در آن γ و ω حقیقی و مثبت هستند. به زبان (۱۴-۵-۵) و (۱۵-۵-۵) داریم:

$$V_{12} = V_{21}^* = \gamma e^{i\omega t}$$

$$V_{11} = V_{22} = 0$$

(۱۹-۵-۵)

بنابراین یک پتانسیل وابسته به زمان داریم که دو ویژه حالت انرژی H_0 را بهم متصل می‌کند. به عبارت دیگر می‌توانیم یک گذار بین دو حالت داشته باشیم $|2\rangle \rightleftharpoons |1\rangle$.

حل صریح این مسأله قابل دست‌یابی است. اگر در آغاز (در $t = 0$) فقط تراز پایین اشغال شده

باشد، آنگاه [۳-۵-۵] را ببینید:

$$c_1(0) = 1, \quad c_2(0) = 0 \quad (۲۰-۵-۵)$$

به این ترتیب احتمال یافتن در هر کدام از دو حالت برابر است با (فرمول رابی، این فرمول بعد از کار آی.آی رابی، که او را پدر تکنیک‌های پرتوی مولکولی می‌نامند، به نام وی معروف شد):

$$|c_2(t)|^2 = \frac{\gamma^2/\hbar^2}{\gamma^2/\hbar^2 + (\omega - \omega_{21})^2/4} \sin^2 \left\{ \left[\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{(\omega - \omega_{21})^2}{4} \right]^{1/2} t \right\} \quad (۵-۲۱-الف)$$

$$|c_1(t)|^2 = 1 - |c_2(t)|^2 \quad (۵-۲۱-ب)$$

که در آن:

$$\omega_{21} \equiv \frac{(E_2 - E_1)}{\hbar} \quad (۵-۲۲)$$

خواننده می‌تواند در مسأله‌ی ۳۰ همین فصل به اثبات این فرمول پردازد.

اکنون بگذارید تا کمی دقیق‌تر به $|c_2|^2$ نگاه کنیم. می‌بینیم که احتمال یافتن سیستم در حالت بالایی، رفتار وابسته به زمان نوسانی با فرکانس زاویه‌ای زیر دارد.

$$\Omega = \sqrt{\left(\frac{\gamma^2}{\hbar^2} \right) + \frac{(\omega - \omega_{21})^2}{4}} \quad (۵-۲۳)$$

وقتی که:

$$\omega \approx \omega_{21} = \frac{(E_2 - E_1)}{\hbar} \quad (۵-۲۴)$$

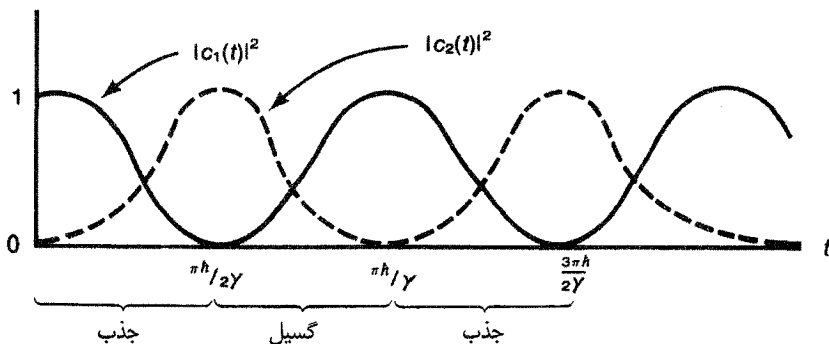
باشد، دامنه‌ی نوسان بسیار بزرگ می‌گردد. یعنی وقتی که فرکانس زاویه‌ای پتانسیل (که معمولاً ناشی از یک میدان اعمال شده‌ی الکتریکی با مغناطیس خارجی است) نزدیک به فرکانس زاویه‌ای مشخصه‌ی سیستم دو تراز می‌باشد، این بزرگی دامنه رخ می‌دهد. معادله‌ی (۵-۲۴) به شرط تشدید معروف است.

آموخته است که به (۵-۲۱-الف) و (۵-۲۱-ب) در حالت تشدید:

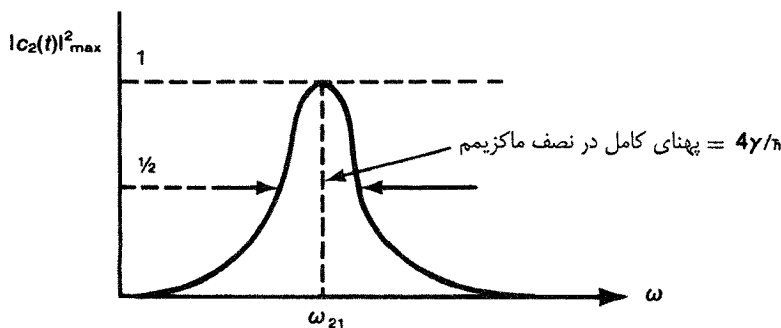
$$\omega = \omega_{21}, \quad \Omega = \frac{\gamma}{\hbar} \quad (۵-۲۵)$$

کمی دقیق‌تر بنگریم. می‌توانیم $|c_1(t)|^2$ و $|c_2(t)|^2$ را به شکل توابعی از t رسم کنیم، شکل ۵-۴ را ببینید. از $t = 0$ تا $t = \pi\hbar/2\gamma$ سیستم دوترازی، انرژی را از پتانسیل وابسته به زمان $V(t)$ جذب می‌کند، در این حالت $|c_1(t)|^2$ از یک کمتر می‌شود و در عوض $|c_2(t)|^2$ رشد می‌کند. در $t = \pi\hbar/2\gamma$ تنها تراز بالا اشغال شده است. از $t = \pi\hbar/2\gamma$ تا $t = \pi\hbar/\gamma$ ، سیستم انرژی اضافی خود را [از حالت برانگیخته (بالایی)] به $V(t)$ می‌دهد. $|c_2|^2$ کاهش و $|c_1|^2$ افزایش می‌یابند. این چرخه‌ی جذب و گسیل انرژی برای مدت

نامحدودی همان‌طور که در شکل ۴-۵ نشان داده شده است، ادامه می‌یابد. بنابراین $V(t)$ می‌تواند به منزله‌ی یک چشمه یا چاه انرژی به حساب آید. به عبارت دیگر $V(t)$ می‌تواند باعث گذار از $|1\rangle$ به $|2\rangle$ (جذب) یا از $|2\rangle$ به $|1\rangle$ (گسیل) گردد. هنگامی که راجع به گسیل و جذب تابش صحبت کنیم، به این نقطه نظر باز خواهیم گشت.



شکل ۴-۵: نمودار $|c_2|^2$ و $|c_1|^2$ نسبت به زمان، در شرایط تشدید: $\Omega = \frac{\gamma}{\hbar}$, $\omega = \omega_{21}$



شکل ۵-۵: نمودار $|c_2(t)|^2_{max}$ به‌عنوان تابعی از ω . در این نمودار $\omega = \omega_{21}$ نمایان‌گر شرط تشدید است.

حتی دور از نقطه‌ی تشدید هم چرخه‌ی جذب و گسیل رخ می‌دهد. اما دامنه‌ی نوسان $|2\rangle$ کاهش می‌یابد. $|c_2(t)|^2_{max}$ دیگر 1 نیست و $|c_1(t)|^2$ تا 0 کم نمی‌شود. در شکل ۵-۵، $|c_2(t)|^2_{max}$ را به شکل تابعی از ω رسم کرده‌ایم. این منحنی دارای یک قله‌ی تشدید حول $\omega = \omega_{21}$ است و پهنای آن در نیمه‌ی ماکسیمم $4\gamma/\hbar$ است. توجه به این نکته حائز اهمیت است که پتانسیل‌هایی که وابستگی کمتری به زمان دارند (γ کوچک) قله‌ی تشدید باریک‌تری خواهند داشت.

تشدید مغناطیسی اسپین

مسأله‌ی دو-حالتی که با (۵-۱۸-۵) تعریف شد، کاربردهای فیزیکی زیادی دارد. به‌عنوان اولین نمونه، سیستمی با اسپین $\frac{1}{2}$ (مثلاً یک الکترون مقید) را در نظر می‌گیریم که در یک میدان مغناطیسی یکنواخت مستقل از زمان در راستای z به‌علاوه‌ی یک میدان مغناطیسی وابسته به زمان که در صفحه‌ی xy می‌چرخد.

$$\mathbf{B} = B_0 \hat{z} + B_1 (\hat{x} \cos \omega t + \hat{y} \sin \omega t) \quad (۵-۲۶)$$

قرار گرفته است. در این رابطه B_0 و B_1 ثابت هستند. می‌توانیم اثر یکنواخت مستقل از زمان را به‌عنوان H_0 و اثر میدان چرخان را به‌عنوان V در نظر بگیریم. برای

$$\mu = \frac{e}{m_e c} \mathbf{S} \quad (۵-۲۷)$$

داریم:

$$H_0 = - \left(\frac{e \hbar B_0}{2 m_e c} \right) (|+\rangle\langle +| - |- \rangle\langle -|)$$

$$V(t) = - \left(\frac{e \hbar B_1}{2 m_e c} \right) [\cos \omega t (|+\rangle\langle -| + |- \rangle\langle +|) + \sin \omega t (-|+\rangle\langle -| + |- \rangle\langle +|)] \quad (۵-۲۸)$$

که در آن از شکل‌های کت- برای $2S_j / \hbar$ استفاده کرده‌ایم [۳-۱-۲] را ببینید. در شرایطی که $e < 0$ باشد، E_+ انرژی بیشتری نسبت به E_- دارد و می‌توانیم معادل‌سازی زیر را انجام دهیم:

$$|+\rangle \rightarrow |2\rangle \quad (\text{تراز بالا})$$

$$|- \rangle \rightarrow |1\rangle \quad (\text{تراز پایین}) \quad (۵-۲۹)$$

این کار را برای توافق با نمادگذاری (۵-۱۸-۵) انجام می‌دهیم. فرکانس زاویه‌ای مشخصه‌ی سیستم دوترازی عبارت است از:

$$\omega_{21} = \frac{|e| B_0}{m_e c} \quad (۵-۳۰)$$

که به‌ازای $B_0 \neq 0$ و $B_1 \neq 0$ ، همان فرکانس حرکت تقدیمی اسپین است، که قبلاً در بخش ۲-۱ مورد رسیدگی قرار گرفت. حتی با وجود این که مقدار انتظاری $\langle S_{x,y} \rangle$ به‌علت حرکت تقدیمی اسپین در خلاف جهت ساعت (وقتی از جهت مثبت محور z نگاه می‌کنیم) تغییر می‌نماید، در غیاب میدان چرخنده، $|c_+(t)|^2$ و $|c_-(t)|^2$ بدون تغییر باقی می‌مانند. اکنون یک مسأله‌ی جدید به‌عنوان نتیجه‌ی میدان چرخنده

رخ می‌نماید: $|c_+(t)|^2$ و $|c_-(t)|^2$ به شکل تابعی از زمان تغییر می‌کند. می‌توان با معادل‌سازی زیر این مطلب را دید:

$$\frac{-e\hbar B_1}{2m_e c} \rightarrow \gamma, \quad \omega \rightarrow \omega \quad (31-5-5)$$

این کار را برای توافق با نمادگذاری (۱۸-۵-۵) انجام می‌دهیم. برهم‌کنش وابسته به زمان (۲۸-۵-۵) دقیقاً به شکل (۱۸-۵-۵) است. این واقعیت که $|c_+(t)|^2$ و $|c_-(t)|^2$ نحوی که در شکل ۴-۵ نشان داده شده تغییر می‌کنند، موجب می‌شود که سیستم اسپین $\frac{1}{2}$ ، علاوه بر حرکت تقدیمی اسپین یک و وارونگی اسپینی متوالی $|\downarrow\rangle \leftrightarrow |\uparrow\rangle$ نیز کسب کند. از نظر نیمه کلاسیکی این وارونگی اسپین را می‌توان ناشی از گشتاور اعمال شده از میدان چرخان دانست.

شرط تشدید وقتی برقرار می‌شود که فرکانس میدان مغناطیسی چرخان با فرکانس حرکت تقدیمی اسپین که با قدرت میدان مغناطیسی یکنواخت تعیین می‌شود برابر باشد. می‌بینیم که احتمال وارونگی اسپین بزرگ است. در عمل ممکن است تولید یک میدان مغناطیسی چرخان در آزمایشگاه مشکل باشد. خوشبختانه یک میدان نوسان کننده‌ی افقی - مثلاً در راستای x - نیز به اندازه‌ی کافی خوب است. برای دیدن این مطلب ابتدا دقت می‌کنیم که یک چنین میدان نوسانی باید به یک مؤلفه‌ی پادساعتگرد و یک مؤلفه‌ی ساعتگرد به شکل زیر تجزیه گردد:

$$2B_1\hat{x}\cos\omega t = B_1(\hat{x}\cos\omega t + \hat{y}\sin\omega t) + B_1(\hat{x}\cos\omega t - \hat{y}\sin\omega t) \quad (32-5-5)$$

به سادگی با معکوس کردن علامت ω می‌توانیم تأثیر مؤلفه‌ی پاد ساعتگرد را به دست آوریم. فرض کنید که شرط تشدید برای مؤلفه‌ی پادساعتگرد در:

$$\omega = \omega_{21} \quad (33-5-5)$$

حاصل می‌گردد. تحت شرایط ویژه‌ی آزمایشگاهی:

$$\frac{B_1}{B_0} \ll 1 \quad (34-5-5)$$

که با استفاده از (۳۰-۵-۵) و (۳۱-۵-۵) نتیجه می‌دهد:

$$\frac{\gamma}{\hbar} \ll \omega_{21} \quad (35-5-5)$$

به‌عنوان یک نتیجه هر گاه که شرط تشدید برای مؤلفه‌ی پادساعتگرد برقرار باشد، اثر مؤلفه‌ی ساعتگرد کاملاً قابل صرف نظر می‌شود. چون این مسأله معادل است با $\omega \rightarrow -\omega$ به‌ازای سرعت زیاد نوسان بزرگی دامنه کوچک می‌گردد.

مسأله‌ی تشدید که در اینجا حل کردیم اهمیت بنیادینی در تفسیر آزمایش‌های پرتوی اتمی مولکولی و تشدید مغناطیسی هسته‌ای دارد. با تغییر فرکانس میدان نوسانی، می‌توانیم گشتاور مغناطیسی را با دقت زیادی به‌دست آوریم. ما بنیان بحث خود را بر حل معادله‌ی دیفرانسیل (۵-۵-۱۷) قرار داده‌ایم. این مسأله را می‌توان با ظرافت بیشتر و با معرفی نمایش محورهای چرخان رابی- شرودینگر و وان ولک، حل کرد.

میزر

به‌عنوان کاربرد دیگری از مسأله‌ی دوحالتی وابسته به زمان، اجازه دهید تا میزرها را مورد بررسی قرار دهیم. به‌طور خاص مولکول آمونیاک NH_3 را در نظر می‌گیریم که (همان‌طور که در بخش ۴-۲ اشاره کردیم) دو ویژه تابع پاریته‌ی $|S\rangle$ و $|A\rangle$ در نزدیکی هم دارد. به‌طوری که $|A\rangle$ کمی بالاتر قرار می‌گیرد. μ_{el} را عملگر دو قطبی الکتریکی مولکول در نظر می‌گیریم. با توجه به ملاحظات پاریته انتظار داریم که μ_{el} متناسب با x یعنی عملگر مکان اتم N باشد. برهم کنش اصلی به‌شکل $\mu_{el} \cdot \mathbf{E}$ است که برای یک میزرها، \mathbf{E} میدان الکتریکی وابسته به زمان در کاواک میکروموج است.

$$\mathbf{E} = |\mathbf{E}|_{\max} \hat{z} \cos \omega t \quad (۵-۵-۳۶)$$

منطقی است که تغییرات فضایی \mathbf{E} را نادیده بگیریم چون طول موج در محدوده‌ی میکروموج بسیار بزرگ‌تر از ابعاد مولکولی است. فرکانس ω با اختلاف انرژی بین $|A\rangle$ و $|S\rangle$ تنظیم می‌شود:

$$\omega \simeq \frac{(E_A - E_S)}{\hbar} \quad (۵-۵-۳۷)$$

بنابر پاریته، آرایه‌های غیرقطری صفر هستند:

$$\langle A | \mu_{el} | A \rangle = \langle S | \mu_{el} | S \rangle = 0 \quad (۵-۵-۳۸)$$

$$\langle S | x | A \rangle = \langle A | x | S \rangle \neq 0 \quad (۵-۵-۳۹)$$

به این معنی که یک پتانسیل وابسته به زمان وجود دارد که $|S\rangle$ و $|A\rangle$ به هم متصل می‌کند و مسأله‌ی دوحالتی کلی که پیش‌تر مورد بحث قرار گرفت در این‌جا کاربرد می‌یابد.

اکنون در موقعیتی هستیم که می‌توانیم در مورد چگونگی کار میزر بحث کنیم. پرتوی مولکولی NH_3 را که شامل $\langle S \rangle$ و $\langle A \rangle$ است در نظر می‌گیریم. ابتدا مؤلفه‌ی $\langle S \rangle$ را با عبور پرتو از یک میدان الکتریکی غیریکنواخت مستقل از زمان حذف می‌کنیم. یک چنین میدان الکتریکی می‌تواند $\langle S \rangle$ را از $\langle A \rangle$ جدا کند همان‌طور که در آزمایش اشترن گراخ، میدان غیریکنواخت $\langle + \rangle$ را از $\langle - \rangle$ جدا می‌کرد. آنگاه یک پرتوی خالص به درون کاواک میکرو موجی که با اختلاف انرژی $E_A - E_S$ میزان شده وارد می‌شود. ابعاد کاواک طوری است که زمان سپری شده توسط مولکول در آن $(\pi/2)\hbar/\gamma$ باشد. در نتیجه در اولین فاز حذف شکل ۴-۵ قرار می‌گیریم، در این جا $\langle A \rangle$ وارد می‌شود و $\langle S \rangle$ خارج می‌گردد. انرژی اضافی $\langle A \rangle$ به پتانسیل وابسته به زمان داده می‌شود تا $\langle A \rangle$ و $\langle S \rangle$ با هم برابر گردند و میدان تابشی (میکرو موج) انرژی دریافت کند. در این فرآیند با تحریک کردن گسیل تابش یا میزر میکرو موج تقویت شده به دست می‌آوریم.

کاربردهای زیاد دیگری برای مسأله‌ی دو حالتی وابسته به زمان کلی وجود دارد. نظیر ساعت اتمی و پمپاژ نوری. در واقع جالب است بدانید که تعداد بسیار زیادی از جوایز نوبل در فیزیک به‌نوعی برای پرداختن به سیستم‌های دو حالتی وابسته به زمان اهدا شده است.*

۶.۵ نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان

سری دایسون

به غیر از تعداد کمی از مسائل، نظیر مسأله‌ی دو حالتی وابسته به زمان در فصل قبل، بیشتر مسائل حل دقیقی برای معادله‌ی دیفرانسیل ندارد و $c_n(t)$ برای آن‌ها در دسترس نیست. به این خاطر باید به جواب‌های تقریبی (۵-۵-۱۷) که از بسط اختلالی به دست می‌آید قانع گردیم:

$$c_n(t) = c_n^{(0)} + c_n^{(1)} + c_n^{(2)} + \dots \quad (۵-۶-۱)$$

که در آن $c_n^{(1)}, c_n^{(2)}, \dots$ دامنه‌های مرتبه اول، مرتبه دوم و ... از پارامتر قدرت پتانسیل وابسته به زمان هستند. شبیه به نظریه‌ی اختلال مستقل از زمان از روش تکرار برای حل این مسئله استفاده می‌کنیم. اگر در ابتدا فقط تراز i ام اشغال شده باشد، با استفاده از $\delta_{ni} = c_n^{(0)}$ (مستقل از t) $c_n(t)$ را در سمت راست معادله‌ی (۵-۵-۱۷) را تخمین می‌زنیم و آن را به مشتق زمانی $c_n^{(1)}$ مرتبط می‌سازیم. برای به دست آوردن $c_n^{(1)}$ از

* کسانی که برای پرداختن به تشدید سیستم‌های دو حالتی جایزه‌ی نوبل دریافت کرده‌اند عبارتند از: رابی (۱۹۴۴) در پرتوهای مولکولی و تشدید مغناطیسی هسته‌ای، بلاخ و پرسل (۱۹۵۲) میدان \mathbf{B} در هسته‌ی اتمی و گشتاور مغناطیسی هسته‌ای، تونس، باسو و پروکروف (۱۹۶۴) به خاطر میزرها، لیزرها و اپتیک کوانتومی و کلاستر (۱۹۶۶) به خاطر پمپاژ اپتیکی.

معادله‌ی دیفرانسیل انتگرال می‌گیریم و مجدداً برای به‌دست آوردن $c_n^{(1)}$ ، $c_n^{(2)}$ را در سمت راست معادله‌ی (۵-۱۷) وارد می‌کنیم و به‌همین ترتیب کار را ادامه می‌دهیم. این روشی بود که دیراک در سال ۱۹۲۷ به‌وسیله‌ی آن نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان را گسترش داد.

به‌جای کار کردن با $c_n(t)$ می‌خواهیم عملگر تحول زمانی $U_I(t, t_0)$ را در تصویر برهم‌کنش مورد توجه قرار دهیم که بعداً آن را تعریف خواهیم کرد. بسط اختلالی $U_I(t, t_0)$ را به‌دست می‌آوریم و در نهایت آرایه‌های ماتریسی U_I را به $c_n(t)$ مرتبط می‌سازیم. اگر بخواهیم فقط به حل مسائل ساده در مکانیک کوانتومی غیرنسبیتی پردازیم، ممکن است این کاری اضافی به‌نظر برسد. با این حال فرمول‌بندی عملگری که در این جا ارائه می‌دهیم، بسیار قوی است چون این روش را می‌توان بلادرنگ برای مسائل پیشرفته نظیر نظریه میدان کوانتومی نسبیتی و نظریه‌ی بس ذره‌ای به‌کار برد.

عملگر تحول زمانی در تصویر برهم‌کنش با رابطه‌ی زیر تعریف می‌شود:

$$|\alpha, t_0; t\rangle_I = U_I(t, t_0)|\alpha, t_0; t_0\rangle_I \quad (۲-۶-۵)$$

معادله‌ی دیفرانسیل (۵-۱۱) برای کت حالت تصویر برهم‌کنش معادل است با:

$$i\hbar \frac{d}{dt} U_I(t, t_0) = V_I(t) U_I(t, t_0) \quad (۳-۶-۵)$$

این معادله دیفرانسیل به‌همراه شرط اولیه با معادله‌ی انتگرالی زیر برابر است:

$$U_I(t, t_0)|_{t=t_0} = 1 \quad (۴-۶-۵)$$

$$U_I(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') U_I(t', t_0) dt' \quad (۵-۶-۵)$$

با تکرار کردن می‌توانیم یک حل تقریبی برای این معادله به‌دست آوریم:

$$\begin{aligned} U_I(t, t_0) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') \left[1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t'} V_I(t'') U_I(t'', t_0) dt'' \right] dt' \\ &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' V_I(t') + \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' V_I(t') V_I(t'') \\ &\quad + \dots + \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \dots \\ &\quad \times \int_{t_0}^{t^{(n-1)}} dt^{(n)} V_I(t') V_I(t'') \dots V_I(t^{(n)}) \\ &\quad + \dots \end{aligned} \quad (۶-۶-۵)$$

پس از آن که فریمن-جی-دایسون این روش را در الکترودینامیک کوانتومی (QED) به کار برد، این سری به سری دایسون معروف شد.* با کنار گذاشتن مشکل همگرایی می‌توانیم $U_I(t, t_0)$ را تا هر مرتبه‌ی غیربی نهایت از نظریه‌ی اختلال محاسبه کنیم.

احتمال گذار

با داشتن $U_I(t, t_0)$ می‌توانیم گسترش زمانی را برای هر کت حالتی پیش‌بینی کنیم. برای مثال اگر حالت اولیه‌ی در $t=0$ یکی از ویژه حالت‌های H_0 باشد آنگاه با ضرب $U_I(t, t_0)$ در کت اولیه می‌توانیم کت اولیه را در زمان‌های بعدی به دست آوریم:

$$\begin{aligned} |i, t_0 = 0; t\rangle_I &= U_I(t, 0)|i\rangle \\ &= \sum_n |n\rangle \langle n|U_I(t, 0)|i\rangle \end{aligned} \quad (۷-۶-۵)$$

در واقع $\langle n|U_I(t, 0)|i\rangle$ چیزی غیر از c_n قبلی ما نیست [۵-۵-۱۳] را ببینید. در مورد این بعداً بیشتر صحبت می‌کنیم.

پیش‌تر عملگر تحول زمانی $U_I(t, t_0)$ را در تصویر شرودینگر معرفی کرده‌ایم (بخش ۲-۲ را ببینید). حال اجازه دهید تا ارتباطی بین $U(t, t_0)$ و $U_I(t, t_0)$ برقرار سازیم. با توجه به (۲-۲-۱۳) و (۵-۵-۵) می‌بینیم که:

$$\begin{aligned} |\alpha, t_0; t\rangle_I &= e^{iH_0t/\hbar} |\alpha, t_0; t\rangle_S \\ &= e^{iH_0t/\hbar} U(t, t_0) |\alpha, t_0; t_0\rangle_S \\ &= e^{iH_0t/\hbar} U(t, t_0) e^{-iH_0t_0/\hbar} |\alpha, t_0; t_0\rangle_I \end{aligned} \quad (۸-۶-۵)$$

بنابراین داریم:

$$U_I(t, t_0) = e^{iH_0t/\hbar} U(t, t_0) e^{-iH_0t_0/\hbar} \quad (۹-۶-۵)$$

حال بگذارید به آرایه‌ی ماتریسی $U_I(t, t_0)$ بین ویژه حالت‌های انرژی H_0 بنگریم:

$$\langle n|U_I(t, t_0)|i\rangle = e^{t(E_n - E_i)/\hbar} \langle n|U(t, t_0)|i\rangle \quad (۱۰-۶-۵)$$

یادآوری می‌کنیم که در بخش ۲-۲، $\langle n|U(t, t_0)|i\rangle$ به‌عنوان دامنه‌ی گذار تعریف شده بود. بنابراین $\langle n|U(t, t_0)|i\rangle$ در این جا دقیقاً نظیر دامنه‌ی گذاری که پیش‌تر تعریف کرده بودیم نیست. اما احتمال گذار

* دقت کنید که در QED ضرب ترتیب زمانی ($t' > t'' > \dots$) معرفی می‌شود و پس از آن سری اختلالی به یک شکل نمایی جمع می‌شود. این شکل نمایی سریعاً می‌دهد: $U(t, t_0) = U(t, t_1)U(t_1, t_0)$ (بجورکن و دریل ۱۹۶۵، صفحه‌ی ۱۷۸-۱۷۵)

که با مربع کردن $\langle n|U(t, t_0)|i \rangle$ به دست می‌آید دقیقاً شبیه به کمیت مشابه در تصویر برهم کنش است:

$$|\langle n|U_I(t, t_0)|i \rangle|^2 = |\langle n|U(t, t_0)|i \rangle|^2 \quad (۱۱-۶-۵)$$

یادآوری می‌کنیم که اگر آرایه‌های ماتریسی U_I بین حالت‌های ابتدایی و انتهایی که ویژه‌کتهای انرژی نیستند (برای مثال بین $|a' \rangle$ و $|b' \rangle$ که به ترتیب ویژه‌کتهای A و B هستند و داریم $[H_0, A] \neq 0$ یا $[H_0, B] \neq 0$) قرار بگیرند در حالت کلی داریم:

$$|\langle b'|U_I(t, t_0)|a' \rangle| \neq |\langle b'|U(t, t_0)|a' \rangle|$$

که خواننده به سادگی می‌تواند آن را اثبات کند. خوشبختانه در مسائلی که آنها در تصویر برهم کنش به کار می‌رود به طور معمول حالت‌های ابتدایی و انتهایی ویژه حالت‌های H_0 هستند. در غیر این صورت ناچاریم که $|a' \rangle$ و $|b' \rangle$ را برحسب ویژه‌کتهای انرژی H_0 بسط دهیم.

به $\langle n|U_I(t, t_0)|i \rangle$ بازمی‌گردیم. وضعیت فیزیکی را در نظر می‌گیریم که در آن سیستم در $t = t_0$ در حالت $|i \rangle$ قرار دارد. بنابراین کت حالت در تصویر شرودینگر $|i, t_0; t \rangle_S$ صرف نظر از یک عامل فاز برابر با $|i \rangle$ است. در تصویر برهم کنش به طور قراردادی عامل فاز در $|i \rangle$ را به صورت زیر انتخاب می‌کنیم:

$$|i, t_0; t \rangle_S = e^{-iE_i t_0 / \hbar} |i \rangle \quad (۱۲-۶-۵)$$

که به معنی این است که در تصویر برهم کنش معادله‌ی ساده‌ی زیر را داریم:

$$|i, t_0; t \rangle_I = |i \rangle \quad (۱۳-۶-۵)$$

در زمان بعدی داریم:

$$|i, t_0; t \rangle_I = U_I(t, t_0) |i \rangle \quad (۱۴-۶-۵)$$

با مقایسه این رابطه با بسط

$$|i, t_0; t \rangle_I = \sum_n c_n(t) |n \rangle \quad (۱۵-۶-۵)$$

می‌بینیم که

$$c_n(t) = \langle n|U_I(t, t_0)|i \rangle \quad (۱۶-۶-۵)$$

اکنون به بسط اختلالی برای $U_I(t, t_0)$ بازمی‌گردیم [(۶-۶-۵) را ببینید]. همچنین می‌توانیم $c_n(t)$ را به شکل (۱-۶-۵) بسط دهیم که در آن $c_n^{(1)}(t)$ مرتبه‌ی اول $V_I(t)$ ، $c_n^{(2)}(t)$ مرتبه‌ی دوم $V_I(t)$ و به همین صورت است. با مقایسه‌ی بسط دو سمت (۱۶-۶-۵) به دست می‌آوریم [(۷-۵-۵) استفاده کرده‌ایم]:

$$c_n^{(0)}(t) = \delta_{ni} \quad (\text{مستقل از } t)$$

$$c_n^{(1)}(t) = \frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle n | V_I(t') | i \rangle dt'$$

$$= \frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t e^{i\omega_{ni}t'} V_{ni}(t') dt'$$

$$c_n^{(2)}(t) = \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \sum_m \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' e^{i\omega_{nm}t'} V_{nm}(t') e^{i\omega_{mi}t''} V_{mi}(t'') \quad (۱۷-۶-۵)$$

که در آن از

$$e^{i(E_n - E_i)t/\hbar} = e^{i\omega_{ni}t} \quad (۱۸-۶-۵)$$

استفاده کرده‌ایم. احتمال گذار $|i\rangle \rightarrow |n\rangle$ وقتی که $n \neq i$ است از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید.

$$P(i \rightarrow n) = |c_n^{(1)}(t) + c_n^{(2)}(t) + \dots|^2 \quad (۱۹-۶-۵)$$

اختلال ثابت

به عنوان یک کاربرد از (۱۷-۶-۵)، بگذارید تا اختلال ثابتی که در $t = 0$ روشن شده باشد را در نظر

بگیریم:

$$V(t) = \begin{cases} 0, & \text{برای } t < 0 \\ V & \text{برای } t \geq 0. \end{cases} \quad (\text{مستقل از } t) \quad (۲۰-۶-۵)$$

حتی با وجود این که عملگر V بستگی صریح به زمان ندارد، این عملگر در حالت کلی نظیر \mathbf{x} و \mathbf{p} است.

اکنون فرض می‌کنیم که در $t = 0$ تنها $|i\rangle$ را داریم. با قرار دادن t_0 برابر صفر به دست می‌آوریم:

$$c_n^{(0)} = c_n^{(0)}(0) = \delta_{in},$$

$$c_n^{(1)} = \frac{-i}{\hbar} V_{ni} \int_0^t e^{i\omega_{ni}t'} dt'$$

$$= \frac{V_{ni}}{E_n - E_i} (1 - e^{i\omega_{ni}t}) \quad (۲۱-۶-۵)$$

یا

$$\begin{aligned} |c_n^{(1)}|^2 &= \frac{|V_{ni}|^2}{|E_n - E_i|^2} (2 - 2 \cos \omega_{ni}t) \\ &= \frac{4|V_{ni}|^2}{|E_n - E_i|^2} \sin^2 \left[\frac{(E_n - E_i)t}{2\hbar} \right] \end{aligned} \quad (۲۲-۶-۵)$$

احتمال یافتن $|n\rangle$ نه تنها به $|V_{nn}|^2$ بلکه به اختلاف انرژی $E \sim E_n$ نیز بستگی دارد. بنابراین بگذارید تا (۲۲-۶-۵) را به عنوان تابعی از E_n بنگریم. در عمل این نحوه‌ی نگرش به (۲۲-۶-۵) وقتی موردعلاقه است که حالت‌های زیادی با $E \sim E_n$ وجود داشته باشد و در نتیجه بتوانیم راجع به حالت‌های نهایی پیوسته‌ای که حول یک مقدار انرژی مشترک هستند صحبت کنیم. برای رسیدن به این منظور تعریف زیر را انجام می‌دهیم:

$$\omega \equiv \frac{E_n - E_l}{\hbar} \quad (23-6-5)$$

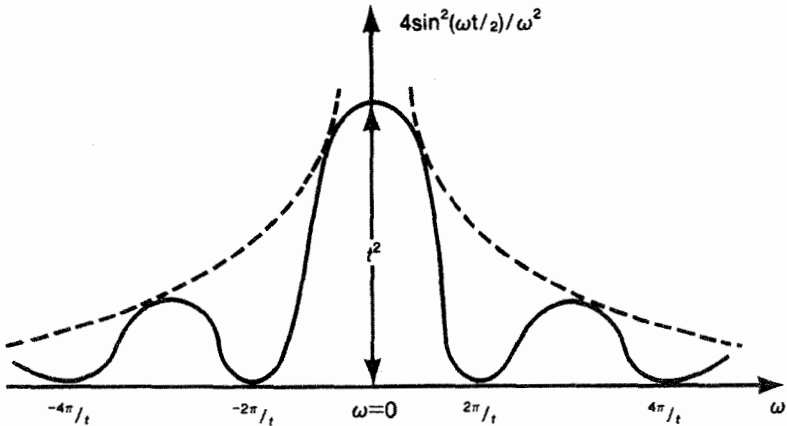
و $\omega^2 / 4 \sin^2(\omega t / 2)$ را به عنوان تابعی از ω در t ثابت رسم می‌کنیم. t همان بازه‌ی زمانی است که در طی آن اختلال روشن بوده است. شکل ۵-۶ را ببینید. در شکل می‌بینیم که قله‌ی میانی بیشترین ارتفاع را دارد و در $\omega = 0$ واقع شده است. این ارتفاع برابر با t^2 و عرض آن با $1/t$ متناسب است. به ازای t ‌های بزرگ، $|c_n^{(1)}(t)|^2$ به جز حالت‌های نهایی، در رابطه‌ی زیر صدق می‌کند.

$$t \sim \frac{2\pi}{|\omega|} = \frac{2\pi\hbar}{|E_n - E_l|} \quad (24-5-5)$$

اگر Δt را مدت زمانی بگیریم که در طی آن اختلال روشن بوده است، گذار با احتمال محتمل تنها وقتی ممکن است که:

$$\Delta t \Delta E \sim \hbar \quad (25-5-5)$$

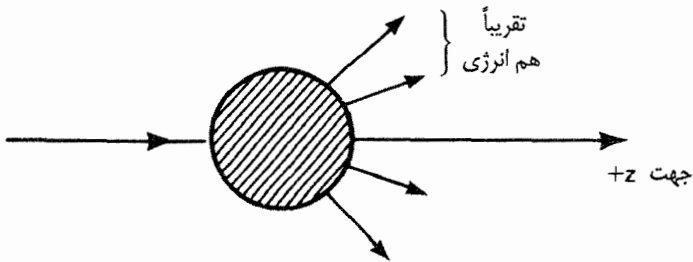
که در آن ΔE به معنی اختلاف انرژی، در گذاری محتمل است. اگر Δt کوچک باشد، در شکل ۵-۶ قله‌ی پهن‌تری خواهیم داشت و در نتیجه تا حد نسبتاً زیادی ناپایداری انرژی خواهیم داشت. از طرف دیگر، اگر اختلال برای مدت زیادی روشن باشد، یک قله‌ای باریک خواهیم داشت و انرژی لازم برای یک گذار محتمل تقریباً پایسته می‌ماند. توجه کنید که این رابطه‌ی عدم قطعیت به طور بنیادین با رابطه‌ی عدم قطعیت $x - p$ در بخش ۱-۶ متفاوت است. \mathbf{x} و \mathbf{p} هر دو مشاهده‌پذیر هستند، در مقابل زمان در مکانیک کوانتومی غیرنسبیتی یک پارامتر است نه یک مشاهده‌پذیر.



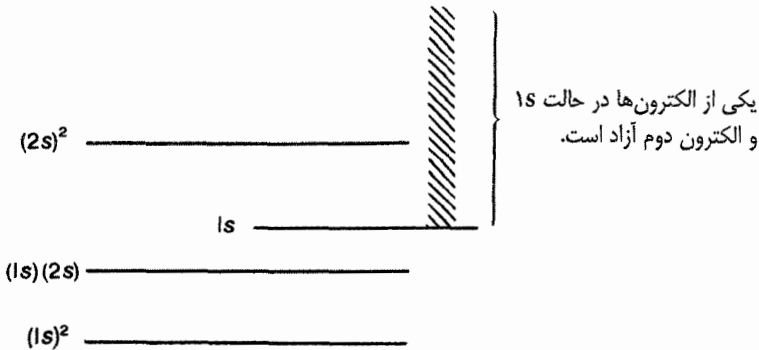
شکل ۵-۶: نمودار $4 \sin^2(\omega t/2)/\omega^2$ برحسب ω برای t ثابت. $E_n = (E_n - E_i)/\hbar$ به عنوان یک متغیر پیوسته در نظر گرفته می شود.

برای گذاری که انرژی پایسته‌ی دقیق آن $E_n = E_i$ است، داریم:

$$|c_n^{(1)}(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |V_{ni}|^2 t^2 \quad (۲۶-۶-۵)$$



شکل ۵-۷: پراکندگی کشسان یک موج تخت به وسیله‌ی یک پتانسیل محدود.



شکل ۵-۸: طرح‌واره‌ی ترازهای انرژی دو الکترون اتم هلیوم.

احتمال یافتن $|n\rangle$ در بازه‌ی زمانی t که در آن V روشن است، خطی نیست، بلکه مربعی است. ابتدا ممکن است این مسأله غیرمنطقی به نظر برسد. اما جای نگرانی وجود ندارد. در وضعیت‌های واقعی که در آن فرمول‌بندی ما قابل اعمال است، معمولاً یک گروه از حالت‌های نهایی وجود دارد. همه‌ی این حالت‌ها انرژی نزدیکی به انرژی ابتدایی $|i\rangle$ دارند. به عبارت دیگر حالت نهایی یک طیف انرژی پیوسته در همسایگی E_i تشکیل می‌دهد. در این جا به دو مثال می‌پردازیم. برای مثال پراکندگی کشسان با محدوده‌ی پتانسیل محدود را در نظر بگیرید. (شکل ۷-۵ را ببینید) این مثال را با جزییات در فصل ۷ خواهیم دید. حالت اولیه به شکل یک موج تخت است که جهت انتشار آن در راستای مثبت محور z است. حالت نهایی می‌تواند موج تختی با انرژی یکسان باشد، با این تفاوت که جهت انتشار در راستایی غیر از محور z شده است. مثال جالب دیگر باز برانگیختگی یک حالت اتمی برانگیخته به خاطر تابش یک الکترون اوژه است. ساده‌ترین مثال، اتم هلیم است. حالت ابتدایی می‌تواند $(2s)^2$ باشد، که هر دو الکترون آن برانگیخته‌اند و حالت نهایی می‌تواند $(1s)$ یون He^+ باشد. یکی از الکترون‌ها همچنان مقید است، در حالی که الکترون دیگر با یک انرژی مثبت E فرار کرده است. شکل ۸-۵ را ببینید. در چنین موردی علاقه‌مندیم که احتمال کل را بیابیم. یعنی احتمال گذاری که تمام حالت‌های نهایی با $E_n \approx E_i$ را در بر گرفته باشد:

$$\sum_{n, E_n \approx E_i} |c_n^{(1)}|^2 \quad (27-6-5)$$

مرسوم است که یک چگالی از حالت‌های نهایی برای حالت‌هایی که در بازه‌ی انرژی $(E, E + dE)$ قرار می‌گیرند، به شکل زیر تعریف می‌شود:

$$\rho(E) dE \quad (28-6-5)$$

آنگاه می‌توانیم (۲۷-۶-۵) را به شکل زیر بنویسیم:

$$\begin{aligned} \sum_{n, E_n \approx E_i} |c_n^{(1)}|^2 &\Rightarrow \int dE_n \rho(E_n) |c_n^{(1)}|^2 \\ &= 4 \int \sin^2 \left[\frac{(E_n - E_i)t}{2\hbar} \right] \frac{|V_m|^2}{|E_n - E_i|^2} \rho(E_n) dE_n \end{aligned} \quad (29-6-5)$$

به ازای $t \rightarrow \infty$ می‌توان از رابطه‌ی زیر سود برد:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{|E_n - E_i|^2} \sin^2 \left[\frac{(E_n - E_i)t}{2\hbar} \right] = \frac{\pi t}{2\hbar} \delta(E_n - E_i) \quad (30-6-5)$$

از رابطه‌ی

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \frac{\sin^2 \alpha x}{\alpha x^2} = \delta(x) \quad (۳۱-۶-۵)$$

به دست می‌آید. اکنون می‌توانیم متوسط $|V_{ni}|^2$ را از زیرانتگرال خارج کنیم و انتگرال گیری را روی تابع δ انجام دهیم:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int dE_n \rho(E_n) |c_n^{(1)}(t)|^2 = \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right) |V_{ni}|^2 \rho(E_n) t \Big|_{E_n = E_i} \quad (۳۲-۶-۵)$$

بنابراین برای مقادیر بزرگ t احتمال کل متناسب با t است که این کاملاً منطقی به نظر می‌رسد. توجه کنید که این وابستگی خطی به t نتیجه‌ی این واقعیت است که احتمال گذار کل متناسب با سطح زیر قله‌ی شکل ۶-۵ است که در آن ارتفاع با t^2 و عرض با $1/t$ تغییر می‌کنند.

مرسوم است که یک نوخ گذار (یعنی احتمال گذار در یک زمان واحد) را در نظر بگیریم. عبارت (۳۲-۶-۵) به ما می‌گوید که نرخ گذار کل با عبارت زیر تعریف می‌شود:

$$\frac{d}{dt} \left(\sum_n |c_n^{(1)}|^2 \right) \quad (۳۳-۶-۵)$$

که به ازای t های بزرگ نسبت به t ثابت است. اگر به (۳۳-۶-۵) $w_{i \rightarrow [n]}$ بگوییم، که در آن $[n]$ بیان کننده‌ی گروهی از حالت‌های نهایی با انرژی نزدیک به i است، به دست می‌آوریم:

$$w_{i \rightarrow [n]} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{ni}|^2 \rho(E_n)_{E_n = E_i} \quad (۳۴-۶-۵)$$

این عبارت مستقل از t است و بیان می‌کند که نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان مرتبه اول، معتبر است. این رابطه از نظر علمی اهمیت زیادی دارد و به **رابطه‌ی طلایی فومی** مشهور است. اگرچه اساس فرمول‌بندی نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان منتسب به دیراک است. گاهی اوقات (۳۴-۶-۵) را به شکل زیر می‌نویسند:

$$w_{i \rightarrow n} = \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right) |V_{ni}|^2 \delta(E_n - E_i) \quad (۳۵-۶-۵)$$

که در آن از $dE_n \rho(E_n)$ انتگرال گرفته شده است.

همچنین باید بدانیم که معنی $|V_{ni}|^2$ چیست. اگر حالت‌های نهایی $|n\rangle$ شبه پیوستار باشند و اگر $|n\rangle$ شبهه باشند، آرایه‌های ماتریسی V_{ni} نیز شبهه به هم هستند. با این حال ممکن است حالتی رخ دهد که در آن همه ویژه حالت‌های انرژی با E_n یکسان الزاماً آرایه‌های ماتریسی مشابه نداشته باشد. برای مثال پراکندگی الکترون را در نظر بگیرید. $|V_{ni}|^2$ که مشخص کننده‌ی سطح مقطع پراکندگی است، ممکن است به جهت

تکانه‌ی نهایی وابسته باشد. در چنین موردی گروه حالت‌های نهایی که باید مورد بررسی قرار گیرد نباید به‌طور تقریبی یک انرژی یکسان داشته باشد. اما تقریباً باید جهت تکانه‌ی یکسانی را اتخاذ کند. وقتی که در مورد اثر فوتوالکتریک بحث می‌کنیم. این مطلب روشن‌تر می‌شود.

حال بگذارید تا به جمله‌ی مرتبه دوم بنگریم. هنوز اختلال ثابت (۵-۶-۲۰) را داریم. از (۵-۶-۱۷) داریم:

$$\begin{aligned} c_n^{(2)} &= \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \sum_m V_{nm} V_{mi} \int_0^t dt' e^{i\omega_{nm}t'} \int_0^{t'} dt'' e^{i\omega_{mi}t''} \\ &= \frac{i}{\hbar} \sum_m \frac{V_{nm} V_{mi}}{E_m - E_i} \int_0^t (e^{i\omega_{ni}t'} - e^{i\omega_{nm}t'}) dt'. \end{aligned} \quad (۵-۶-۳۶)$$

اولین جمله در سمت راست، مثل $c_n^{(1)}$ به t بستگی دارد [۵-۶-۲۱] را ببینید. اگر این تنها جمله‌ی ما بود، مراحل مشابهی را با آن چه قبلاً انجام داده‌ایم، تکرار می‌کردیم و نتیجه می‌گرفتیم که به‌ازای $t \rightarrow \infty$ تنها سهم حائز اهمیت مربوط به $E_n = E_i$ بود. در واقع وقتی که E_m با E_n و E_i فرق دارد، دومین جمله موجب نوسانات شدید می‌گردد که هیچ سهمی در احتمال گذار که با t افزایش می‌یابد، ندارد.

با در نظر گرفتن توأم $c^{(1)}$ و $c^{(2)}$ داریم:

$$w_{i \rightarrow [n]} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| V_{ni} + \sum_m \frac{V_{nm} V_{mi}}{E_i - E_m} \right| \rho(E_n) \Big|_{E_n = E_i} \quad (۵-۶-۳۷)$$

تفسیر فیزیکی این فرمول در ادامه می‌آید. ما نشان دادیم که گذار ناشی از جمله‌ی مرتبه‌ی دوم در دو مرحله رخ می‌دهد. نخست $|i\rangle$ با تولید یک انرژی غیر پایستار به $|m\rangle$ می‌رود و در ادامه $|m\rangle$ با تولید یک انرژی ناپایستار به $|n\rangle$ می‌رود. که در بین $|n\rangle$ و $|i\rangle$ پایستگی انرژی کلی وجود دارد. چنین گذاری با انرژی ناپایستار غالباً گذار مجازی نام دارد. انرژی که برای گذارهای مجازی به (یا از) حالت‌های میانی مجازی لازم است، الزاماً یک پایستار را ارائه نمی‌دهد. اگر $V_{nm} V_{mi}$ با $E_m = E_i$ مخالف صفر باشد عملیات ویژه‌ای لازم است. بهترین راه برای رسیدن به این منظور استفاده از روش روشن کردن آهسته است که در آن $V \rightarrow e^{\eta t} V$ است. در مورد این مسأله در بخش ۵-۸ همچنین مسأله‌ی ۳۱ بحث می‌کنیم. مجموعه نتایج ما منجر می‌شود به این که انرژی مخرج در (۵-۶-۳۷) را به‌شکل زیر تغییر دهیم:

$$E_i - E_m \rightarrow E_i - E_m + i\varepsilon \quad (۵-۶-۳۸)$$

اختلال هماهنگ

اکنون پتانسیل وابسته به زمانی را در نظر می‌گیریم که به‌طور سینوسی تغییر می‌کند. اصطلاحاً به این گونه اختلال، اختلال هماهنگ گفته می‌شود.

$$V(t) = \mathcal{V} e^{i\omega t} + \mathcal{V}^\dagger e^{-i\omega t} \quad (۳۹-۶-۵)$$

که در آن می‌توان \mathcal{V} را وابسته به \mathbf{x} و \mathbf{p} و \mathbf{s} یا نظایر آن در نظر گرفت. در عمل قبلاً نیز با چنین پتانسیل وابسته به زمانی در بخش ۵-۵ و در بحث مسائل دو حالت و وابسته به زمان مواجه شده‌ایم.

دوباره فرض می‌کنیم که فقط یکی از ویژه حالت‌های H_0 در ابتدا اشغال شده است. فرض می‌کنیم که اختلال (۳۹-۶-۵) در $t = 0$ روشن شود، بنابراین:

$$\begin{aligned} c_n^{(1)} &= \frac{-i}{\hbar} \int_0^t (\mathcal{V}_{ni} e^{i\omega t'} + \mathcal{V}_{ni}^\dagger e^{-i\omega t'}) e^{i\omega_{ni} t'} dt' \\ &= \frac{1}{\hbar} \left[\frac{1 - e^{i(\omega + \omega_{ni})t}}{\omega + \omega_{ni}} \mathcal{V}_{ni} + \frac{1 - e^{i(\omega_{ni} - \omega)t}}{-\omega + \omega_{ni}} \mathcal{V}_{ni}^\dagger \right] \end{aligned} \quad (۴۰-۶-۵)$$

که در آن \mathcal{V}_{ni}^\dagger همان $(\mathcal{V}^\dagger)_{ni}$ است. می‌بینیم که این فرمول شبیه به مورد اختلال ثابت است. تنها تفاوتی که باید قائل شویم این است که:

$$\omega_{ni} = \frac{E_n - E_i}{\hbar} \rightarrow \omega_{ni} \pm \omega \quad (۴۱-۶-۵)$$

بنابراین به‌ازای $t \rightarrow \infty$ ، $|c_n^{(1)}|^2$ تنها وقتی مقدار قابل توجه دارد که:

$$\omega_{ni} + \omega \approx 0 \quad \text{or} \quad E_n \approx E_i - \hbar\omega \quad (الف) \quad (۴۲-۶-۵)$$

$$\omega_{ni} - \omega \approx 0 \quad \text{or} \quad E_n \approx E_i + \hbar\omega \quad (ب) \quad (۴۲-۶-۵)$$

از (۴۲-۶-۵ الف) واضح است که هرگاه جمله‌ی اول مهم باشد جمله‌ی دوم بی‌اهمیت می‌گردد و برعکس می‌بینیم که سیستم کوانتومی به‌تنهایی پایستگی انرژی ندارد در عوض نبود پایستگی انرژی با گرفتن - یا پس دادن - انرژی از پتانسیل خارجی $V(t)$ جبران می‌شود. در شکل ۵-۹ این مطلب به‌طور تصویری نشان داده شده است. در قسمت اول (تابش تحریک شده) سیستم کوانتومی انرژی $\hbar\omega$ را به V می‌دهد. وقتی که حالت ابتدایی برانگیخته باشد این امر به‌وضوح پیداست. در قسمت دوم (جذب) سیستم کوانتومی انرژی $\hbar\omega$ را از V دریافت می‌کند و سرانجام به یک حالت برانگیخته می‌رسد. بنابراین اختلال وابسته به زمان را می‌توان به‌عنوان یک چاه یا چشمه تمام نشدنی برای انرژی در نظر گرفت.



شکل ۵-۹: (i) تابش تحریکی: سیستم کوانتومی به اندازه $\hbar\omega$ به انرژی V انرژی می‌دهد (فقط وقتی رخ می‌دهد که حالت اولیه برانگیخته باشد).

(ii) جذب: سیستم کوانتومی به اندازه $\hbar\omega$ انرژی از V می‌گیرد و به یک حالت برانگیخته می‌رود.

در مقایسه با (۵-۶-۳۴) داریم:

$$w_{i \rightarrow [n]} = \frac{2\pi}{\hbar} |\mathcal{V}_{ni}|^2 \rho(E_n) \Big|_{E_n \approx E_i - \hbar\omega}$$

$$w_{i \rightarrow [n]} = \frac{2\pi}{\hbar} |\mathcal{V}_{ni}^\dagger|^2 \rho(E_n) \Big|_{E_n \approx E_i + \hbar\omega} \quad (۴۳-۶-۵)$$

یا به طور متداول‌تر:

$$w_{i \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar} \left\{ \begin{array}{l} |\mathcal{V}_{ni}|^2 \\ |\mathcal{V}_{ni}^\dagger|^2 \end{array} \right\} \delta(E_n - E_i \pm \hbar\omega) \quad (۴۴-۶-۵)$$

همچنین توجه کنید که:

$$|\mathcal{V}_{ni}|^2 = |\mathcal{V}_{in}^\dagger|^2 \quad (۴۵-۶-۵)$$

که نتیجه‌ی

$$\langle i | \mathcal{V}^\dagger | n \rangle = \langle n | \mathcal{V} | i \rangle^* \quad (۴۶-۶-۵)$$

است (یادآوری می‌کنیم که $\langle n | \mathcal{V} \rangle \leftrightarrow \langle \mathcal{V}^\dagger | n \rangle$ ، از مقایسه (۴۳-۶-۵) و (۴۵-۶-۵) داریم:

$$\frac{\text{نرخ تابش از } [n]}{[n]} = \frac{\text{نرخ جذب از } [i]}{[i]} = \frac{\text{چگالی حالت‌های نهایی } [n]}{\text{چگالی حالت‌های نهایی } [i]} \quad (۴۷-۶-۵)$$

که در این رابطه برای جذب، i را به عنوان حالت‌های نهایی در نظر گرفته‌ایم. معادله‌ی (۴۷-۶-۵) که بیانگر

تقارن بین جذب و تابش است، به موازنه‌ی جزئی معروف است.

به طور خلاصه در اختلال ثابت، تنها اگر $E_n \approx E_i$ برای $|i\rangle \rightarrow |n\rangle$ احتمال گذار قابل توجه خواهیم

داشت. در عوض برای اختلال نوسانی تنها اگر $E_n \approx E_i - \hbar\omega$ (تابش تحریک شده) یا $E_n \approx E_i + \hbar\omega$ (جذب) باشد احتمال گذار قابل توجه وجود دارد.

۷.۵ کاربردهایی برای برهم کنش با میدان تابشی کلاسیکی

جذب و تابش تحریک شده

فرمول‌بندی نظریه‌ی اختلال مستقل از زمان را برای برهم کنش‌های الکترون با میدان تابشی کلاسیکی به کار می‌بندیم. منظور از میدان تابشی کلاسیکی، میدان الکتریکی یا مغناطیسی ناشی از یک میدان کلاسیکی (به جای کوانتیده) است.

هامیلتونی اصلی با حذف $|A|^2$ برابر است با:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + e\phi(\mathbf{x}) - \frac{e}{m_e c} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} \quad (1-7-5)$$

که اگر

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad (2-7-5)$$

این هامیلتونی صحیح خواهد بود. به طور خاص ما با یک میدان تک فام موج تخت

$$\mathbf{A} = 2A_0 \hat{\mathbf{e}} \cos\left(\frac{\omega}{c} \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x} - \omega t\right) \quad (3-7-5)$$

کار می‌کنیم که در آن $\hat{\mathbf{e}}$ و $\hat{\mathbf{n}}$ جهت قطبش (خطی) و جهت انتشار هستند. پیداست که رابطه‌ی (۳-۷-۵) در (۲-۷-۵) صدق می‌کند چون $\hat{\mathbf{e}}$ بر جهت انتشار $\hat{\mathbf{n}}$ عمود است. می‌نویسیم:

$$\cos\left(\frac{\omega}{c} \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x} - \omega t\right) = \frac{1}{2} [e^{i(\omega/c)\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x} - i\omega t} + e^{-i(\omega/c)\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x} + i\omega t}] \quad (4-7-5)$$

و $-(e/m_e c)\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ را به عنوان پتانسیل وابسته به زمان در نظر می‌گیریم که در آن \mathbf{A} در (۳-۷-۵) به شکل زیر است:

$$\mathbf{A} = A_0 \hat{\mathbf{e}} [e^{i(\omega/c)\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x} - i\omega t} + e^{-i(\omega/c)\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x} + i\omega t}] \quad (5-7-5)$$

با مقایسه‌ی این نتیجه با (۳۹-۶-۵) می‌بینیم که جمله‌ی $e^{-i\omega t}$ در

$$-\left(\frac{e}{m_e c}\right) \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} = -\left(\frac{e}{m_e c}\right) A_0 \hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{p} [e^{i(\omega/c)\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x} - i\omega t} + e^{-i(\omega/c)\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x} + i\omega t}] \quad (6-7-5)$$

مربوط به جذب است، در حالی که جمله‌ی $e^{+i\omega t}$ بیان‌کننده‌ی تابش تحریکی می‌باشد.

اکنون بگذارید با جزئیات به جذب پردازیم. داریم:

$$\gamma_{ni}^\dagger = -\frac{eA_0}{m_e c} (e^{i(\omega/c)(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x})} \hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{p})_{ni} \quad (7-7-5)$$

$$w_{i \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2}{m_e^2 c^2} |A_0|^2 |\langle n | e^{i(\omega/c)(\hat{\mathbf{h}} \cdot \mathbf{x})} \hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{p} | i \rangle|^2 \delta(E_n - E_i - \hbar\omega) \quad (۸-۷-۵)$$

معنای تابع δ روشن است. اگر $|n\rangle$ یک پیوستار را تشکیل دهد به سادگی می‌توانیم با $\rho(E_n)$ انتگرال گیری کنیم اما حتی اگر $|n\rangle$ گسسته باشد از آن‌جا که $|n\rangle$ نمی‌تواند حالت پایه باشد (اگرچه یک تراز انرژی مقید داشته باشیم) انرژی آن نمی‌تواند بی‌نهایت تیز باشد و ممکن است یک پهن‌شدگی طبیعی ناشی از طول عمر محدود وجود داشته باشد (بخش ۵-۸) را ببینید). همچنین مکانیزم پهن‌شدگی می‌تواند ناشی از برخوردها باشد.

در چنین مواردی تابع $\delta(\omega - \omega_{ni})$ را به صورت زیر در نظر می‌گیریم:

$$\delta(\omega - \omega_{ni}) = \lim_{\gamma \rightarrow 0} \left(\frac{\gamma}{2\pi} \right) \frac{1}{[(\omega - \omega_{ni})^2 + \gamma^2/4]} \quad (۹-۷-۵)$$

سرانجام موج الکترومغناطیسی فرودی کاملاً تک‌فام نیست. در واقع یک عرض فرکانس محدود وجود دارد.

سطح مقطع جذب را به صورت زیر به دست می‌آوریم:

$$\frac{\text{جذب شده به وسیله‌ی اتم در } (i \rightarrow n) \text{ (واحد زمان / انرژی)}}{\text{شارش انرژی میدان تابشی}} \quad (۱۰-۷-۵)$$

برای شارش انرژی (انرژی هر سطح بر هر واحد زمانی) نظریه الکترومغناطیسی کلاسیک به ما می‌گوید:

$$c\mathcal{Q} = \frac{1}{2\pi} \frac{\omega^2}{c} |A_0|^2 \quad (۱۱-۷-۵)$$

که در آن از

$$\mathcal{Q} = \frac{1}{2} \left(\frac{E_{\max}^2}{8\pi} + \frac{B_{\max}^2}{8\pi} \right) \quad (۱۲-۷-۵)$$

استفاده کرده‌ایم. برای چگالی انرژی (انرژی هر حجم واحد) با:

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (۱۳-۷-۵)$$

و آن‌چه تا به حال به دست آورده‌ایم (یادآوری می‌کنیم که: انرژی جذب شده توسط اتم در هر مرحله‌ی جذب $\hbar\omega =$):

$$\sigma_{abs} = \frac{\hbar\omega(2\pi/\hbar)(e^2/m_e^2c^2)|A_0|^2|\langle n|e^{i(\omega/c)(\hat{n}\cdot\mathbf{x})}\hat{\mathbf{e}}\cdot\mathbf{p}|i\rangle|^2\delta(E_n - E_i - \hbar\omega)}{(1/2\pi)(\omega^2/c)|A_0|^2}$$

$$= \frac{4\pi^2\hbar}{m_e^2\omega}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)|\langle n|e^{i(\omega/c)(\hat{n}\cdot\mathbf{x})}\hat{\mathbf{e}}\cdot\mathbf{p}|i\rangle|^2\delta(E_n - E_i - \hbar\omega)$$

(۱۴-۷-۵)

معادله‌ی (۱۴-۷-۵) بُعد صحیحی دارد: $(M^2L^2/T^2)T=L^2$. اگر تصدیق کنیم که $\alpha = e^2/\hbar c = 1/137$ (بدون بُعد) و $\delta(E_n - E_i - \hbar\omega) = (1/\hbar)\delta(\omega_{ni} - \omega)$ که در آن بُعد زمان T دارد.

تقریب دو قطبی الکتریکی

تقریب دو قطبی الکتریکی (تقریب $E1$) بر مبنای این واقعیت است که طول موج میدان تابشی بسیار بلندتر از ابعاد اتمی است. بنابراین سری (یادآوری می‌کنیم که $\omega/c = 1/\lambda$):

$$e^{i(\omega/c)\hat{n}\cdot\mathbf{x}} = 1 + i\frac{\omega}{c}\hat{n}\cdot\mathbf{x} + \dots$$

(۱۵-۷-۵)

را می‌توان با جمله‌ی ۱ در آن تقریب زد. اعتبار این رابطه برای یک اتم سبک به صورتی است که در ادامه می‌آید. نخست $\hbar\omega$ میدان تابشی باید از مرتبه‌ی فاصله‌ی تراز اتمی باشد. بنابراین:

$$\hbar\omega \sim \frac{Ze^2}{(a_0/Z)} \approx \frac{Ze^2}{R_{atom}}$$

(۱۶-۷-۵)

این رابطه منجر می‌شود به:

$$\frac{c}{\omega} = \lambda \sim \frac{c\hbar R_{atom}}{Ze^2} \approx \frac{137R_{atom}}{Z}$$

(۱۷-۷-۵)

به عبارت دیگر برای اتم‌های سبک (با Z کوچک) داریم:

$$\frac{1}{\lambda}R_{atom} \sim \frac{Z}{137} \ll 1$$

(۱۸-۷-۵)

از آن جا که آرایه‌های ماتریسی x از مرتبه‌ی R_{atom} هستند. x^2 نیز از مرتبه‌ی R_{atom}^2 خواهد بود و به همین ترتیب می‌بینیم که تقریب جایگزینی (۱۵-۷-۵) با جمله‌ی اول آن، تقریبی عالی است.

اکنون داریم:

$$\langle n | e^{i(\omega/c)(\hat{n} \cdot \mathbf{x})} \hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{p} | i \rangle \rightarrow \hat{\mathbf{e}} \cdot \langle n | \mathbf{p} | i \rangle \quad (19-7-5)$$

به‌ویژه ما $\hat{\mathbf{e}}$ را در امتداد محور x قرار می‌دهیم (و $\hat{\mathbf{n}}$ در امتداد محور z خواهد شد). می‌باید $\langle n | p_x | i \rangle$ را محاسبه کنیم. با استفاده از:

$$[x, H_0] = \frac{i\hbar p_x}{m} \quad (20-7-5)$$

داریم:

$$\begin{aligned} \langle n | p_x | i \rangle &= \frac{m}{i\hbar} \langle n | [x, H_0] | i \rangle \\ &= im\omega_{ni} \langle n | x | i \rangle \end{aligned} \quad (21-7-5)$$

به‌خاطر تقریب عملگر دو قطبی، این شکل تقریب، به تقریب دو قطبی الکتریکی معروف است. می‌توانیم در این جا قانون گزینش را برای آرایه‌های ماتریس دو قطبی یادآوری کنیم [۳-۱۰-۳۹] را ببینید. از آن جا که x یک تانسور کروی از مرتبه‌ی ۱ با $q = \pm 1$ است. باید داشته باشیم، $m' - m = \pm 1$ و $|z' - z| = 0, 1$ (گذار $0 \rightarrow 0$ نداریم) اگر $\hat{\mathbf{e}}$ در امتداد محور z باشد، قانون گزینش مشابهی به کار می‌آید. به عبارت دیگر اگر $\hat{\mathbf{e}}$ در راستای z باشد $q = 0$ می‌گردد، بنابراین $m' = m$ است.

با تقریب دو قطبی الکتریکی، سطح مقطع جذب (۵-۷-۱۴) با به کارگیری (۵-۷-۱۹) و (۵-۷-۲۱) ساده‌تر خواهد شد. به صورتی که:

$$\sigma_{abs} = 4\pi^2 \alpha \omega_{ni} |\langle n | x | i \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{ni}) \quad (22-7-5)$$

به عبارت دیگر، σ_{abs} به عنوان تابعی از ω در نظر گرفته می‌شود که هرگاه $\hbar\omega$ متناظر با فاصله‌ی تراز انرژی در $\omega \approx (E_n - E_i)/\hbar$ باشد، قله‌ی تیزی شبیه به تابع δ ایجاد کند. فرض کنید که $|i\rangle$ حالت پایه باشد آنگاه ω_{ni} الزاماً مثبت است.

با انتگرال گیری از (۵-۷-۲۲) داریم:

$$\int \sigma_{abs}(\omega) d\omega = \sum_n 4\pi^2 \alpha \omega_{ni} |\langle n | x | i \rangle|^2 \quad (23-7-5)$$

در فیزیک اتمی قدرت نوسان، f_{ni} را به شکل زیر تعریف می‌کنیم:

$$f_{ni} \equiv \frac{2m\omega_{ni}}{\hbar} |\langle n | x | i \rangle|^2 \quad (24-7-5)$$

آنگاه برقرار کردن قانون جمع توماس-ریچی-کان، سراسر است $[x, [x, H_0]]$ را در نظر بگیرید).

$$\sum_n f_{ni} = 1 \quad (25-7-5)$$

از آن جا که انتگرال گیری روی سطح مقطع جذب است، داریم:

$$\int \sigma_{abs}(\omega) d\omega = \frac{4\pi^2 \alpha \hbar}{2m_e} = 2\pi^2 c \left(\frac{e^2}{m_e c^2} \right) \quad (۲۶-۷-۵)$$

به این که چطور \hbar ظاهر نشده است توجه کنید. در واقع این همان قانون جمع نوسانی است که پیش تر در الکترودینامیک کلاسیک آموخته بودید (برای نمونه، جکسون ۱۹۷۵). از نظر تاریخی این یکی از اولین مثال هایی بود که در آن «مکانیک کوانتومی جدید» به نتایج کلاسیکی صحیح، منجر می گشت. این قانون جمع بسیار قابل توجه است چون ما جزییات شکل هامیلتونی را مشخص نکرده ایم.

اثر فتوالکتریک

اکنون به اثر فتوالکتریک می رسیم. این اثر عبارت است از بیرون رانی یک الکترون هنگامی که اتم در یک میدان تابشی قرار می گیرد. فرآیند اصلی که مورد بررسی قرار می گیرد، گذار از یک حالت اتمی مقید به یک حالت پیوستار $E > 0$ است. به این ترتیب $|i\rangle$ کتی برای حالت اتمی است در حالی که $|n\rangle$ کت مربوط به حالت پیوستار می باشد. اگر الکترون نهایی بسیار کند نباشد، می توان کت $|n\rangle$ را به صورت موج تخت $|k_f\rangle$ در نظر گرفت. فرمول قبلی ما برای $\sigma_{abs}(\omega)$ هنوز به کار می آید. به جز این که اکنون باید انتگرال گیری روی $\delta(\omega_{ni} - \omega)$ را با چگالی حالت های نهایی $\rho(E_n)$ انجام دهیم.

کار اصلی ما محاسبه ی تعداد حالت های نهایی برای هر بازه ی انرژی واحد است. همان طور که بزودی خواهیم دید، این مثالی است که در آن آرایه های ماتریسی نه تنها به انرژی حالت نهایی وابسته اند، بلکه به جهت تکانه نیز بستگی دارند. بنابراین باید یک گروه از حالت های نهایی را با انرژی های شبیه به هم و جهات تکانه ی مشابه در نظر بگیریم.

برای شمارش تعداد حالت ها استفاده از جعبه ی بهنجارش قراردادی برای حالت های موج تخت مناسب است. یک حالت بهنجار موج تخت را در نظر می گیریم. یعنی اگر روی مربع تابع موج در جعبه ی مکعبی به ضلع L انتگرال گیری کنیم، واحد به دست می آوریم. به علاوه حالت طوری فرض می شود که در شرایط تناوبی با دوره تناوب ضلع جعبه صدق کند، آنگاه باید تابع موج به شکل زیر باشد:

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{k}_f \rangle = \frac{e^{i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{x}}}{L^{3/2}} \quad (۲۷-۷-۵)$$

که مقادیر مجاز k_x باید در رابطه ی زیر صدق کنند:

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L}, \dots \quad (۲۸-۷-۵)$$

که n_x می‌تواند یک عدد صحیح مثبت یا منفی باشد. این چنین رابطه‌ای برای k_y و k_z نیز برقرار است. توجه کنید که اگر $L \rightarrow \infty$ برود، k_x ، k_y و k_z مقادیر پیوسته خواهند یافت.

مسئله‌ی شمارش تعداد حالت‌ها به شمارش تعداد نقاط در فضای شبکه‌ی سه بعدی کاهش می‌یابد. n را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \quad (۲۹-۷-۵)$$

به‌ازای $L \rightarrow \infty$ در نظر گرفتن n به‌عنوان یک متغیر پیوسته تقریب خوبی است. در واقع n همان اندازه‌ی بردار شعاعی در فضای شبکه است. بگذارید آرایه‌ی کوچک حجم را طوری در نظر بگیریم که بردار شعاعی از n تا $n + dx$ امتداد یابد و آرایه‌ی زاویه‌ی حجمی $d\Omega$ باشد. پیداست که این حجم برابر $n^2 dn d\Omega$ است. انرژی حالت نهایی موج تخت به k_f و در نتیجه به n وابسته است. داریم:

$$E = \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{n^2 (2\pi)^2}{L^2} \quad (۳۰-۷-۵)$$

به‌علاوه جهت بردار شعاعی در فضای شبکه در جهت تکانه‌ی حالت نهایی است. بنابراین تعداد حالت‌ها در بازه‌ی بین E و $E + dE$ در جهت $d\Omega$ حول \mathbf{k}_f (یادآوری می‌کنیم که $dE = (\hbar^2 k_f / m_e) dk_f$) با رابطه‌ی:

$$\begin{aligned} n^2 d\Omega \frac{dn}{dE} dE &= \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 (k_f^2) \frac{dk_f}{dE} d\Omega dE \\ &= \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \frac{m_e}{\hbar^2} k_f dE d\Omega. \end{aligned} \quad (۳۱-۷-۵)$$

به‌دست می‌آید.* با در نظر گرفتن آن چه تا اینجا به‌دست آورده‌ایم، عبارتی برای دینفرانسیل سطح مقطع اثر فوتوالکتریک حاصل می‌گردد:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4\pi^2 \alpha \hbar}{m_e^2 \omega} |\langle \mathbf{k}_f | e^{i(\omega/c)(\mathbf{h} \cdot \mathbf{x})} \hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{p} | i \rangle|^2 \frac{m_e k_f L^3}{\hbar^2 (2\pi)^3} \quad (۳۲-۷-۵)$$

برای مشخص شدن، بگذارید تا پس‌زنی الکترون پوسته‌ی \mathbf{K} (داخلی‌ترین پوسته) به‌واسطه‌ی جذب نور را در نظر بگیریم. تابع موج ابتدایی در اصل شبیه تابع موج حالت پایه‌ی اتم هیدروژن است به‌استثنای این که به‌جای شعاع بور a_0 در اینجا a_0 / Z جایگزین می‌شود.

* این کار معادل آن است که برای هر مکعب $d^3x d^3p / (2\pi\hbar)^3$ در فضای فاز، یک حالت در نظر بگیریم.

بنابراین:

$$\langle \mathbf{k}_f | e^{i(\omega/c)(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x})} \hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{p} | i \rangle = \hat{\mathbf{e}} \cdot \int d^3x \frac{e^{-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{x}}}{L^{3/2}} e^{i(\omega/c)(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x})} \\ \times (-i\hbar \nabla) \left[e^{-Zr/a_0} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \right] \quad (۳۳-۷-۵)$$

با انتگرال گیری جزء به جزء، می توانیم ∇ را به سمت چپ ببریم. همچنین:

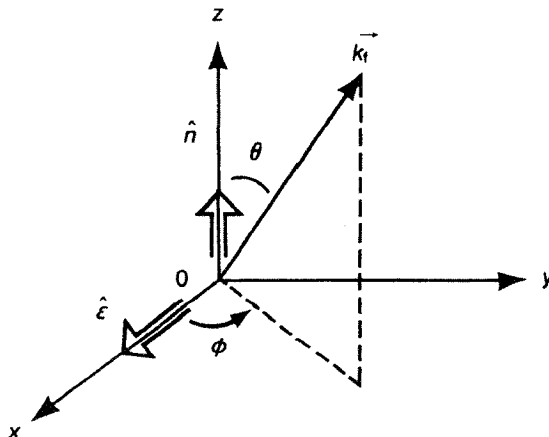
$$\hat{\mathbf{e}} \cdot [\nabla e^{i(\omega/c)(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x})}] = 0 \quad (۳۴-۷-۵)$$

چون $\hat{\mathbf{e}}$ بر $\hat{\mathbf{n}}$ عمود است. از طرف دیگر ∇ روی $e^{-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{x}}$ اثر می کند و $-i\mathbf{k}_f$ را پایین می آورد که می تواند از انتگرال بیرون آید. بنابراین برای محاسبه ی (۳۳-۷-۵) نیاز داریم که تبدیل فوریه ی تابع موج اتمی را با توجه به:

$$\mathbf{q} \equiv \mathbf{k}_f - \left(\frac{\omega}{c} \right) \hat{\mathbf{n}} \quad (۳۵-۷-۵)$$

به دست آوریم. جواب نهایی عبارت است از (مسأله ی ۳۹ این فصل را برای تبدیل فوریه ی تابع موج اتم هیدروژن ببینید):

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 32e^2 k_f \frac{(\hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{k}_f)^2}{mc\omega} \frac{Z^5}{a_0^5} \frac{1}{[(Z^2/a_0^2) + q^2]^4} \quad (۳۶-۷-۵)$$



شکل ۵-۱۰: دستگاه مختصات قطبی با $\hat{\mathbf{n}}$ و $\hat{\mathbf{e}}$ در راستای \mathbf{Oz} و \mathbf{Ox} و $\mathbf{k}_f = (k_f \sin \theta \cos \phi, k_f \sin \theta \sin \phi, k_f \cos \theta)$

اگر ما سیستم مختصات نشان داده شده در شکل ۵-۱۰ را در نظر بگیریم، می‌توانیم دیفرانسیل سطح مقطع را بر حسب θ و ϕ با استفاده از

$$(\hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{k}_f)^2 = k_f^2 \sin^2 \theta \cos^2 \phi$$

$$q^2 = k_f^2 - 2k_f \frac{\omega}{c} \cos \theta + \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \quad (۳۷-۷-۵)$$

بنویسیم.

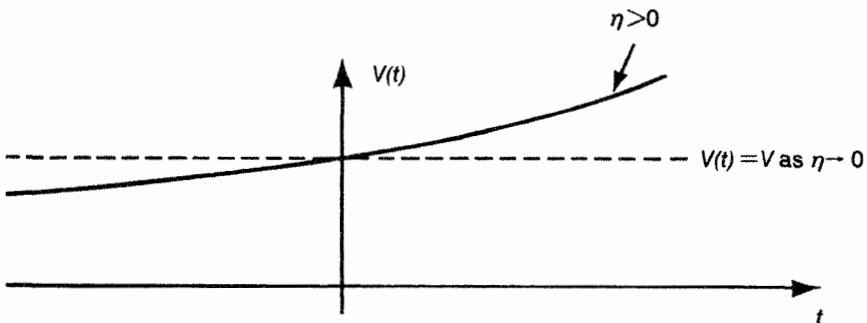
۸.۵ جابه‌جایی انرژی و عرض واپاشی

تا به این جا ملاحظات ما محدود به این سؤال بود که چطور حالت‌هایی غیر از حالت‌های ابتدایی پُر می‌شوند. به عبارت دیگر تا به اینجا به تحول زمانی ضرایب $c_n(t)$ با $n \neq i$ پرداخته‌ایم. سؤالی که به‌طور طبیعی پیش می‌آید این است که چه اتفاقی برای خود $c_i(t)$ می‌افتد؟

برای اجتناب از اثر تغییر ناگهانی در هامیلتونی، پیشنهاد می‌کنیم که اختلال بسیار آهسته اضافه گردد. در زمان خیلی قبل $t \rightarrow -\infty$ پتانسیل وابسته به زمان صفر فرض شده است. سپس کم‌کم اختلال را تا بالاترین مقدارش روشن می‌کنیم. داریم:

$$V(t) = e^{\eta t} V \quad (۱-۸-۵)$$

که در آن V ثابت و η یک عدد کوچک مثبت است. در پایان محاسبات $\eta \rightarrow 0$ می‌رود (شکل ۵-۱۱ را ببینید) و پتانسیل در تمام زمان‌ها ثابت می‌گردد.



شکل ۵-۱۱: نمودار $V(t)$ بر حسب t که به‌صورت آهسته روشن می‌شود.

در زمان خیلی دور، این زمان را $-\infty$ در نظر می‌گیریم، کت حالت در تصویر برهم کنش به شکل $|i\rangle$ فرض شد. هدف اصلی ما تحول $c_i(t)$ است. اما قبل از آن، بگذارید تا مطمئن شویم فرمول قدیمی ما برای

قانون طلایی (بخش ۵-۶ را ببینید) با به کار بردن این روش روشن کردن آهسته، همچنان به کار می آید. برای $c_n(t)$ با $n \neq i$ داریم [با استفاده از (۵-۶-۱۷)]

$$\begin{aligned} c_n^{(0)}(t) &= 0 \\ c_n^{(1)}(t) &= \frac{-i}{\hbar} V_{ni} \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \int_{t_0}^t e^{\eta t'} e^{i\omega_{ni} t'} dt' \\ &= \frac{-i}{\hbar} V_{ni} \frac{e^{\eta t + i\omega_{ni} t}}{\eta + i\omega_{ni}} \end{aligned} \quad (۲-۸-۵)$$

بنابراین برای پایین ترین مرتبه ی غیر صفر، احتمال گذار عبارت است از:

$$|c_n(t)|^2 = \frac{|V_{ni}|^2}{\hbar^2} \frac{e^{2\eta t}}{\eta^2 + \omega_{ni}^2} \quad (۳-۸-۵)$$

یا

$$\frac{d}{dt} |c_n(t)|^2 = \frac{2|V_{ni}|^2}{\hbar^2} \left(\frac{\eta e^{2\eta t}}{\eta^2 + \omega_{ni}^2} \right) \quad (۴-۸-۵)$$

حال قرار می دهیم $\eta \rightarrow 0$. پیداست که این کار یعنی جایگزینی $e^{\eta t}$ با عدد واحد. اما توجه کنید که:

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{\eta}{\eta^2 + \omega_{ni}^2} = \pi \delta(\omega_{ni}) = \pi \hbar \delta(E_n - E_i) \quad (۵-۸-۵)$$

این رابطه به قانون طلایی منجر می گردد:

$$w_{i \rightarrow n} = \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right) |V_{ni}|^2 \delta(E_n - E_i) \quad (۶-۸-۵)$$

با استفاده از این نتیجه، بگذارید تا بار دیگر $c_i^{(0)}$ ، $c_i^{(1)}$ و $c_i^{(2)}$ را با به کار بستن (۵-۶-۱۷) به دست آوریم. داریم:

$$\begin{aligned} c_i^{(0)} &= 1 \\ c_i^{(1)} &= \frac{-i}{\hbar} V_{ii} \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \int_{t_0}^t e^{\eta t'} dt' = \frac{-i}{\hbar \eta} V_{ii} e^{\eta t} \\ c_i^{(2)} &= \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \sum_m |V_{mi}|^2 \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \int_{t_0}^t dt' e^{i\omega_{mi} t' + \eta t'} \frac{e^{i\omega_{mi} t' + \eta t'}}{i(\omega_{mi} - i\eta)} \\ &= \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 |V_{ii}|^2 \frac{e^{2\eta t}}{2\eta^2} + \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \sum_{m \neq i} \frac{|V_{mi}|^2 e^{2\eta t}}{2\eta(E_i - E_m + i\hbar\eta)} \end{aligned} \quad (۷-۸-۵)$$

بنابراین تا مرتبه‌ی دوم داریم:

$$c_i(t) \approx 1 - \frac{i}{\hbar\eta} V_{ii} e^{\eta t} + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 |V_{ii}|^2 \frac{e^{2\eta t}}{2\eta^2} + \left(\frac{-i}{\hbar}\right) \sum_{m \neq i} \frac{|V_{mi}|^2 e^{2\eta t}}{2\eta(E_i - E_m + i\hbar\eta)} \quad (۸-۸-۵)$$

حال به مشتق زمانی c_i یعنی $[dc_i(t)/dt \equiv \dot{c}_i]$ می‌پردازیم که آن را از (۸-۸-۵) به دست می‌آوریم. با به کار گرفتن c_i و قرار دادن $\eta \rightarrow 0$ (بنابراین $e^{\eta t}$ و $e^{2\eta t}$ با واحد جایگزین می‌شوند) داریم:

$$\begin{aligned} \frac{\dot{c}_i}{c_i} &\approx \frac{\frac{-i}{\hbar} V_{ii} + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \frac{|V_{ii}|^2}{\eta} + \left(\frac{-i}{\hbar}\right) \sum_{m \neq i} \frac{|V_{mi}|^2}{(E_i - E_m + i\hbar\eta)}}{1 - \frac{i}{\hbar} \frac{V_{ii}}{\eta}} \\ &\approx \frac{-i}{\hbar} V_{ii} + \left(\frac{-i}{\hbar}\right) \sum_{m \neq i} \frac{|V_{mi}|^2}{E_i - E_m + i\hbar\eta} \end{aligned} \quad (۹-۸-۵)$$

عبارت (۹-۸-۵) به طور صریح تا مرتبه‌ی دوم در V صحیح است. در این جا $\dot{c}_i(t)/c_i(t)$ مستقل از زمان است. (۹-۸-۵) معادله‌ی دیفرانسیلی است که در تمام زمان‌ها برقرار است. برای به دست آوردن این، مناسب است که c_i را طوری بهنجار کنیم که $c_i(0) = 1$ باشد. اکنون حدس

$$c_i(t) = e^{-i\Delta_i t/\hbar}, \quad \frac{\dot{c}_i(t)}{c_i(t)} = \frac{-i}{\hbar} \Delta_i \quad (۱۰-۸-۵)$$

را طوری دنبال می‌کنیم که Δ_i ثابت باشد (در زمان)، اما الزامی به حقیقی بودن آن نیست. پیداست که (۱۰-۸-۵) با (۹-۸-۵) سازگار است. چون سمت راست (۱۰-۸-۵) ثابت است. اکنون با توجه به این که $e^{-i\Delta_i t/\hbar}|i\rangle$ در تصویر برهم کنش به شکل $e^{-i\Delta_i t/\hbar - iE_i t/\hbar}|i\rangle$ در تصویر شرودینگر است، می‌توانیم معنی فیزیکی Δ_i را درک کنیم. به عبارت دیگر:

$$E_i \rightarrow E_i + \Delta_i \quad (۱۱-۸-۵)$$

که این در نتیجه‌ی اختلال است. یعنی ما جابه‌جایی تراز را با استفاده از نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان محاسبه کرده‌ایم. اکنون به طور معمول بسط:

$$\Delta_i = \Delta_i^{(1)} + \Delta_i^{(2)} + \dots \quad (۱۲-۸-۵)$$

را می‌نویسیم و (۱۰-۸-۵) را با (۹-۸-۵) مقایسه می‌کنیم. برای مرتبه‌ی اول داریم:

$$\Delta_i^{(1)} = V_{ii} \quad (۱۳-۸-۵)$$

اما این درست همان چیزی است که از نظریه‌ی اختلال مستقل از زمان انتظار داشتیم. قبل از این که به $\Delta_i^{(2)}$ پردازیم، یادآوری می‌کنیم که:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x + i\epsilon} = \text{Pr.} \frac{1}{x} - i\pi\delta(x) \quad (14-8-5)$$

بنابراین:

$$\text{Re}(\Delta_i^{(2)}) = \text{Pr.} \sum_{m \neq i} \frac{|V_{mi}|^2}{E_i - E_m} \quad (الف) \quad (15-8-5)$$

$$\text{Im}(\Delta_i^{(2)}) = -\pi \sum_{m \neq i} |V_{mi}|^2 \delta(E_i - E_m) \quad (ب) \quad (15-8-5)$$

اما سمت راست (15-8-5) از قانون طلایی آشنا به نظر می‌رسد، بنابراین می‌توانیم تشخیص دهیم که:

$$\sum_{m \neq i} w_{i \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{m \neq i} |V_{mi}|^2 \delta(E_i - E_m) = -\frac{2}{\hbar} \text{Im}[\Delta_i^{(2)}] \quad (16-8-5)$$

به $c_i(t)$ باز می‌گردیم. می‌توانیم (10-8-5) را به شکل زیر بنویسیم:

$$c_i(t) = e^{-(i/\hbar)[\text{Re}(\Delta_i)t] + (1/\hbar)[\text{Im}(\Delta_i)t]} \quad (17-8-5)$$

اگر تعریف کنیم:

$$\frac{\Gamma_i}{\hbar} \equiv -\frac{2}{\hbar} \text{Im}(\Delta_i) \quad (18-8-5)$$

آنگاه:

$$|c_i|^2 = e^{2\text{Im}(\Delta_i)t/\hbar} = e^{-\Gamma_i t/\hbar} \quad (19-8-5)$$

بنابراین، Γ_i مشخص کننده‌ی سرعتی است که حالت $|i\rangle$ ناپدید می‌شود.

آزمودن پایداری احتمال برای مرتبه‌ی دوم V در زمان‌های کوچک ارزشمند است:

$$|c_i|^2 + \sum_{m \neq i} |c_m|^2 = (1 - \Gamma_i t/\hbar) + \sum_{m \neq i} w_{i \rightarrow m} t = 1 \quad (20-8-5)$$

که در آن از (16-8-5) استفاده کردیم. بنابراین احتمال پیدا کردن حالت اولیه و بقیه‌ی حالت‌های دیگر ۱ است. به زبان دیگر، کاهش حالت $|i\rangle$ برابر با رشد حالت‌های دیگر به غیر از $|i\rangle$ است.

به‌طور خلاصه، قسمت حقیقی جابه‌جایی انرژی همان چیزی است که به‌عنوان جابه‌جایی تراز گفته می‌شود. قسمت موهومی جابه‌جایی انرژی، صرف‌نظر از ۲- همان پهنای واپاشی است [۵-۸-۱۸] را ببینید] همچنین توجه کنید:

$$\frac{\hbar}{\Gamma_i} = \tau_i \quad (۵-۸-۲۱)$$

که در آن Γ_i طول عمر میانگین است چون:

$$|c_i|^2 = e^{-t/\tau_i} \quad (۵-۸-۲۲)$$

برای این که ببینیم چرا به $|i\rangle$ پهنای می‌گویند تبدیل فوریه‌ی زیر را بررسی می‌کنیم:

$$\int f(E) e^{-iEt/\hbar} dE = e^{-i[E_i + \text{Re}(\Delta_i)]t/\hbar - \Gamma_i t/2\hbar} \quad (۵-۸-۲۳)$$

با استفاده از از فرمول وارون فوریه، داریم:

$$|f(E)|^2 \propto \frac{1}{\{E - [E_i + \text{Re}(\Delta_i)]\}^2 + \Gamma_i^2/4} \quad (۵-۸-۲۴)$$

بنابراین، معنای معمول Γ_i ، کل طول نیمه‌ی بیشینه است. توجه کنید که رابطه‌ی عدم قطعیت انرژی-زمان از (۵-۸-۲۱) عبارت است از

$$\Delta t \Delta E \sim \hbar \quad (۵-۸-۲۵)$$

که در آن عدم قطعیت انرژی را با Γ_i و میانگین نیمه عمر را با Δt مشخص می‌کنیم.

هرچند موضوع جابه‌جایی انرژی و پهنای واپاشی را با استفاده از اختلال ثابت V به‌ازای حد (۵-۸-۱) وقتی که $\eta \rightarrow 0$ می‌رود، مورد بحث قرار دادیم، به‌راحتی می‌توانستیم ملاحظات خود را برای مورد اختلال هماهنگ که در بخش ۵-۶ مورد بررسی قرار گرفت، تعمیم دهیم. آنچه باید انجام دهیم این است که:

$$E_{n(m)} - E_i \rightarrow E_{n(m)} - E_i \pm \hbar\omega \quad (۵-۶-۲۶)$$

در (۵-۸-۲)، (۵-۸-۸)، و نظایر آن‌ها، جایگزین گردد. شرح کوانتومی حالت‌های غیرپایا که ما در این جا مورد بحث قرار دادیم، در اصل مربوط به ویگنر و وایسکوف در سال ۱۹۳۰ است.

مسائل

۱- اختلال

$$\lambda H_1 = bx$$

به یک نوسان گر هماهنگ ساده (یک بعدی) اعمال می شود. که در آن b یک عدد ثابت است.

الف- جابه جایی انرژی حالت پایه را تا پایین ترین مرتبه ی غیر صفر به دست آورید.

ب- این مسأله را به طور صریح حل کنید و نتیجه را با آن چه در قسمت الف به دست آورده اید مقایسه کنید.

می توانید بدون اثبات فرض کنید که:

$$\langle u_{n'} | x | u_n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n+1} \delta_{n', n+1} + \sqrt{n} \delta_{n', n-1}).$$

۲- در نظریه ی اختلال مستقل از زمان غیر تبهگن، احتمال یافتن در ویژه کت انرژی مختل شده ی $(|k\rangle)$ که متناظر با ویژه کت مختل نشده ی $(|k^{(0)}\rangle)$ است، چقدر است؟ این مسئله را تا مرتبه ی g^2 حل کنید.

۳- یک ذره را در پتانسیل دو بعدی در نظر بگیرید:

$$V_0 = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq L, 0 \leq y \leq L \text{ برای} \\ \infty & \text{سایر جاها} \end{cases}$$

ویژه توابع انرژی را برای حالت پایه و اولین حالت برانگیخته بنویسید. اکنون یک اختلال مستقل از زمان به شکل:

$$V_1 = \begin{cases} \lambda xy & 0 \leq x \leq L, 0 \leq y \leq L \text{ برای} \\ 0 & \text{سایر جاها} \end{cases}$$

وارد می کنیم، ویژه توابع انرژی مرتبه صفرم و جابه جایی انرژی مرتبه اول را برای حالت پایه و نخستین حالت برانگیخته به دست آورید.

۴- یک نوسان گر هماهنگ همسانگرد دو بعدی را در نظر بگیرید. هامیلتونی آن عبارت است از:

$$H_0 = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} (x^2 + y^2)$$

الف) انرژی های سه حالت پایینی را حساب کنید. آیا تبهگنی وجود دارد؟

(ب) اکنون اختلال:

$$V = \delta m \omega^2 xy$$

را اعمال می‌کنیم که در آن δ یک عدد بدون بعد حقیقی است که بسیار کوچک‌تر از واحد می‌باشد. ویژه‌کت انرژی مرتبه صفرم و انرژی متناظر با آن را [یعنی: انرژی غیرتبهگن به‌دست آمده در قسمت الف به‌علاوه‌ی جابه‌جایی انرژی مرتبه‌ی اول] برای هر کدام از سه حالت پایین انرژی بیابید.

(ج) مسأله‌ی $H_0 + V$ را به‌طور صریح حل کنید. حاصل را با نتایج به‌دست آمده در قسمت (ب) مقایسه کنید.

[می‌توانید از $\langle n' | x | n \rangle = \sqrt{\hbar/2m\omega} (\sqrt{n+1} \delta_{n',n+1} + \sqrt{n} \delta_{n',n-1})$ استفاده کنید]

۵- (۵-۱-۵۴) را برای نوسان گر هماهنگ یک بعدی که با (۵-۱-۵) و اختلال اضافی $V = \frac{1}{2} \epsilon m \omega^2 x^2$ داده می‌شود، به‌دست آورید. نشان دهید که بقیه‌ی آرایه‌های ماتریسی V_{k0} صفر می‌شوند.

۶- یک نوسان گر هماهنگ سه‌بعدی کمی ناهمسان‌گرد، دارای $\omega_x = \omega_y = \omega_z \approx \omega$ است. یک ذره‌ی باردار در میدان این نوسان گر حرکت می‌کند و در زمان مشابهی در معرض یک میدان مغناطیسی هماهنگ در راستای x قرار می‌گیرد. فرض کنید که پراکندگی زیمان با پراکندگی ناشی از ناهمسان‌گردی قابل مقایسه است. مرتبه‌ی اول انرژی‌های مؤلفه‌های نخستین حالت برانگیخته را بیابید. در مورد حدهای مختلف بحث کنید. (از کتاب مکانیک کوانتومی مرزباخر ۱۹۷۰)

۷- یک اتم الکترونی که حالت پایه‌ی آن ناتبهگن است، در یک میدان الکتریکی در راستای z واقع می‌شود. با توجه به بردار حالت مختل شده‌ی محاسبه شده تا مرتبه‌ی اول یک عبارت تقریبی برای گشتاور دوقطبی الکتریکی القایی حالت پایه، متناظر با مقدار انتظاری ez به‌دست آورید. نشان دهید که عبارت یکسانی را نیز می‌توان از جابه‌جایی انرژی $\Delta = -\alpha |E|^2/2$ حالت پایه که تا مرتبه‌ی دوم محاسبه شده است، به‌دست آورد (توجه: α قطبش پذیری است) از اسپین صرف نظر کنید.

۸- آرایه‌های ماتریسی (یا مقادیر انتظاری) زیر را محاسبه کنید. اگر صفر می‌شوند، توضیح دهید که چرا صفر می‌شوند. از تقارن‌های ساده (یا چیزهای دیگر) استفاده کنید.

a. $\langle n = 2, l = 1, m = 0 | x | n = 2, l = 0, m = 0 \rangle$. (الف)

b. $\langle n = 2, l = 1, m = 0 | p_z | n = 2, l = 0, m = 0 \rangle$. (ب)

[در (الف) و (ب)، $|nlm\rangle$ بیان‌کننده‌ی ویژه‌کت انرژی یک اتم هیدروژن غیرنسبیتی، صرف‌نظر از

اسپین است.]

(ج) $\langle L_z \rangle$ برای یک الکترون در میدان مرکزی با $j = \frac{9}{2}$ و $m = \frac{7}{2}$ و $l = 4$.

(د) $\langle m_s \rangle = 0$ ، سه گانه $|S_z^{(e-)} - S_z^{(e+)}|$ ، $m_s = 0$ ، بگانه $\langle m_s \rangle$ برای پوزیترونیم حالت s .

(ه) $\langle S^{(1)} \cdot S^{(2)} \rangle$ برای حالت پایه‌ی یک مولکول هیدروژن.

۹- اوربیتال p الکترون با $(n, l = 1, m = \pm 1, 0)$ مشخص می‌شود (صرف نظر از اسپین) این حالت تحت

تأثیر پتانسیل

$$V = \lambda(x^2 - y^2) \quad (\lambda = \text{ثابت})$$

قرار می‌گیرد.

(الف) "نصحیح" مرتبه‌ی صفرم ویژه حالت‌های انرژی را که اختلال را قطری می‌کنند، به دست آورید. لازم نیست که جابه‌جایی انرژی را با جزییات محاسبه کنید، اما نشان دهید که تبهگنی سه‌گانه‌ی اولیه به کلی از بین رفته است.

(ب) از آن‌جا که V تحت وارونی زمانی ناورداست و از آن‌جا که هیچ‌گونه تبهگنی وجود ندارد، انتظار داریم که هر کدام از ویژه توابع انرژی که در قسمت (الف) به دست آمدند، تحت وارونی زمانی دوباره به خودشان تبدیل گردند (صرف نظر از یک ضریب فاز یا علامت) این نکته را صریحاً بیازمایید.

۱۰- یک ذره‌ی بدون اسپین در یک چاه مربعی بی‌نهایت دو بعدی در نظر بگیرید.

$$V = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq a \\ \infty & \text{سایر جاها} \end{cases}$$

الف- ویژه مقادیر انرژی برای سه حالت پایینی کدامند؟ آیا تبهگنی وجود دارد؟

ب- اکنون پتانسیل:

$$V_1 = \lambda xy, \quad 0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq a$$

را اضافه می‌کنیم. با در نظر گرفتن این اختلال به عنوان یک اختلال ضعیف به سؤالات زیر پاسخ دهید:

(i) جابه‌جایی انرژی ناشی از اختلال برای هر کدام از سه حالت برحسب λ خطی است یا مربعی؟

(ii) عبارتی برای جابه‌جایی‌های انرژی سه حالت پایینی تا مرتبه‌ی λ پیدا کنید. (لازم نیست

انتگرال‌هایی ظاهر می‌شوند را حل کنید).

(iii) یک نمودار انرژی برای سه حالت انرژی با اختلال و بدون اختلال رسم کنید. مطمئن شوید که کدام حالت مختل نشده به کدام حالت مختل شده مرتبط شده است.

۱۱- ماتریس هامیلتونی برای یک سیستم دو حالت به شکل

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} E_1^0 & \lambda \Delta \\ \lambda \Delta & E_2^0 \end{pmatrix}$$

نوشته می‌شود. پیدا است که ویژه توابع انرژی برای مسائل مختل نشده ($\lambda = 0$) به شکل زیر هستند.

$$\phi_1^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \phi_2^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

(الف) این مسأله را برای یافتن ویژه توابع ψ_1 و ψ_2 ویژه مقادیر انرژی E_1 و E_2 به طور صریح حل کنید.

(ب) فرض کنید که $|E_1^0 - E_2^0| \ll \lambda |\Delta|$ است، مسأله را به طور مشابه با استفاده از نظریه اختلال مستقل از زمان تا مرتبه اول برای ویژه توابع انرژی و تا مرتبه دوم برای ویژه مقادیر انرژی حل کنید. نتایج را با جواب‌های دقیق در بخش (الف) مقایسه کنید.

(ج) فرض کنید که دو انرژی مختل نشده تقریباً تبهگن هستند. یعنی:

$$|E_1^0 - E_2^0| \ll \lambda |\Delta|$$

نشان دهید که نتایج دقیق به دست آمده در بخش (الف) بسیار شبیه به آن چیزی است که از اعمال نظریه اختلال تبهگن به این مسأله با قرار دادن E_1^0 برابر E_2^0 انتظار داریم.

۱۲- (این یک مسأله‌ی ماهرانه است چون تبهگنی بین حالت‌های اول و دوم در مرتبه اول کاملاً از بین نمی‌رود. همچنین کتاب گاتفرید ۱۹۶۶ صفحه ۳۹۷، مسأله‌ی ۱ را ببینید) این مسأله از کتاب شیف ۱۹۶۸، صفحه ۲۹۴، مسأله‌ی ۴ گرفته شده است. سیستمی که سه حالت مختل نشده دارد را می‌توان با ماتریس هامیلتونی مختل شده‌ی زیر نمایش داد.

$$\begin{pmatrix} E_1 & 0 & a \\ 0 & E_1 & b \\ a^* & b^* & E_2 \end{pmatrix}$$

که در آن $E_2 > E_1$ است. کمیت‌های a و b همان اختلال ما هستند که با یکدیگر هم مرتبه‌اند و در مقایسه با $E_2 - E_1$ کوچکند. با استفاده از نظریه اختلال غیرتبهگن مرتبه دوم ویژه مقادیر مختل شده را محاسبه کنید (آیا این فرآیند صحیح است؟) آنگاه ماتریس را قطری کنید تا ویژه مقادیر دقیق را به دست

آوردید. سرانجام از نظریه‌ی اختلال تبه‌گن درجه دوم استفاده کنید. سه نتیجه‌ی به‌دست آمده را با هم مقایسه کنید.

۱۳- اثر اشتراک را برای ترازهای $2S_{1/2}$ و $2P_{1/2}$ اتم هیدروژن، برای یک میدان \mathcal{E} که به‌اندازه‌ی کافی ضعیف است محاسبه کنید. میدان \mathcal{E} آنقدر ضعیف است که $e\mathcal{E}a_0$ در مقایسه با ساختار ریز کوچک است اما جابه‌جایی لمب δ ($\delta = 1057 \text{ MHz}$) به حساب می‌آید (یعنی $2P_{3/2}$ در این محاسبه نادیده گرفته می‌شود). نشان دهید که برای $\delta \ll e\mathcal{E}a_0$ جابه‌جایی‌های انرژی از درجه‌ی دوم \mathcal{E} است. در عوض برای $\delta \gg e\mathcal{E}a_0$ برحسب \mathcal{E} خطی است (انتگرالی که به آن احتیاج دارید $\langle 2s|r|2p \rangle = 3\sqrt{3}a_0$ است). به‌طور خلاصه راجع نتایج وارونی زمانی در این مسأله بحث کنید. این مسأله در کتاب گاتفرید ۱۹۶۶، مسأله‌ی ۷-۳ آمده است.

۱۴- اثر اشتراک را تا پایین‌ترین مرتبه‌ی غیرصفر برای تراز $n = 3$ اتم هیدروژن به‌دست آورید. از نیروی اسپین-مدار و تصحیح نسیتی (جابه‌جایی لمب) صرف‌نظر کنید. فقط محاسبه جابه‌جایی‌های انرژی برای پایین‌ترین مرتبه‌ی غیرصفر کافی نیست بلکه باید ویژه‌کت متناظر با مرتبه‌ی صفرم را نیز به‌دست آورید.

۱۵- فرض کنید که الکترونی گشتاور دوقطبی الکتریکی ذاتی بسیار کوچکی داشته باشد که با گشتاور مغناطیسی اسپین قابل مقایسه باشد (یعنی μ_{el} متناسب با δ است). برهم‌کنش فرضی $\mu_{el} \cdot \mathbf{E}$ را به‌عنوان یک اختلال کوچک در نظر بگیرید. بحثی کلی راجع به این انجام دهید که ترازهای انرژی اتم Na ($Z=11$) در غیاب هرگونه میدان الکترومغناطیسی خارجی چطور رفتار می‌کنند. جابه‌جایی‌های تراز از مرتبه‌ی اول هستند یا مرتبه‌ی دوم؟ صریحاً شرح دهید که کدام حالت‌ها با یکدیگر مخلوط می‌شوند. عبارتی برای جابه‌جایی انرژی پایین‌ترین تراز که تحت اثر اختلال قرار گرفته به‌دست آورید. فرض کنید که تنها الکترون ظرفیت برهم‌کنش دارد.

۱۶- فرض کنید که ذره‌ای با یک پتانسیل متقارن کروی $V(r)$ به یک مرکز ثابت مقید است.

الف) برای تمام حالت‌های s پایه و برانگیخته، ثابت کنید:

$$|\psi(0)|^2 = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right) \left\langle \frac{dV}{dr} \right\rangle$$

ب) این رابطه را برای حالت پایه‌ی نوسان‌گر همسان‌گرد سه‌بعدی، اتم هیدروژن و نظایر آن‌ها، بیازماید.

(توجه کنید که این رابطه در واقع برای تشکیل پتانسیل یک کوارک و پادکوارک مفید واقع می‌شود)

۱۷- الف) فرض کنید که هامیلتونی یک چرخنده‌ی صلب، در میدان مغناطیسی موازی با محور چرخش به شکل:

$$AL^2 + BL_z + CL_y$$

است (مرزباخر ۱۹۷۰، مسأله‌ی ۱۷-۱). این هامیلتونی در صورتی به دست می‌آید که جملات مربعی در میدان را در نظر نگیریم. فرض کنید که $B \gg C$ ، با استفاده از نظریه‌ی اختلال برای پایین‌ترین مرتبه‌ی غیرصفر، ویژه مقادیر تقریبی انرژی را بیابید.

ب) آرایه‌های ماتریسی:

$$\langle n'l'm'_l m'_s | (3z^2 - r^2) | nlm_l m_s \rangle$$

$$\langle n'l'm'_l m'_s | xy | nlm_l m_s \rangle$$

یک اتم تک الکترونی (برای مثال، قلیایی) را در نظر بگیرید. قوانین گزینش را برای Δl ، Δm_l و Δm_s بنویسید، جواب خود را توضیح دهید.

۱۸- اثر زیمان مربعی را برای حالت پایه‌ی اتم هیدروژن $\langle \mathbf{x}|0 \rangle = (1/\sqrt{\pi a_0^3})e^{-r/a_0}$ بنویسید. این اثر ناشی از $e^2 A^2 / 2m_e c^2$ است که در هامیلتونی مرتبه‌ی اول به‌طور معمول حذف می‌شود. جابه‌جایی انرژی را به‌ازای

$$\Delta = -\frac{1}{2} \chi \mathbf{B}^2$$

بنویسید و عبارتی برای پذیرفتاری دیامغناطیسی χ به دست آورید. (انتگرال زیر می‌تواند مفید واقع شود:

$$\int_0^\infty e^{-\alpha r} r^n dr = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}.)$$

۱۹- (مرزباخر ۱۹۷۰، صفحه‌ی ۴۴۸، مسأله‌ی ۱۱) برای تابع موج اتم He

$$\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = (Z_{\text{eff}}^3 / \pi a_0^3) \exp\left[\frac{-Z_{\text{eff}}(r_1 + r_2)}{a_0} \right]$$

با $Z_{\text{eff}} = 2 - \frac{5}{16}$ ، که از روش و روشی به دست می‌آید استفاده نمایید. مدار اندازه‌گیری شده‌ی پذیرفتاری و یا مغناطیسی برابر $1.88 \times 10^{-6} \text{ cm}^3/\text{mole}$ است.

از هامیلتونی یک الکترون در میدان مغناطیسی، استفاده کنید، و برای حالتی با اندازه حرکت زاویه‌ای صفر، تغییر انرژی را تا مرتبه‌ی B^2 مشخص کنید. اگر سیستم در یک میدان مغناطیسی در یک میدان مغناطیسی یکنواخت که با پتانسیل برداری $\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}$ مشخص می‌شود، قرار داشته باشد.

پذیرفتاری دیامغناطیسی اتمی X را با $E = -\frac{1}{2}\chi B^2$ تعریف می‌کنیم، X را برای یک اتم هلیوم در حالت پایه به دست آورید و این نتیجه را با مقدار اندازه‌گیری شده مقایسه کنید.

۲۰- انرژی حالت پایه‌ی یک نوسان‌گر هماهنگ ساده را با استفاده از

$$\langle x | \hat{0} \rangle = e^{-\beta|x|}$$

تخمین بزنید. به‌ازای توابع گوناگون β تغییر می‌کند. (می‌توانید از

$$\int_0^\infty e^{-\alpha x} x^n dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}})$$

استفاده کنید)

۲۱- پایین‌ترین ویژه مقدار (λ) معادله‌ی دیفرانسیل

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + (\lambda - |x|)\psi = 0, \quad \psi \rightarrow 0 \text{ for } |x| \rightarrow \infty$$

را تخمین بزنید. از روش وردشی با

$$\psi = \begin{cases} c(\alpha - |x|), & |x| < \alpha \\ 0, & |x| > \alpha \end{cases}$$

به‌ازای یک تابع آزمایشی، استفاده کنید (توجه کنید که $d\psi/dx$ در $x = 0$ ناپیوسته است) مقادیر عددی که برای حل این مسأله ممکن است مفید باشند، عبارتند از:

$$3^{1/3} = 1.442, \quad 5^{1/3} = 1.710, \quad 3^{2/3} = 2.080, \quad \pi^{2/3} = 2.145$$

مقدار دقیق پایین‌ترین ویژه مقدار را می‌توان با $1/0.19$ نشان داد.

۲۲- یک نوسان‌گر هماهنگ ساده‌ی یک بُعدی در نظر بگیرید که فرکانس زاویه‌ای کلاسیکی آن ω_0 است. در $t < 0$ این نوسان‌گر در حالت پایه قرار دارد. در $t > 0$ یک پتانسیل وابسته به زمان

$$V(t) = F_0 x \cos \omega t$$

به‌وجود می‌آید. که در آن F_0 در فضا و زمان ثابت است. عبارتی برای مقدار انتظاری $\langle x \rangle$ به‌ازای تابعی از زمان با استفاده از پایین‌ترین مرتبه‌ی غیر صفر نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان، به دست آورید. آن این روش

برای $\omega = \omega_0$ نیز معتبر است؟ [می‌توانید از

$$\langle n' | x | n \rangle = \sqrt{\hbar/2m\omega_0} (\sqrt{n+1} \delta_{n', n+1} + \sqrt{n} \delta_{n', n-1})$$

استفاده کنید]

۲۳- یک نوسان گر هماهنگ یک بعدی در $t < 0$ در حالت پایه‌ی خود قرار دارد. برای $t \geq 0$ این نوسان گر در معرض یک نیروی وابسته به زمان اما یکنواخت (نه پتانسیل!) در راستای x قرار می‌گیرد.

$$F(t) = F_0 e^{-t/\tau}$$

الف) با استفاده از نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان مرتبه اول، احتمال یافتن نوسان گر در اولین حالت برانگیخته‌اش را در $t > 0$ بیابید. نشان دهید که در حد $t \rightarrow \infty$ (τ محدود) عبارت شما مستقل از زمان است. این نتیجه منطقی است یا تعجب برانگیز؟

ب) می‌توانیم حالت‌های برانگیخته‌ی بالاتری را پیدا کنیم؟

$$[\text{می‌توانید از } \langle n' | x | n \rangle = \sqrt{\hbar/2m\omega} (\sqrt{n} \delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{n',n+1}) \text{ استفاده کنید.}]$$

۲۴- یک ذره‌ی مقید در پتانسیل یک نوسان گر هماهنگ ساده را در نظر بگیرید. در آغاز ($t < 0$) این ذره در حالت پایه قرار دارد. در $t = 0$ اختلالی به شکل

$$H'(x, t) = Ax^2 e^{-t/\tau}$$

روشن می‌شود. با استفاده از نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان، احتمال این که پس از گذر زمان طولانی ($t \gg \tau$) سیستم‌گذاری به یک حالت برانگیخته داده شده، داشته باشد را حساب کنید. تمام حالت‌های نهایی را در نظر بگیرید.

۲۵- هامیلتونی مختل نشده‌ی یک سیستم دو حالتی با

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1^0 & 0 \\ 0 & E_2^0 \end{pmatrix}$$

داده شده است. به علاوه یک اختلال وابسته به زمان نیز وجود دارد:

$$V(t) = \begin{pmatrix} 0 & \lambda \cos \omega t \\ \lambda \cos \omega t & 0 \end{pmatrix} \quad (\lambda \text{ حقیقی})$$

الف) در $t = 0$ سیستم در حالت اول قرار دارد که این حالت را با

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

نشان می‌دهیم. با استفاده از نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان و فرض این که $E_1^0 - E_2^0$ نزدیک به $\pm \hbar\omega$

نیست. عبارتی بیابید که احتمال پیدا شدن سیستم در حالت دوم که با

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

نمایش داده می‌شود، را نشان دهد. این عبارت را به صورتی تابعی از t نشان دهید ($t > 0$)

ب) چرا این روش وقتی که $E_1^0 - E_2^0$ نزدیک به $\pm \hbar\omega$ نیست، جواب نمی‌دهد؟

۲۶- یک نوسان گر هماهنگ ساده‌ی یک بعدی به فرکانس زاویه‌ای ω ، تحت یک نیروی (نه پتانسیل) وابسته به زمان که از نظر فضایی یکنواخت است، قرار گرفته است.

$$F(t) = \frac{(F_0 \tau / \omega)}{(\tau^2 + t^2)}, \quad -\infty < t < \infty$$

در $t = -\infty$ می‌دانیم که نوسان گر در حالت پایه بوده است. با استفاده از نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان مرتبه‌ی اول احتمال این که نوسان گر در $t = +\infty$ در نخستین حالت برانگیخته باشد را محاسبه کنید.

به مبارزه طلبیدن حرفه‌ای‌ها: $F(t)$ چنان بهنجار شده است که تکانه‌ی

$$\int F(t) dt$$

که به نوسان گر وارد می‌شود همواره یکسان است. یعنی مستقل از τ است. ولی برای $1/\omega \gg \tau$ ، احتمال تحریک به طور محسوس قابل اغماض است. آیا این منطقی است؟ [آرایه‌ی ماتریسی x :

$$\langle n' | x | n \rangle = (\hbar / 2m\omega)^{1/2} (\sqrt{n} \delta_{n', n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{n', n+1})$$

۲۷- فرض کنید که ذره‌ای در یک بعد تحت اثر یک پتانسیل وابسته به زمان حرکت می‌کند. فرض می‌کنیم که ترازهای انرژی و ویژه توابع مربوط به آن‌ها را در این مسأله می‌دانیم. اکنون ذره را در معرض یک ضربه‌ی متحرک قرار می‌دهیم که با پتانسیل وابسته به زمان

$$V(t) = A\delta(x - ct)$$

نشان داده می‌شود.

الف) فرض کنید که در $t = -\infty$ ذره در حالت پایه باشد که ویژه توابع انرژی آن به شکل $\langle x | i \rangle = u_i(x)$ است. احتمال یافتن سیستم در یک حالت برانگیخته با ویژه تابع انرژی $\langle x | f \rangle = u_f(x)$ در $t = +\infty$ چقدر است؟

ب) به طور فیزیکی نتیجه‌ی قسمت الف) را با توجه به پالس تابع δ به عنوان یک برهم‌نهی از اختلالات هماهنگ تفسیر کنید. یادآوری می‌کنیم که

$$\delta(x - ct) = \frac{1}{2\pi c} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega[(x/c) - t]}$$

روی نقش پایستگی انرژی تأکید می‌کنیم که در مکانیک کوانتومی حتی وقتی که اختلال برای زمان بسیار طولانی روشن است، برقرار می‌باشد.

۲۸- یک اتم هیدروژن در حالت پایه $[(n, l, m) = (1, 0, 0)]$ بین صفحات یک خازن قرار گرفته است. یک میدان (نه پتانسیل) وابسته به زمان اما یکنواخت فضایی به شکل زیر اعمال می‌شود

$$\mathbf{E} = \begin{cases} 0 & \text{برای } t < 0, \\ \mathbf{E}_0 e^{-t/\tau} & \text{برای } t > 0 \end{cases} \quad (\mathbf{E}_0 \text{ در جهت مثبت } z \text{ است.})$$

با استفاده از نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان، احتمال این که اتم در $t \gg \tau$ ، در هر یک از سه حالت $2p$ ($(n, l, m) = (2, 1, \pm 1)$ یا $(2, 0, 0)$) یافت شود را بیابید. این مسأله را برای حالت $2s$ ، $(n, l, m) = (2, 0, 0)$ نیز دوباره حل کنید. نیازی نیست که انتگرال‌های شعاعی را حل کنید. اما سایر انتگرال‌گیری‌ها را انجام دهید. (با توجه به زوایا و زمان)

۲۹- یک سیستم مرکب که از دو سیستم اسپین $\frac{1}{2}$ ساخته شده است را در نظر بگیرید. برای $t < 0$ هامیلتونی به اسپین وابسته نیست و می‌توان آن را با تنظیم مناسب مقیاس انرژی، صفر در نظر گرفت. برای $t > 0$ هامیلتونی با

$$H = \left(\frac{4\Delta}{\hbar^2} \right) \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$$

داده می‌شود. فرض کنید که سیستم در $t \leq 0$ در حالت $|+\rangle$ قرار دارد. احتمال پیدا شدن در هر یک از حالت‌های $|+\rangle$ ، $|+\rangle$ ، $|+\rangle$ ، $|+\rangle$ و $|-\rangle$ را در زمان‌های بعدی به صورت تابعی از زمان بنویسید: الف) این مسأله را به طور صریح حل کنید.

ب) با در نظر گرفتن H به عنوان اختلالی که در $t = 0$ روشن می‌شود، مسأله را به اعتبار نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان حل کنید. تحت چه شرایطی (ب) نتایج درستی می‌دهد.

۳۰- یک سیستم دو ترازوی با $E_1 < E_2$ در نظر بگیرید. پتانسیل وابسته به زمانی که دو حالت را به هم مرتبط می‌کند به شکل زیر است

$$V_{11} = V_{22} = 0, \quad V_{12} = \gamma e^{i\omega t}, \quad V_{21} = \gamma e^{-i\omega t} \quad (\gamma \text{ حقیقی است})$$

در زمان $t = 0$ می‌دانیم که فقط تراز پایینی اشغال شده است، یعنی $c_1(0) = 1$ ، $c_2(0) = 0$ است.

الف) با حل صریح معادله دیفرانسیل جفت‌شده‌ی

$$i\hbar \dot{c}_k = \sum_{n=1}^2 V_{kn}(t) e^{i\omega_{kn}t} c_n, \quad (k=1,2)$$

$|c_1(t)|^2$ و $|c_2(t)|^2$ برای $t > 0$ بیابید.

ب) مسأله را با استفاده از نظریه اختلال وابسته به زمان تا پایین ترین مرتبه ی غیر صفر دوباره حل کنید. برای مقادیر کوچک γ ، دو جواب خود را با هم مقایسه کنید. در مورد دو حالت زیر به طور جداگانه بحث کنید:

(i) ω خیلی با ω_{21} متفاوت است و (ii) ω نزدیک به ω_{21} است.

جواب (الف): (فرمول رابی)

$$|c_2(t)|^2 = \frac{\gamma^2/\hbar^2}{\gamma^2/\hbar^2 + (\omega - \omega_{21})^2/4} \sin^2 \left\{ \left[\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{(\omega - \omega_{21})^2}{4} \right]^{1/2} t \right\}$$

$$|c_1(t)|^2 = 1 - |c_2(t)|^2$$

۳۱- نشان دهید اختلالی که به طور آهسته روشن می شود $V \rightarrow Ve^{i\omega t}$ می تواند سهمی از جمله ی دوم در (۵-۶-۳۶) را ایجاد کند. (کتاب بیم ۱۹۶۹، صفحه ی ۲۵۷ را ببینید)

۳۲- الف) مسأله ی پوزیترونوم، مسأله ی ۳ فصل ۳، را در نظر بگیرید. در حضور میدان مغناطیسی ایستا و یکنواخت B حول محور z هامیلتونی با رابطه ی

$$H = AS_1 \cdot S_2 + \left(\frac{eB}{m_e c} \right) (S_{1z} - S_{2z})$$

داده می شود. این مسأله را برای به دست آوردن ترازهای انرژی هر چهار حالت، با استفاده از نظریه اختلال مستقل از زمان تبهگن حل کنید (به جای قطری کردن ماتریس هامیلتونی) جملات اول و دوم را در عبارت H به ترتیب H_0 و V بگیرید. نتایج خود را با عبارت های دقیق مقایسه کنید:

$$E = - \left(\frac{\hbar^2 A}{4} \right) \left[1 \pm 2 \sqrt{1 + 4 \left(\frac{eB}{m_e c \hbar A} \right)^2} \right] \quad \left. \begin{array}{l} m = 0 \quad \text{یگانه} \\ m = 0 \quad \text{سه گانه} \end{array} \right\} \text{ برای}$$

$$E = \frac{\hbar^2 A}{4} \quad m = \pm 1 \quad \text{برای}$$

که در آن سه گانه (یا یگانه) $m = 0$ بیان گر حالتی است که به ازای $B \rightarrow 0$ با $m = 0$ کاملاً سه گانه (یا یگانه) است.

ب) حال سعی می کنیم که با معرفی یک میدان مغناطیسی نوسانی با فرکانسی صحیح بین حالت های $m = 0$ ، گذار ایجاد کنیم (از طریق تحریک تابشی و جذب). جهت گیری میدان مغناطیسی باید در امتداد محور z (یا y)؟ انتخاب خود را توضیح دهید. (میدان ایستای اصلی را تماماً در راستای z فرض کرده ایم)

ج) ویژه بردارها را تا مرتبه اول را محاسبه کنید.

۳۲' - مسأله‌ی ۳۲ را برای هامیلتونی اتم هیدروژن تکرار کنید:

$$H = AS_1 \cdot S_2 + \left(\frac{eB}{m_e c} \right) S_1 \cdot B$$

که در آن در جمله‌ی فوق ظریف $AS_1 \cdot S_2$ تا هنگامی که S_2 اسپین پروتون دارد S_1 دارای اسپین الکترون است. [توجه کنید که این مسأله نسبت به مورد پوزیترونیم از تقارن کمتری برخوردار است].

۳۳- تابش خودبه‌خودی یک فوتون از یک اتم پراکنجسته را در نظر بگیرید. این فرآیند به گذار $E1$ معروف است. فرض کنید که عدد کوانتومی مغناطیسی اتم یک واحد کاهش یابد. توزیع زاویه‌ای فوتون تابشی چگونه خواهد شد؟ همچنین در مورد قطبش فوتون با توجه به پایستگی تکانه‌ی زاویه‌ای برای کل سیستم (اتم به‌علاوه‌ی فوتون) بحث کنید.

۳۴- یک اتم که از یک الکترون و تریتون (${}^3\text{H}$) تک بار ($Z=1$) ساخته شده است را در نظر بگیرید. در آغاز در حالت پایه‌ی خود ($n=1, l=0$) قرار دارد. فرض کنید که بار هسته ناگهان به‌اندازه‌ی یک واحد افزایش یابد (به‌طور واقعی با تابش یک الکترون و یک پاد نوترینو). به این معنی که هسته‌ی تریتون به هسته‌ی هلیوم ($Z=2$) به جرم ${}^3\text{He}$ تبدیل شود. احتمال این که سیستم در حالت پایه‌ی یون هلیوم حاصل یافت شود را به‌دست آورید.

تابع موج هیدروژن با رابطه‌ی

$$\psi_{n=1, l=0}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$$

داده می‌شود.

۳۵- حالت پایه‌ی یک اتم هیدروژن ($n=1, l=0$) در معرض یک پتانسیل وابسته به زمان به‌شکل زیر قرار می‌گیرد.

$$V(\mathbf{x}, t) = V_0 \cos(kz - \omega t)$$

با استفاده از نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان، عبارتی برای نرخ گذار این که الکترونی با تکانه‌ی \mathbf{p} تابش شود به‌دست آورید. به‌طور خاص نشان دهید که چطور می‌توانید توزیع زاویه‌ای الکترون خروجی را محاسبه کنید (برحسب θ و ϕ که با توجه به محور Z تعریف می‌شوند). به‌طور خلاصه در مورد شباهت‌ها و تمایزات بین این مسأله و اثر فوتوالکتریک (به‌طور واقعی تر) بحث کنید. (توجه: برای تابع موج ابتدایی، مسأله‌ی ۳۴ را ببینید. اگر یک مسأله‌ی بهنجارش داشتید تابع موج نهایی می‌توانست به‌صورت

$$\psi_f(\mathbf{x}) = \left(\frac{1}{L^{3/2}} \right) e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} / \hbar}$$

باشد که در آن L خیلی بزرگ است، اما شما باید بتوانید نشان دهید که اثرات قابل مشاهده مستقل از L هستند.

۳۶- عبارتی برای چگالی حالت‌های ذره‌ی آزاد در دو بعد به دست آورید. یعنی دو بعد در امتداد:

$$\rho(E) dE d\Omega = \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \left(\frac{mk}{\hbar^2} \right) dE d\Omega, \quad \left(\mathbf{k} \equiv \frac{\mathbf{p}}{\hbar}, E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right)$$

جواب شما باید تابعی از k (یا E) ضربدر $dE d\phi$ باشد. که در آن ϕ زاویه‌ی قطبی است و جهت تکانه را در دو بعد نشان می‌دهد.

۳۷- یک ذره به جرم m مجبور به حرکت در یک بعد است و با یک چاه پتانسیل بی‌نهایت به $0 < x < L$ محدود شده است:

$$V = \infty \quad \text{برای } x < 0, x > L,$$

$$V = 0 \quad \text{برای } 0 \leq x \leq L.$$

عبارتی برای چگالی (یعنی تعداد حالت‌ها بر بازه‌ی واحد انرژی) حالت‌های انرژی بالا به شکل تابعی از E بیابید. (بعد پاسخ خود را بیازمایید)

۳۸- نور قطبیده‌ی خطی با فرکانس زاویه‌ای ω ، به یک اتم الکترونی برخورد می‌کند که تابع موج این اتم را می‌توان به‌طور تقریبی، حالت پایه‌ی یک نوسان‌گر هماهنگ همسانگرد سه بعدی با فرکانس زاویه‌ای ω_0 در نظر گرفت. نشان دهید که سطح مقطع برخورد برای خروج فوتوالکترون عبارت است از:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4\alpha\hbar^2 k_f^3}{m^2 \omega \omega_0} \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega_0}} \exp\left\{ -\frac{\hbar}{m\omega_0} \left[k_f^2 + \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \right] \right\} \\ \times \sin^2\theta \cos^2\phi \exp\left[\left(\frac{2\hbar k_f \omega}{m\omega_0 c} \right) \cos\theta \right]$$

الکترون خروجی با تکانه‌ی $\hbar\mathbf{k}_f$ را می‌توان در حالت موج تخت در نظر گرفت. (سیستم مختصات مورد استفاده در شکل ۵-۱۰ نشان داده شده است)

۳۹- احتمال $| \phi(\mathbf{p}') |^2 d^3p'$ تکانه‌ی \mathbf{p}' را برای حالت پایه‌ی اتم هیدروژن بیابید. (این تمرین خوبی برای تبدیلات فوریه‌ی سه بعدی است. برای انتگرال‌گیری زاویه‌ای، محور z را در جهت \mathbf{p} بگیرید.)

۴۰- عبارتی برای $\tau(2p \rightarrow 1s)$ برای اتم هیدروژن بیابید. ثابت کنید که این برابر با 1.6×10^{-9} s است.

فصل ششم

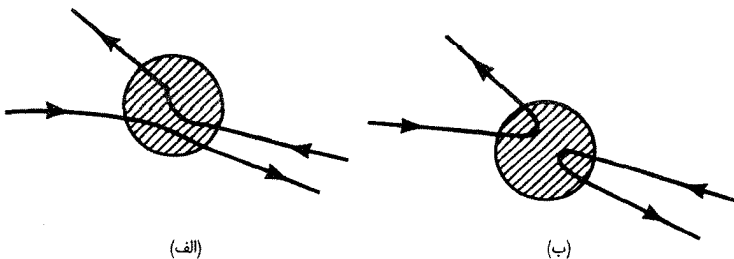
ذرات همسان

این فصل کوتاه به بحث درباره‌ی اثرات قابل توجهی که از همسانی ذرات ناشی می‌شود، اختصاص یافته است. همچنین در این جا به اتم‌های پیچیده‌تری نسبت به هیدروژن یا اتم‌های هیدروژن گونه خواهیم پرداخت.

۱.۶ تقارن جایگشتی

در فیزیک کلاسیک، حتی وقتی که ذرات بسیار شبیه به هم به نظر برسند، می‌توان آن‌ها را از هم تشخیص داد. وقتی که در سیستمی ذره‌ی ۱ و ذره‌ی ۲ داشته باشیم، می‌توانیم، مسیر ذره‌ی ۱ و ذره‌ی ۲ را به‌طور جداگانه در هر بازه‌ی زمانی دلخواهی پیگیری کنیم. برای بیان این موضوع، می‌توانید رنگ یکی از آن‌ها را آبی و رنگ دیگری را قرمز در نظر بگیرید و آنگاه ببینید که در گذر زمان ذره‌ی آبی چگونه حرکت می‌کند و ذره‌ی قرمز چگونه جابه‌جا می‌شود.

اما در مکانیک کوانتومی، ذرات همسان، واقعاً از همدیگر غیرقابل تشخیص هستند. این به‌خاطر آن است که ما نمی‌توانیم بیش از یک مجموعه‌ی کامل از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاپذیر برای هر یک از ذرات بیابیم. به‌علاوه، نمی‌توانیم مثلاً با رنگ آبی یک ذره را بر چسب بزنیم. همچنین نمی‌توانیم مسیر آن را دنبال کنیم، چون اندازه‌گیری مکان یک ذره در هر لحظه الزاماً موجب برهم خوردن سیستم می‌شود. به‌طور خاص دو وضعیت (الف) و (ب) که در شکل ۶-۱ نمایش داده شده است را نمی‌توان از هم تشخیص داد. حتی برای این مفهوم، در این جا تعریفی وجود ندارد.



شکل ۶-۱: دو مسیر متفاوت (الف) و (ب)، برای یک سیستم با دو الکترون. به‌طور کلی نمی‌توانیم ادعا کنیم الکترون از کدام مسیر عبور می‌کند.

برای ساده تر شدن، فقط دو ذره را در نظر می گیریم. فرض کنید یکی از ذره ها که به آن ذره ی ۱ می گوئیم با $|k'\rangle$ مشخص شود که در آن k' یک اندیس تجمعی برای یک مجموعه ی کامل از مشاهده پذیرها است. به همین صورت کت ذره ی دیگر را $|k''\rangle$ می نامیم. کت حالت دو ذره را می توان به شکل حاصل ضرب:

$$|k'\rangle|k''\rangle \quad (1-1-6)$$

نوشت. می دانیم که کت اول مربوط به ذره ی ۱ و کت دوم به ذره ی ۲ است. همچنین می توانیم:

$$|k''\rangle|k'\rangle \quad (2-1-6)$$

را در نظر بگیریم که در آن ذره ی ۱ با $|k''\rangle$ و ذره ی ۲ با $|k'\rangle$ مشخص می شود. اگرچه دو ذره تمایزناپذیر هستند، حائز اهمیت است که بدانیم وقتی $k' \neq k''$ است $(1-1-6)$ و $(2-1-6)$ از هم متمایزند. در واقع وقتی $k' \neq k''$ است این دو بر هم عمود هستند.

فرض کنید که روی یک سیستم دو ذره ای اندازه گیری انجام می دهیم. ممکن است که k' را برای ذره ی اول و k'' را برای دیگری به دست آوریم. اما نمی دانیم که کدام کت حالت $|k'\rangle|k''\rangle$ و $|k''\rangle|k'\rangle$ یا ترکیب خطی از این دو توصیف کننده ی سیستم است. به طریق دیگر، همه کت ها باید به شکل:

$$c_1|k'\rangle|k''\rangle + c_2|k''\rangle|k'\rangle \quad (3-1-6)$$

باشند. وقتی اندازه گیری انجام شد، این کت به یک مجموعه ی همسان از ویژه مقادیر منجر می شود. به این مسأله، **تبهگنی مبادله ای** گفته می شود. تبهگنی مبادله ای مشکلی را به وجود می آورد، چون برخلاف مورد تک ذره، تعیین ویژه مقادیر یک مجموعه ی کامل از مشاهده پذیرها به طور کامل کت حالت را مشخص نمی کند. راه طبیعی برای اجتناب از این مشکل کاملاً ابتکاری است. اما قبل از پرداختن بیشتر به این مطلب، بگذارید که ریاضیات تقارن جایگشتی را گسترش دهیم.

عمل گر جایگشت P_{12} را با:

$$P_{12}|k'\rangle|k''\rangle = |k''\rangle|k'\rangle \quad (4-1-6)$$

تعریف می کنیم. واضح است که:

$$P_{21} = P_{12} \quad \text{and} \quad P_{12}^2 = 1 \quad (5-1-6)$$

تحت اثر P_{12} ، ذره ی ۱ که حالت k' را دارد حالت k'' را اخذ می نماید و ذره ی ۲ که حالت k'' را داشت، حالت k' را می گیرد. به عبارت دیگر، این عملگر ۱ را با ۲ عوض می کند.

در عمل اغلب، با مشاهده‌پذیرهایی مواجه می‌شویم که برچسب‌های ذره را با خود دارند. برای مثال در $\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$ یک سیستم دو الکترونی، \mathbf{S}_1 (یا \mathbf{S}_2) بیان‌کننده‌ی عملگر اسپین ذره‌ی ۱ (یا ۲) است. برای سادگی مورد خاصی را در نظر می‌گیریم که در آن کت حالت دو ذره‌ای به‌طور کامل با ویژه‌مقادیر تک مشاهده‌پذیر A برای هر ذره مشخص می‌شود:

$$A_1|a'\rangle|a''\rangle = a'|a'\rangle|a''\rangle \quad (۶-۱-۶ \text{ الف})$$

$$A_2|a'\rangle|a''\rangle = a''|a'\rangle|a''\rangle \quad (۶-۱-۶ \text{ ب})$$

که در آن اندیس A ، برچسب‌های ذره را تعیین می‌کند و A_1 و A_2 به ترتیب مشاهده‌پذیرهای A برای ۱ و ۲ هستند. با اعمال P_{12} به دو سمت (۶-۱-۶ الف) داریم:

$$\begin{aligned} P_{12}A_1P_{12}^{-1}P_{12}|a'\rangle|a''\rangle &= a'P_{12}|a'\rangle|a''\rangle \\ &= P_{12}A_1P_{12}^{-1}|a''\rangle|a'\rangle = a'|a''\rangle|a'\rangle \end{aligned} \quad (۷-۱-۶)$$

اگر

$$P_{12}A_1P_{12}^{-1} = A_2 \quad (۸-۱-۶)$$

باشد، رابطه‌ی (۷-۱-۶) با (۶-۱-۶ ب) سازگار است. از رابطه‌ی (۸-۱-۶) برمی‌آید که P_{12} برچسب‌های ذرات مشاهده‌پذیر را تغییر می‌دهد.

اکنون بگذارید تا هامیلتونی یک سیستم با دو ذره‌ی همسان را در نظر بگیریم. مشاهده‌پذیرها، نظیر تکانه و عملگرهای مکان، الزاماً باید به‌طور متقارن در هامیلتونی ظاهر شوند. برای مثال:

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + V_{\text{pair}}(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|) + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}_1) + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}_2) \quad (۹-۱-۶)$$

در این جا برهم‌کنش‌های دوسویه‌ی بین دو ذره را از برهم‌کنش با پتانسیل خارجی جدا کرده‌ایم. پیداست که داریم:

$$P_{12}HP_{12}^{-1} = H \quad (۱۰-۱-۶)$$

که این H ساخته شده از مشاهده‌پذیرهای دو ذره‌ی همسان است. از آن جا که P_{12} با H جابه‌جا می‌شود، می‌توان گفت که P_{12} ثابت حرکت است. ویژه‌مقادیر P_{12} به‌خاطر (۹-۱-۶) عبارتند از $+1$ و -1 . بنابراین اگر کت حالت دو ذره در ابتدا متقارن (یا پادمقارن) باشد در تمام زمان‌های بعد بدون تغییر باقی می‌ماند.

اگر به دنبال ویژه‌کت‌های P_{12} باشیم، دو ترکیب خطی خاص را به‌دست می‌آوریم:

$$|k'k''\rangle_+ \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (|k'\rangle|k''\rangle + |k''\rangle|k'\rangle) \quad (۱۱-۱-۶ \text{ الف})$$

و

$$|k'k''\rangle_- \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|k'\rangle|k''\rangle - |k''\rangle|k'\rangle) \quad (۱-۱۱-۱۶)$$

می‌توانیم تقارن و پاد تقارنی را به شکل زیر تعریف کنیم:

$$S_{12} \equiv \frac{1}{2}(1 + P_{12}), \quad A_{12} \equiv \frac{1}{2}(1 - P_{12}) \quad (۱-۱۲-۱۶)$$

اگر S_{12} (یا A_{12}) را در یک ترکیب خطی دلخواه از $|k'\rangle|k''\rangle$ و $|k''\rangle|k'\rangle$ اثر دهیم، کت حاصل الزاماً متقارن (یا پادمتقارن) خواهد بود. به سادگی می‌توان این مسأله را به شکل زیر نشان داد:

$$\begin{aligned} & \begin{Bmatrix} S_{12} \\ A_{12} \end{Bmatrix} [c_1|k'\rangle|k''\rangle + c_2|k''\rangle|k'\rangle] \\ &= \frac{1}{2}(c_1|k'\rangle|k''\rangle + c_2|k''\rangle|k'\rangle) \pm \frac{1}{2}(c_1|k''\rangle|k'\rangle + c_2|k'\rangle|k''\rangle) \\ &= \frac{c_1 \pm c_2}{2}(|k'\rangle|k''\rangle \pm |k''\rangle|k'\rangle) \end{aligned} \quad (۱-۱۳-۱۶)$$

می‌توان این ملاحظات را برای یک سیستم با ذرات بسیار همسان گسترش داد. تعریف می‌کنیم.

$$\begin{aligned} & P_{ij}|k'\rangle|k''\rangle \dots |k^i\rangle|k^{i+1}\rangle \dots |k^j\rangle \dots \\ &= |k'\rangle|k''\rangle \dots |k^j\rangle|k^{i+1}\rangle \dots |k^i\rangle \dots \end{aligned} \quad (۱-۱۴-۱۶)$$

پیدا است که همانند قبل:

$$P_{ij}^2 = 1 \quad (۱-۱۵-۱۶)$$

و ویژه مقادیر P_{ij} ، $+1$ و -1 هستند. اما توجه به این نکته مهم است که:

$$[P_{ij}, P_{kl}] \neq 0 \quad (۱-۱۶-۱۶)$$

کار کردن با سیستمی که سه ذره همسان دارد، ارزشمند است. نخست، $3! = 6$ کت حالت ممکن

وجود دارد:

$$|k'\rangle|k''\rangle|k'''\rangle \quad (۱-۱۷-۱۶)$$

که در آن k' ، k'' و k''' با هم متمایزند. بنابراین تبهگنی شش گانه وجود دارد. اگر هنوز به دنبال حالت کاملاً متقارن یا حالت کاملاً پادمتقارن باشیم، تنها می‌توانیم یک ترکیب خطی تشکیل دهیم. صریحاً داریم:

$$\begin{aligned} |k'k''k'''\rangle_{\pm} &\equiv \frac{1}{\sqrt{6}}\{ |k'\rangle|k''\rangle|k'''\rangle \pm |k''\rangle|k'\rangle|k'''\rangle \\ &+ |k''\rangle|k'''\rangle|k'\rangle \pm |k'''\rangle|k''\rangle|k'\rangle \\ &+ |k'''\rangle|k'\rangle|k''\rangle \pm |k'\rangle|k'''\rangle|k''\rangle \} \end{aligned} \quad (۱-۱۸-۱۶)$$

این دو، ویژه کت‌های همزمان P_{12} ، P_{23} و P_{13} هستند. یادآوری می‌کنیم که روی هم رفته شش کت حالت مستقل وجود دارد. بنابراین چهار کت مستقل وجود دارد که نه کاملاً متقارن هستند و نه کاملاً پادمقارن. با تعریف زیر می‌توانیم عملگر P_{123} را معرفی کنیم:

$$P_{123}(|k'\rangle|k''\rangle|k'''\rangle) = |k''\rangle|k'''\rangle|k'\rangle \quad (19-1-6)$$

توجه کنید که $P_{123} = P_{12}P_{13}$ است. چون:

$$P_{12}P_{13}(|k'\rangle|k''\rangle|k'''\rangle) = P_{12}(|k'''\rangle|k''\rangle|k'\rangle) = |k''\rangle|k'''\rangle|k'\rangle \quad (20-1-6)$$

در نوشتن (18-1-6) فرض کردیم که k' ، k'' و k''' همه با هم متفاوتند. اگر دو تا از آن‌ها بر هم منطبق شوند، داشتن یک حالت کاملاً نامتقارن، غیرممکن خواهد شد. حالت متقارن کامل با:

$$|k'k'k''\rangle_+ = \frac{1}{\sqrt{3}}(|k'\rangle|k'\rangle|k''\rangle + |k'\rangle|k''\rangle|k'\rangle + |k''\rangle|k'\rangle|k'\rangle) \quad (21-1-6)$$

داده می‌شود که در آن ضریب بهنجارش برابر با $\sqrt{2!/3!}$ است. برای موارد کلی‌تر، عامل بهنجارش

$$\sqrt{\frac{N_1!N_2!\cdots N_n!}{N!}} \quad (22-1-6)$$

را داریم. که در آن N تعداد کل ذرات و N_i تعداد تکرار $|k^{(i)}\rangle$ است.

۲.۶ اصل موضوعی متقارن‌سازی

تا اینجا در مورد این که طبیعت چه مزیتی برای حالت‌های کاملاً متقارن یا کاملاً نامتقارن در نظر گرفته است، بحث نکرده‌ایم. به این نتیجه می‌رسیم که سیستم‌های شامل N ذره‌ی همسان تحت تبادل و تغییر هر جفت از ذرات، کاملاً متقارن هستند. در این مورد گفته می‌شود که ذرات در آمار بوز-اینشتین (B-E) صدق می‌کنند و به آن‌ها بوزون گفته می‌شود. در حالت کاملاً پادمقارن ذرات در آمار فرمی-دیراک (F-D) صدق کرده و بنابراین به آن‌ها فرمیون گفته می‌شود.

$$P_{ij}|N \text{ بوزون همسان}\rangle = +|N \text{ بوزون همسان}\rangle \quad (2-6-الف)$$

$$P_{ij}|N \text{ فرمیون همسان}\rangle = -|N \text{ فرمیون همسان}\rangle \quad (2-6-ب)$$

که در آن P_{ij} همان عملگر جایگشت است که برای هر i و j اختیاری، ذره i را با ذره j عوض می‌کند. این یک واقعیت تجربی است که تقارن مخلوط اتفاق نمی‌افتد.

حتی قابل توجه‌تر این است که، ارتباطی بین اسپین ذره و آماری که ذره از آن تبعیت می‌کند وجود دارد:

$$\text{ذراتی که اسپین نیم صحیح دارند فرمیون هستند.} \quad (۶-۲-۲الف)$$

$$\text{ذراتی که اسپین صحیح دارند بوزون هستند.} \quad (۶-۲-۲ب)$$

در این جا ذرات می‌توانند مرکب باشند. مثلاً هسته ${}^3\text{He}$ درست همانند e^- یا پروتون، فرمیون است و هسته ${}^4\text{He}$ همانند مزون π^0 و π^\pm ، بوزون است.

این شرط آمار اسپینی، همان‌طور که می‌دانیم، قانون دقیقی در طبیعت است که توضیح دانسته‌ای ندارد. در چارچوب مکانیک کوانتومی غیرنسبیتی، این اصل به‌عنوان یک اصل موضوعه‌ی تجربی پذیرفته شده است. اما در نظریه‌ی کوانتوم نسبیتی، می‌توان اثبات می‌کرد که ذراتی با اسپین نیم صحیح نمی‌توانند بوزون باشند، همچنین ذرات با اسپین صحیح نمی‌توانند فرمیون باشند.

یکی از نتایج بلادرنگ فرمیون بودن الکترون، این است که الکترون باید در اصل طرد پاؤلی صدق کند. به این معنا که هیچ دو الکترونی نمی‌توانند حالت یکسانی را اشغال کنند. این از آن جا ناشی می‌شود که حالتی همچون $|k'\rangle|k''\rangle$ الزاماً متقارن است که این برای یک فرمیون غیرممکن است. مشهور است که اصل طرد پاؤلی، سنگ بنای فیزیک اتمی و مولکولی و همچنین کل شیمی است.

برای روشن شدن تفاوت‌های چشمگیر بین فرمیون‌ها و بوزون‌ها، بگذارید دو ذره را در نظر بگیریم که هر کدام از آن‌ها تنها می‌تواند دو حالت را اشغال می‌کند. آن‌ها را با k' و k'' نشان می‌دهیم. برای سیستمی که دو فرمیون دارد انتخابی نداریم. تنها یک امکان وجود دارد:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|k'\rangle|k''\rangle - |k''\rangle|k'\rangle) \quad (۶-۲-۳)$$

اما برای بوزون‌ها سه حالت وجود دارد:

$$|k'\rangle|k'\rangle, \quad |k''\rangle|k''\rangle, \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|k'\rangle|k''\rangle + |k''\rangle|k'\rangle) \quad (۶-۲-۴)$$

در عوض برای ذرات کلاسیکی آمار ماکسول-بولتزمن (M-B) که هیچ قید و شرطی روی تقارن وجود ندارد، روی هم رفته، چهار حالت مستقل از هم داریم:

$$|k'\rangle|k''\rangle, \quad |k''\rangle|k'\rangle, \quad |k'\rangle|k'\rangle, \quad |k''\rangle|k''\rangle \quad (۶-۲-۵)$$

می‌بینیم که در مورد فرمیون، غیرممکن است که دو ذره حالت یکسانی را بگیرند. اما در مورد بزون‌ها، دو حالت از سه حالت مجاز، مربوط به وقتی است که دو ذره حالت یکسانی را اخذ کرده‌اند. در مورد آمار کلاسیکی (M-B)، از چهار حالت مجاز دو حالت مربوط به این است که دو ذره حالت یکسانی دارند. به این ترتیب فرمیون‌ها کمترین اجتماع‌پذیری را دارند. در عوض بزون‌ها اجتماعی‌ترین ذرات هستند، آن‌ها واقعاً دوست دارند حالت یکسانی داشته باشند. حتی بیشتر از ذرات کلاسیکی که از آمار M-B تبعیت می‌کنند.

اختلاف بین فرمیون‌ها و بزون‌ها در دمای پایین بیشتر بروز می‌یابد. سیستمی متشکل از بزون‌ها، نظیر ${}^4\text{He}$ مایع، این تمایل را از خود نشان می‌دهد که در دماهای به شدت کم، تمام ذرات را به پایین، مثلاً به حالت پایه برسد. این حالت به شرایط بز-انیشتین معروف است. مشخصه‌ای که در سیستمی متشکل از فرمیون‌ها وجود ندارد.

۳.۶ سیستم دو الکترونی

اکنون بگذارید که یک سیستم دو الکترونی را در نظر بگیریم. ویژه مقدار عملگر جایگست الزاماً برابر با ۱- است. فرض کنید کت‌های پایه‌ای که ما استفاده می‌کنیم با $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, m_{s1}$ و m_{s2} مشخص شوند که m_{s1} و m_{s2} به ترتیب بیان‌گر اعداد کوانتومی اسپین مغناطیسی الکترون ۱ و الکترون ۲ هستند.

می‌توانیم تابع موج سیستم دو الکترونی را به شکل ترکیبی خطی از کت‌های حالت با ویژه براهای $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, m_{s1}$ و m_{s2} به شکل زیر نشان دهیم:

$$\psi = \sum_{m_{s1}} \sum_{m_{s2}} C(m_{s1}, m_{s2}) \langle \mathbf{x}_1, m_{s1}; \mathbf{x}_2, m_{s2} | \alpha \rangle \quad (1-3-6)$$

اگر هامیلتونی با $\mathbf{S}_{\text{tot}}^2$ جابه‌جا شود:

$$[\mathbf{S}_{\text{tot}}^2, H] = 0 \quad (2-3-6)$$

آن‌گاه انتظار می‌رود که ویژه توابع انرژی، ویژه تابع $\mathbf{S}_{\text{tot}}^2$ باشد و ψ به صورت:

$$\psi = \phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \chi \quad (3-3-6)$$

نوشته شود. آن‌گاه انتظار داریم که تابع اسپین χ به یکی از صورت‌های زیر باشد:

$$\chi(m_{s1}, m_{s2}) = \begin{cases} \chi_{++} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{+-} + \chi_{-+}) & \text{سه گانه (متقارن)} \\ \chi_{--} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{+-} - \chi_{-+}) & \text{یگانه (پادمتقارن)} \end{cases} \quad (۴-۳-۶)$$

که در آن χ_{+-} متناظر با $m_{s1} = \frac{1}{2}, m_{s2} = -\frac{1}{2}$ است. توجه کنید که توابع سه گانه ی اسپین، همگی متقارن هستند. این منطقی به نظر می رسد، چون عملگر نردبانی $S_{1-} + S_{2-}$ با P_{12} جابه جا می شود و حالت $|+\rangle|+\rangle$ زوج است.

توجه می کنیم که:

$$\langle \mathbf{x}_1, m_{s1}; \mathbf{x}_2, m_{s2} | P_{12} | \alpha \rangle = \langle \mathbf{x}_2, m_{s2}; \mathbf{x}_1, m_{s1} | \alpha \rangle \quad (۵-۳-۶)$$

بنابراین آمار فرمی دیراک الزام می کند که:

$$\langle \mathbf{x}_1, m_{s1}; \mathbf{x}_2, m_{s2} | \alpha \rangle = - \langle \mathbf{x}_2, m_{s2}; \mathbf{x}_1, m_{s1} | \alpha \rangle \quad (۶-۳-۶)$$

پیدا است که می توان P_{12} را به شکل

$$P_{12} = P_{12}^{(فضایی)} P_{12}^{(اسپینی)} \quad (۷-۳-۶)$$

نوشت. که در آن $P_{12}^{(فضایی)}$ فقط مختصات مکانی را جابه جا می کند در حالی که $P_{12}^{(اسپینی)}$ حالت های اسپینی را تغییر می دهد. بیان $P_{12}^{(اسپینی)}$ به شکل

$$P_{12}^{(اسپینی)} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{4}{\hbar^2} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \right) \quad (۸-۳-۶)$$

می تواند جالب باشد. که از رابطه ی

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = \begin{cases} \frac{\hbar^2}{4} & \text{سه گانه} \\ -\frac{3\hbar^2}{4} & \text{یگانه} \end{cases} \quad (۹-۳-۶)$$

ناشی می شود.

با توجه به (۳-۳-۶)

$$| \alpha \rangle \rightarrow P_{12} | \alpha \rangle \quad (۱۰-۳-۶)$$

معادل است با:

$$\phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \rightarrow \phi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1), \quad \chi(m_{s_1}, m_{s_2}) \rightarrow \chi(m_{s_2}, m_{s_1}) \quad (۱۱-۳-۶)$$

این رابطه به اضافه‌ی (۶-۳-۶) منجر می‌شوند به این که اگر قسمت فضایی تابع موج متقارن (یا پادمقارن) باشد قسمت اسپینی باید پادمقارن (یا متقارن) باشد. در نتیجه، حالت سه گانه‌ی اسپین با تابع فضایی پادمقارن ترکیب می‌شود و حالت اسپینی یگانه با تابع فضایی متقارن اجین می‌گردد.

بخش فضایی تابع موج $\phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ تفسیر احتمالاتی معمول را مهیا می‌کند. احتمال یافتن الکترون ۱ در المان حجم d^3x_1 به مرکزیت \mathbf{x}_1 و یافتن الکترون ۲ در المان حجم d^3x_2 عبارت است از:

$$|\phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)|^2 d^3x_1 d^3x_2 \quad (۱۲-۳-۶)$$

برای این که معنی این عبارت را با دقت بیشتر دریابیم، اجازه دهید تا حالت خاصی را در نظر بگیریم که در آن برهم کنش متقابل بین دو الکترون [برای مثال، $(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2), \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$] قابل صرف نظر باشد. اگر وابستگی اسپینی وجود نداشته باشد، معادله‌ی موج برای ویژه تابع انرژی ψ [۶-۱-۹] را ببینید

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}_1) + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}_2) \right] \psi = E\psi \quad (۱۳-۳-۶)$$

جداشدنی است. جوابی به صورت $\omega_A(\mathbf{x}_1)\omega_B(\mathbf{x}_2)$ ضربدر تابع اسپینی داریم. اگر وابستگی اسپین نداشته باشیم، الزاماً (و به طور بدیهی) با H جابه‌جا می‌شود. بنابراین بخش اسپینی باید سه گانه یا یگانه باشد. که خاصیت تقارنی تعریف شده‌ای تحت $P_{12}^{(\text{اسپینی})}$ دارد. آنگاه بخش فضایی باید به شکل متقارن و پادمقارن ترکیب خطی $\omega_A(\mathbf{x}_1)\omega_B(\mathbf{x}_2)$ و $\omega_A(\mathbf{x}_2)\omega_B(\mathbf{x}_1)$ نوشته شود:

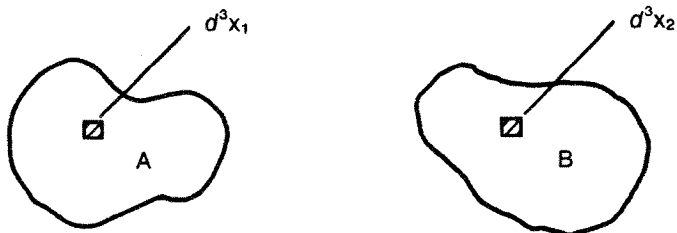
$$\phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\omega_A(\mathbf{x}_1)\omega_B(\mathbf{x}_2) \pm \omega_A(\mathbf{x}_2)\omega_B(\mathbf{x}_1)] \quad (۱۴-۳-۶)$$

که علامت بالایی در آن برای اسپین یگانه و پایینی برای اسپین سه گانه است. احتمال مشاهده‌ی الکترون ۱ در d^3x_1 حول \mathbf{x}_1 و الکترون ۲ در d^3x_2 حول \mathbf{x}_2 با عبارت زیر داده می‌شود:

$$\frac{1}{2} \{ |\omega_A(\mathbf{x}_1)|^2 |\omega_B(\mathbf{x}_2)|^2 + |\omega_A(\mathbf{x}_2)|^2 |\omega_B(\mathbf{x}_1)|^2 \pm 2 \text{Re} [\omega_A(\mathbf{x}_1)\omega_B(\mathbf{x}_2)\omega_A^*(\mathbf{x}_2)\omega_B^*(\mathbf{x}_1)] \} d^3x_1 d^3x_2 \quad (۱۵-۳-۶)$$

آخرین جمله در آکولاد به چگالی انرژی معروف است.

سریعاً می‌بینیم که وقتی، الکترون‌ها در حالت اسپینی سه‌گانه قرار دارند، احتمال پیدا کردن الکترون دوم در همان نقطه از فضا صفر می‌شود. به عبارت دیگر، وقتی الکترون‌ها در حالت اسپینی سه‌گانه قرار دارند، میل دارند که یکدیگر را دفع کنند. در عوض، وقتی که اسپین آن‌ها در حالت یگانه قرار دارند، به خاطر تبادل چگالی، احتمال یافتن آن‌ها در نقطه‌ی معینی از فضا بالا می‌رود.



شکل ۶-۲: دو ناحیه‌ی مجزای A و B . در ناحیه‌ی A ، $|\omega_A(\mathbf{x})|^2$ بزرگ، در حالی که $|\omega_B(\mathbf{x})|^2$ در ناحیه‌ی B بزرگ است.

پیدا است که، مسأله‌ی همسانی تنها وقتی مهم است که تبادل انرژی غیر قابل صرف نظر باشد یا وقتی که همپوشانی قابل توجهی بین تابع ω_A و تابع ω_B وجود داشته باشد. برای دیدن این مسأله به‌طور واضح‌تر، بگذارید که یک حالت حدی را در نظر بگیریم که در آن $|\omega_A(\mathbf{x})|^2$ (که در آن \mathbf{x} می‌تواند، \mathbf{x}_1 یا \mathbf{x}_2 باشد) تنها در منطقه‌ی A و $|\omega_B(\mathbf{x})|^2$ تنها در منطقه‌ی B بزرگ باشند به طوری که دو منطقه از هم مجزا باشند. حال d^3x_1 را در منطقه‌ی A و d^3x_2 را در منطقه‌ی B انتخاب می‌کنیم. شکل ۶-۲ را ببینید. پس تنها جمله‌ی مهم، جمله‌ی اول در (۶-۳-۱۵) است.

$$|\omega_A(\mathbf{x}_1)|^2 |\omega_B(\mathbf{x}_2)|^2 \quad (۶-۳-۱۶)$$

که چیزی غیر از چگالی احتمالاتی الحاقی مورد انتظار برای ذرات کلاسیکی نیست. در این رابطه، یادآوری می‌کنیم که ذرات کلاسیکی الزاماً به‌خوبی جایگزیده‌اند و مسأله‌ی همسانی پیش نمی‌آید. بنابراین جمله‌ی تبادل چگالی در حالتی که ناحیه‌ی A و B همپوشانی نداشته باشند، مهم نیست. اگر الکترون‌ها از هم دور باشند و همپوشانی قابل صرف نظر باشد، نیازی به پادمتقارن‌سازی نداریم. این کاملاً رضایت‌بخش است. ما هیچ نگرانی بابت پادمتقارن‌سازی 10^9 بیلیون الکترون نداریم. همچنین لازم نیست که الزام پادمتقارن بودن بین الکترونی در لوس آنجلس و الکترونی در پکن برقرار باشد.

۴.۶ اتم هلیوم

مطالعه‌ی اتم هلیوم به چند دلیل حائز اهمیت است. اول از همه، این ساده‌ترین مسأله‌ی واقعی است که در آن مسأله‌ی همسانی - که آن را در بخش ۶-۳ از نظر گذراندیم - نقش مهمی را بازی می‌کند. دوم این که، حتی اگر با سیستم ساده‌ای سروکار داشته باشیم، معادله‌ی شرودینگر دو ذره‌ای به‌طور تحلیلی حل نمی‌شود. بنابراین این مسأله جایگاه مهمی در توضیح دادن استفاده از نظریه‌ی اختلال و همچنین استفاده از روش وردشی ایفا می‌کند.

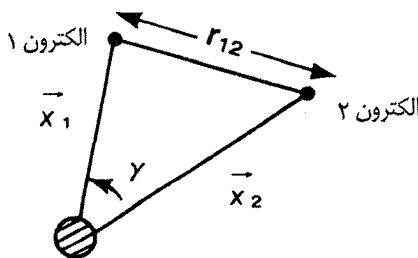
هامیلتونی اصلی با رابطه‌ی

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}} \quad (1-4-6)$$

داده می‌شود که در آن $r_1 \equiv |\mathbf{x}_1|$ و $r_2 \equiv |\mathbf{x}_2|$ است. شکل ۶-۳ را ببینید. فرض کنید که جمله‌ی e^2/r_{12} غایب است. آن‌گاه با صرف نظر از مسأله‌ی همسانی، تابع موج برابر با حاصل ضرب تابع موج دو اتم هیدروژن با تغییر ۱ به $Z=2$ است. اسپین کل ثابت حرکت است، بنابراین حالت اسپینی یا یگانه است و یا سه گانه. برای تشکیل قسمت فضایی تابع موج حالت مهمی را در نظر می‌گیریم که یکی از الکترون‌ها در حالت پایه قرار دارد و الکترون دیگر در حالت برانگیخته‌ای که با (nlm) مشخص می‌شود قرار می‌گیرد. داریم:

$$\phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{100}(\mathbf{x}_1)\psi_{nlm}(\mathbf{x}_2) \pm \psi_{100}(\mathbf{x}_2)\psi_{nlm}(\mathbf{x}_1)] \quad (2-4-6)$$

که در آن علامت بالایی (یا پایینی) برای حالت یگانه (یا سه گانه) است. برای یک حالت برانگیخته، بعداً به این فرم کلی باز خواهیم گشت.



شکل ۶-۳: مدلی برای اتم هلیوم

برای حالت پایه، به یک طرز عمل ویژه نیاز داریم. در این جا ترکیب بندی با $(1s)^2$ مشخص می شود. یعنی، هر دو الکترون در $n = 1$ و $l = 0$ قرار می گیرد. پس تابع فضایی الزاماً باید متقارن باشد و تنها تابع یگانه‌ی اسپین مجاز است. بنابراین داریم:

$$\psi_{100}(\mathbf{x}_1)\psi_{100}(\mathbf{x}_2)\chi_{\text{singlet}} = \frac{Z^3}{\pi a_0^3} e^{-Z(r_1+r_2)/a_0} \chi \quad (۳-۴-۶)$$

با $Z = 2$. این مساله عجیب نیست، این تابع موج "مختل نشده" برای انرژی حالت پایه می دهد:

$$E = 2 \times 4 \left(-\frac{e^2}{2a_0} \right) \quad (۴-۴-۶)$$

که حدود ۳۰٪ از مقدار آزمایشگاهی بزرگ تر است.

این تازه نقطه‌ی آغاز بررسی‌های ماست. چون در به دست آوردن شکل بالای (۳-۴-۶)، جمله‌ی آخر در (۱-۴-۶) را که توصیف کننده‌ی برهم کنش بین دو الکترون است، کاملاً از قلم انداخته ایم. یک راه برای رهیافت این مسأله در به دست آوردن مقدار انرژی بهتر، به کار بردن نظریه‌ی اختلال مرتبه اول با استفاده از (۳-۴-۶) به عنوان تابع موج مختل نشده و e^2/r_{12} به عنوان اختلال است. به دست می آوریم:

$$\Delta_{(1s)^2} = \left\langle \frac{e^2}{r_{12}} \right\rangle_{(1s)^2} = \iint \frac{Z^6}{\pi^2 a_0^6} e^{-2Z(r_1+r_2)/a_0} \frac{e^2}{r_{12}} d^3x_1 d^3x_2 \quad (۵-۴-۶)$$

برای حل انتگرال بالا، ابتدا توجه می کنیم که:

$$\frac{1}{r_{12}} = \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2\cos\gamma}} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} P_l(\cos\gamma) \quad (۶-۴-۶)$$

که در آن $r_{>}$ (یا $r_{<}$) فاصله‌ی بزرگ تر (یا کوچک تر) بین r_1 و r_2 است و γ زاویه‌ی بین \mathbf{x}_1 و \mathbf{x}_2 می باشد. با نوشتن $P_l(\cos\gamma)$ بر حسب $Y_l^m(\theta_1, \phi_1)$ و $Y_l^m(\theta_2, \phi_2)$ که با استفاده از قضیه جمع هماهنگ‌های کروی:

$$P_l(\cos\gamma) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_l^{m*}(\theta_1, \phi_1) Y_l^m(\theta_2, \phi_2) \quad (۷-۴-۶)$$

ممکن است، حل انتگرال زاویه‌ای به راحتی انجام می پذیرد. حال انتگرال زاویه‌ای بدیهی است:

$$\int Y_l^m(\theta_i, \phi_i) d\Omega_i = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} (4\pi) \delta_{l0} \delta_{m0} \quad (۸-۴-۶)$$

انتگرال گیری شعاعی، ابتدایی است (اما مستلزم جبر ملال آوری است!) این حل منجر می شود به:

$$\int_0^\infty \left[\int_0^{r_1} \frac{1}{r_1} e^{-(2Z/a_0)(r_1+r_2)} r_2^2 dr_2 + \int_{r_1}^\infty \frac{1}{r_2} e^{-(2Z/a_0)(r_1+r_2)} r_2^2 dr_2 \right] r_1^2 dr_1$$

$$= \frac{5}{128} \frac{a_0^5}{Z^5} \quad (۹-۴-۶)$$

در مجموع (برای $Z = 2$) خواهیم داشت:

$$\Delta_{(1s)^2} = \left(\frac{Z^6 e^2}{\pi^2 a_0^6} \right) 4\pi (\sqrt{4\pi})^2 \left(\frac{5}{128} \right) \left(\frac{a_0^5}{Z^5} \right)$$

$$= \left(\frac{5}{2} \right) \left(\frac{e^2}{2a_0} \right) \quad (۱۰-۴-۶)$$

با اضافه کردن این جابه‌جایی انرژی به (۴-۴-۶) داریم:

$$E_{\text{cal}} = \left(-8 + \frac{5}{2} \right) \left(\frac{e^2}{2a_0} \right) \approx -74.8 \text{ eV} \quad (۱۱-۴-۶)$$

این مقدار را با مقدار آزمایشگاهی مقایسه کنید:

$$E_{\text{exp}} = -78.8 \text{ eV} \quad (۱۲-۴-۶)$$

نتیجه بد نیست، اما می‌تواند بهتر هم باشد! می‌خواهیم از روش وردشی با Z ، که به آن Z_{eff} می‌گوییم، به‌عنوان پارامتر وردشی استفاده کنیم. دلیل فیزیکی ما برای این انتخاب، این است که Z مؤثر یک تک الکترون کمتر از ۲ است، چون بار مثبت ۲ واحد در مبدأ (شکل ۶-۳ را ببینید) با ابر الکترونی دیگر الکترون "پوشیده" می‌شود. به عبارت دیگر، دیگر الکترون، تمایل دارد که بار مثبت ناشی از هسته‌ی هلیوم در مرکز را خنثی کند. برای بهنجار کردن تابع از

$$\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \vec{0} \rangle = \left(\frac{Z_{\text{eff}}^3}{\pi a_0^3} \right) e^{-Z_{\text{eff}}(r_1+r_2)/a_0} \quad (۱۳-۴-۶)$$

استفاده می‌کنیم. با استفاده از این رابطه، به دست می‌آوریم:

$$\bar{H} = \left\langle \vec{0} \left| \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} \right| \vec{0} \right\rangle - \left\langle \vec{0} \left| \frac{Ze^2}{r_1} + \frac{Ze^2}{r_2} \right| \vec{0} \right\rangle + \left\langle \vec{0} \left| \frac{e^2}{r_{12}} \right| \vec{0} \right\rangle$$

$$= \left(2 \frac{Z_{\text{eff}}^2}{2} - 2ZZ_{\text{eff}} + \frac{5}{8} Z_{\text{eff}} \right) \left(\frac{e^2}{a_0} \right) \quad (۱۴-۴-۶)$$

به سادگی می‌بینیم که کمینه \bar{H} در

$$Z_{\text{eff}} = 2 - \frac{Z}{16} = 1.6875 \quad (15-4-6)$$

صورت می‌پذیرد. این عدد کوچک‌تر از ۲ است و ما این را قبلاً اظهار کرده بودیم. با استفاده از این مقدار Z_{eff} داریم:

$$E_{\text{cal}} = -77.5 \text{ eV} \quad (16-4-6)$$

که با وجود کامل نبودن تابع موج آزمایشی واقعاً به مقدار آزمایشگاهی نزدیک است.

از نظر تاریخی، دستاوردی که بررسی شد، یکی از اولین علامت‌هایی بود که درستی راه مکانیک موجی شرودینگر را نشان می‌داد. ما نمی‌توانستیم این گونه عددی را با روش جبری خالص (عملگری) به دست آوریم. محاسبات مربوط به هلیوم، نخستین بار توسط آ. آنسولد در سال ۱۹۲۷ انجام شد.

بگذارید تا به شکلی خلاصه به حالت‌های برانگیخته بپردازیم. این مسأله از آن جهت که اثرات کوانتومی ناشی از همسانی را مشخص می‌کند، جذابیت بیشتری دارد. تنها حالت $(1s)(nl)$ را بررسی می‌کنیم. انرژی این حالت را به شکل

$$E = E_{100} + E_{nlm} + \Delta E \quad (17-4-6)$$

می‌نویسیم. در نظریه‌ی اختلال مرتبه اول، ΔE با محاسبه‌ی مقدار چشمداشتی e^2/r_{12} ، به دست می‌آید. می‌توانیم بنویسیم:

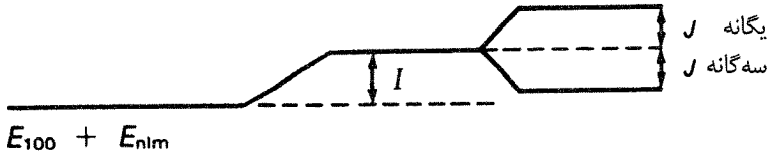
$$\left\langle \frac{e^2}{r_{12}} \right\rangle = I \pm J \quad (18-4-6)$$

که I و J در آن، به ترتیب به عنوان انتگرال مستقیم و انتگرال تبادلی شناخته می‌شوند و با

$$I = \int d^3x_1 \int d^3x_2 |\psi_{100}(\mathbf{x}_1)|^2 |\psi_{nlm}(\mathbf{x}_2)|^2 \frac{e^2}{r_{12}} \quad (19-4-6 \text{ الف})$$

$$J = \int d^3x_1 \int d^3x_2 \psi_{100}(\mathbf{x}_1) \psi_{nlm}(\mathbf{x}_2) \frac{e^2}{r_{12}} \psi_{100}^*(\mathbf{x}_2) \psi_{nlm}^*(\mathbf{x}_1) \quad (19-4-6 \text{ ب})$$

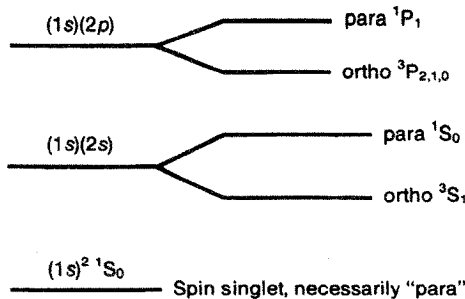
داده می‌شوند. علامت بالایی (یا پایینی) مربوط به حالت اسپینی یگانه (یا سه‌گانه) است. پیداست که I مثبت است. می‌توانیم نشان دهیم که I نیز مثبت است. بنابراین نتیجه‌ی مجموع برای ترکیب‌های یکسان حاکی از آن است که حالت اسپینی یگانه بالاتر قرار می‌گیرد. همان‌طور که در ۶-۴ نشان داده شده است.



شکل ۶-۴: مدلی برای نشان دادن جداشدگی تراز انرژی $(1s)(nl)$ در اتم هلیوم.

تفسیر فیزیکی این مسأله در ادامه آمده است. در مورد حالت یگانه تابع فضایی متقارن است و الکترون‌ها تمایل دارند که به یکدیگر نزدیک شوند. بنابراین اثر دافعه‌ی الکترواستاتیکی مهم‌تر می‌شود. به این ترتیب، حاصل یک انرژی بالا خواهد بود. در مورد حالت سه‌گانه تابع موج پادمقارن است و الکترون‌ها تمایل دارند که از یکدیگر دور گردند. هلیوم در حالت‌های اسپینی یگانه به پاراهلیوم معروف است، در حالی که هلیوم در حالت‌های اسپینی سه‌گانه با نام اورتوهلیوم شناخته می‌شود. هر ترکیب‌بندی که داشته باشیم به حالت پارا و حالت اورتو شکافته می‌شود و حالت پارا بالاتر قرار می‌گیرد. در حالت پایه فقط پاراهلیوم داریم. شکل ۶-۵ را برای نمایش تراز انرژی اتم هلیوم ببینید.

یادآوری این نکته مهم است که هامیلتونی اصلی، مستقل از اسپین است، چون پتانسیل تنها از سه جمله‌ی کولنی ساخته شده است. جمله‌ی $\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$ به هیچ‌وجه در آن وجود ندارد. اما هنوز یک اثر وابسته به اسپین (الکترون‌ها با اسپین‌های موازی انرژی کمتری دارند) که از آمارهای فرمی-دیراک ناشی شده است وجود دارد.



شکل ۶-۵: ترازهای انرژی برای آرایش‌های پایین اتم هلیوم.

توضیح ظهور این وابستگی اسپینی ترازهای انرژی اتم هلیوم، توسط هایزنبرگ ارائه شد. منشأ فیزیکی فرومغناطیس (هم جهت شدن الکترون‌هایی که در فاصله‌های میکروسکوپی از هم قرار دارند) نیز اساساً چیزی شبیه به همین مسأله است. اما محاسبه کمی خواص فرومغناطیس‌ها از اصول اولیه خیلی سخت‌تر است.

۵.۶ تقارن جایگشتی و جدول‌های یانگ

برای پیگیری مسیری که به واسطه‌ی تقارن جایگشتی تحمیل شد، تکنیک عملیاتی مناسبی به نام **جدول‌های یانگ** وجود دارد. این نام را به خاطر مقاله‌ی بنیادینی که کشیش انگلیسی، آ.یانگ در سال ۱۹۰۱ منتشر کرد، به این روش دادند. این بخش برای خوانندگانی که ذهن عملی دارند، به معرفی جدول‌های یانگ پرداخته است. الزامی به نشان دادن تمام اثبات‌ها نیست. این یکی از آن موردهایی است که در آن‌ها قوانین ساده‌تر از اثبات‌ها هستند.

برای روشن شدن تکنیک‌های اصلی روش، یک بار دیگر حالت‌های اسپینی سیستم دو الکترونی را در نظر می‌گیریم. سه حالت متقارن متناظر به سه جهت‌گیری ممکن حالت اسپینی سه‌گانه و یک حالت پادمقارن، متناظر با حالت اسپینی یگانه داریم. حالت اسپینی یک الکترون منفرد در یک مربع نمایش داده می‌شود. از [1] برای نشان دادن اسپین بالا و از [2] برای مشخص کردن اسپین پایین استفاده می‌کنیم. این مربع‌ها و سائل اولیه‌ی روش $SU(2)$ هستند. یک جعبه منفرد نشان‌دهنده‌ی یک دوگانه است.

جدول متقارن را با $\square\square$ و جدول پادمقارن را با $\square\bar{\square}$ نشان می‌دهیم. وقتی که با حالت‌های اسپینی سیستم دو الکترونی کار می‌کنیم، $\square\square$ جدول یانگ برای حالت سه‌گانه است، در حالی که $\square\bar{\square}$ نشان‌دهنده‌ی جدول یانگ برای حالت یگانه می‌باشد. اکنون به [1] و [2] بازمی‌گردیم. می‌توانیم حالت‌های سه‌گانه را به شکل

$$\square\square \left\{ \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 1 \\ \hline 1 & 2 \\ \hline 2 & 2 \\ \hline \end{array} \right. \quad (1-5-6)$$

بسازیم. نمی‌توانیم [21] داشته باشیم. چون وقتی که از مربع‌های افقی استفاده می‌کنیم، منظورمان حالت‌های متقارن است. بنابراین یک قانون مهم را بیان می‌کنیم: اگر عدد (برچسب) از چپ به راست افزایش نیابد، از دو بار شمردن جلوگیری کرده‌ایم.

به‌ازای حالت اسپین یگانه‌ی پادمقارن

$$\square\bar{\square} \left\{ \begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline 2 \\ \hline \end{array} \right. \quad (2-5-6)$$

تنها امکان موجود است. واضح است که به خاطر الزام پادمتقارن بودن $\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$ و $\begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix}$ غیرممکن هستند. در جدول‌های عمودی نمی‌توانیم یک حالت متقارن داشته باشیم. به علاوه $\begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}$ نیز برای پرهیز از دوبار شمردن حذف می‌شود. برای حذف حالت‌های متقارن ناخواسته، الزام می‌کنیم که عدد (برچسب) از بالا به پایین افزایش یابد.

در ادامه قوانین کلی را می‌آوریم. در کشیدن جدول‌های یانگ، اعداد نمی‌توانند از چپ به راست کاهش یابند. همچنین از بالا به پایین اعداد باید افزایش یابند. با در نظر گرفتن اسپین دو الکترون این قانون را به دست آوردیم. اما می‌توانیم نشان دهیم که این قانون بر ساختار هر جدولی قابل اعمال است. اکنون سه الکترون را در نظر بگیرید. می‌توانیم مجموع حالت‌های اسپینی متقارن را با قاعده‌ی زیر نشان دهیم:

$$\left[\begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 1 & 1 \\ \hline 1 & 1 & 2 \\ \hline 1 & 2 & 2 \\ \hline 2 & 2 & 2 \\ \hline \end{array} \right] \quad (3-5-6)$$

این روش روی هم‌رفته چهار حالت را می‌دهد. این درست همان چندشاخگی حالت $\frac{3}{2} = z$ است. همان‌طور که از مورد $m = \frac{3}{2}$ پیداست، که در آن هر سه اسپین در راستای مثبت z در نظر گرفته می‌شوند، این حالت کاملاً متقارن است.

در مورد حالت‌های پادمتقارن کلی چه می‌توان گفت؟ ممکن است از جدول‌های عمودی نظیر

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \text{یا} \quad \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix}$$

استفاده کنیم، اما این موارد مخالف قانون ما هستند، چون اعداد باید با پایین رفتن افزایش یابند. این تعجب‌برانگیز نیست. چون برای حالت‌های اسپین سه الکترون، پادمتقارن بودن کلی غیرممکن است. به‌طور کلی‌تر، یک شرط لازم (و البته ناکافی) برای پادمتقارن بودن کلی این است که هر حالتی با دیگر حالت‌ها متفاوت باشد. در واقع در $SU(2)$ نمی‌توانیم سه مربع در یک ستون عمودی داشته باشیم.

اکنون یک جدول آمیخته به شکل $\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}$ تعریف می‌کنیم. چنین جدولی را می‌توان برای نشان دادن یک مربع تنها که به یک جدول متقارن پیوسته است، به کاربرد [همانند معادله‌ی (۶-۵-۴ الف)] همچنین می‌توان

از آن برای نشان دادن یک مربع تنها که به یک جدول پادمتقارن وصل شده است، استفاده کرد [همانند معادله ی (۶-۵-۴)]:



(۶-۵-۴ الف)



(۶-۵-۴ ب)

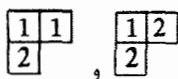
اگر تابع اسپین در دو شاخص از سه الکترون متقارن باشد، هیچ کدام از آن‌ها نمی‌توانند نسبت به شاخص سوم پادمتقارن باشند. برای مثال:

$$(|+\rangle_1 |-\rangle_2 + |-\rangle_1 |+\rangle_2) |-\rangle_3 \quad (۶-۵-۵)$$

تحت $1 \leftrightarrow 2$ متقارن است، اما تحت $1 \leftrightarrow 3$ (یا $2 \leftrightarrow 3$) نه متقارن است و نه پادمتقارن. می‌توانیم با کاستن چیزی از (۶-۵-۵) آن را تحت $1 \leftrightarrow 3$ پادمتقارن کنیم:

$$|+\rangle_1 |-\rangle_2 |-\rangle_3 - |+\rangle_3 |-\rangle_2 |-\rangle_1 + |-\rangle_1 |+\rangle_2 |-\rangle_3 - |-\rangle_3 |+\rangle_2 |-\rangle_1 \\ = (|+\rangle_1 |-\rangle_3 - |-\rangle_1 |+\rangle_3) |-\rangle_2 \quad (۶-۵-۶)$$

این عبارت تحت $1 \leftrightarrow 3$ پادمتقارن است، اما دیگر تقارن اولیه تحت $1 \leftrightarrow 2$ را نداریم. در هر صورت بعد تقارنی \square برابر با ۲ است. یعنی این حالت یک دو تایی ($j = \frac{1}{2}$) را نمایش می‌دهد. با توجه به جمع تکانه‌ی زاویه‌ای یک اسپین دو تایی (\square) و یک اسپین سه تایی ($\square\square$) می‌توانیم این مسأله را ببینیم. ما مجبور به استفاده از یک چهارگانه $\square\square\square$ کاملاً متقارن هستیم، بنابراین باقی‌مانده باید یک دو تایی باشد. متناوباً ممکن است یک دو تایی (\square) را به یک یگانه (\square) همانند (۶-۵-۴ ب) وصل کنیم. حاصل مشخصاً یک دو تایی خواهد بود. بنابراین مهم نیست که \square چطور ساخته شود. در هر حال حاصل یک دو تایی خواهد بود. اما این نتیجه همان چیزی است که قانون به ما می‌دهد. اگر اعداد نتوانند در جهت افقی کاهش و یا در جهت عمودی افزایش یابند، تنها امکان‌های موجود عبارت‌اند از:



(۶-۵-۷)

از آن جا که تنها دو امکان وجود دارد، \square باید متناظر با یک دو تایی باشد. توجه کنید که \square را در نظر نمی‌گیریم. می‌توانیم سری‌های کلبش - گوردن یا جمع تکانه‌ی زاویه‌ای را به شکل زیر در نظر بگیریم:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{D}^{(1/2)} \otimes \mathcal{D}^{(1/2)} = \mathcal{D}^{(1)} \oplus \mathcal{D}^{(0)} \\ \square \otimes \square = \square\square \oplus \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \end{array} \right. \quad (2 \times 2 = 3 + 1)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{D}^{(1)} \otimes \mathcal{D}^{(1/2)} = \mathcal{D}^{(3/2)} \oplus \mathcal{D}^{(1/2)} \\ \square\square \otimes \square = \square\square\square \oplus \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \end{array} \right. \quad (3 \times 2 = 4 + 2)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{D}^{(0)} \otimes \mathcal{D}^{(1/2)} = \mathcal{D}^{(1/2)} \\ \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \otimes \square = \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \end{array} \right. \quad (1 \times 2 = 2 \text{ غیرممکن است. دقت کنید که } \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array})$$

(۸-۵-۶)

اکنون ملاحظات خود را به سه شیء هم گسترش می دهیم. یک جعبه می تواند سه امکان را در بر بگیرد:

$$\square : \boxed{1}, \boxed{2}, \boxed{3} \quad (۹-۵-۶)$$

که برچسب های ۱، ۲ و ۳ می توانند بیان کننده ی اعداد کوانتومی مغناطیسی ارییتال p در فیزیک اتمی یا حالت های بار پیون π^+ ، π^0 و π^- ، یا کوارک های u و d و s در طبقه بندی $SU(3)$ ذرات بنیادی باشند. فرض می کنیم، قانون هایی که برای هر شیء به اثبات رسید همانند مفاهیم ابعادی، در این جا نیز قابل اعمال است. آنگاه می آزماییم که همه ی آن ها منطقی است یا نه:

$$\begin{array}{l} \square : \boxed{1} \quad \square : \boxed{2} \quad \square : \boxed{3} \quad \text{۳ بُعدی} \\ \left\{ \begin{array}{l} \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} : \begin{array}{|c|} \hline \boxed{1} \\ \hline \boxed{2} \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|} \hline \boxed{1} \\ \hline \boxed{3} \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|} \hline \boxed{2} \\ \hline \boxed{3} \\ \hline \end{array} : \text{۳ بُعدی} \\ \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} : \begin{array}{|c|} \hline \boxed{1} \\ \hline \boxed{2} \\ \hline \boxed{3} \\ \hline \end{array} \text{ فقط یکی} \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{در } SU(3), 3^* \text{ برای فرق گذاشتن} \\ \text{بین } \square \text{ و } \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \text{ به کار می رود} \\ \text{(کلاً پادمقارن)} \end{array}$$

$$\text{مقارن} \left\{ \begin{array}{l} \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} : \begin{array}{|c|} \hline \boxed{11} \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|} \hline \boxed{12} \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|} \hline \boxed{13} \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|} \hline \boxed{22} \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|} \hline \boxed{23} \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|} \hline \boxed{33} \\ \hline \end{array} : \text{۶ بُعدی} \\ \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} : \begin{array}{|c|} \hline \boxed{111} \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|} \hline \boxed{112} \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|} \hline \boxed{113} \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|} \hline \boxed{122} \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|} \hline \boxed{123} \\ \hline \end{array} \\ \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} : \begin{array}{|c|} \hline \boxed{133} \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|} \hline \boxed{222} \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|} \hline \boxed{223} \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|} \hline \boxed{233} \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|} \hline \boxed{333} \\ \hline \end{array} \end{array} \right\} : \text{۱۰ بُعدی}$$

$$\text{تقارن آمیخته} \left\{ \begin{array}{l} \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} : \begin{array}{|c|} \hline \boxed{11} \\ \hline \boxed{2} \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|} \hline \boxed{12} \\ \hline \boxed{2} \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|} \hline \boxed{13} \\ \hline \boxed{2} \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|} \hline \boxed{11} \\ \hline \boxed{3} \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|} \hline \boxed{12} \\ \hline \boxed{3} \\ \hline \end{array} \\ \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} : \begin{array}{|c|} \hline \boxed{13} \\ \hline \boxed{3} \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|} \hline \boxed{22} \\ \hline \boxed{3} \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|} \hline \boxed{23} \\ \hline \boxed{3} \\ \hline \end{array} \end{array} \right\} : \text{۸ بُعدی}$$

(۱۰-۵-۶)

این جدول متناظر با نمایش $SU(3)$ است.

	
			
	...					

مربع‌های λ_1 در سطر اول
مربع‌های λ_2 در سطر اول
مربع‌های λ_3 در سطر اول

(۱۱-۵-۶)

برای رسیدن به بعد این نمایش‌ها، برداشتن یک "یگانه"

	...	
	...	
	...	

(۱۲-۵-۶)

از سمت چپ (۱۱-۵-۶) می‌تواند کارساز باشد. می‌توانیم بعد را با

$$d(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = \frac{(p+1)(q+1)(p+q+2)}{2} \quad (13-5-6)$$

نشان دهیم. که در آن $q = \lambda_2 - \lambda_3$ و $p = \lambda_1 - \lambda_2$ است.

به زبان $SU(3)$ ، یک جدول متناظر با یک نمایش کاهش نیافتنی معین $SU(3)$ است. از طرف دیگر، وقتی که هر کدام از مربع‌ها به عنوان یک شی با $z = 1$ تفسیر شود، آنگاه جدول نمی‌تواند متناظر با نمایش کاهش نیافتنی گروه چرخش باشد. بگذارید تا به طور خاص تری در مورد این مسأله بحث کنیم. با کنار گذاشتن دو مربع در کنار هم کار خود را آغاز می‌کنیم. هر کدام از مربع‌ها متناظر با یک حالت $z = 1$ است.

$$\square \otimes \square = \square \oplus \square. \quad (3 \times 3 = 6 + 3) \quad (14-5-6)$$

جدول افقی شش حالت دارد، جدول به دو جعبه‌ی $z = 2$ (گوناگونی ۵) و $z = 0$ (گوناگونی ۱) شکسته می‌شود که هر دو متقارن‌اند. در واقع این همان، چگونگی تشکیل یک تانسور مرتبه دوم متقارن از دو بردار است. جدول عمودی \square متناظر با یک حالت $z = 1$ پادمقارن است که نظیر $\mathbf{a} \times \mathbf{b}$ رفتار می‌کند. برای انجام جمع سه تکانه‌ی زاویه‌ای با $z_1 = z_2 = z_3 = 1$ ، اجازه دهید تا ابتدا ملاحظات زیر را

برقرار سازیم:

$$\begin{array}{c} \square\square \otimes \square = \square\square\square \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \\ \hline \end{array} \\ \\ \square \otimes \square = \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \end{array}$$

(۱۵-۵-۶)

برای دیدن این که $\square\square\square$ چگونه می شکند، دقت می کنیم که این حالت باید شامل $z=3$ باشد. با این حال این یک حالت کاملاً متقارن نیست. $\mathbf{a(b \cdot c) + b(c \cdot a) + c(a \cdot b)}$ کاملاً متقارن است و این خاصیت تبدیل $z=1$ را دارد. بنابراین $\square\square\square$ هم شامل $z=3$ (هفت حالت) و هم شامل $z=1$ (سه حالت) است. به همین صورت برای $\square\square$ با روی هم رفته هشت امکان، شناسه پیچیده تر است، اما دقت می کنیم که این 8 ، قابلیت شکستن به $7+1$ را ندارد، چون 7 کاملاً متقارن است، در حالی که 1 کاملاً پادمقارن است و ما می دانیم که 8 دارای تقارن آمیخته است. بنابراین تنها امکان موجود $8=5+3$ (یا به عبارت دیگر $z=2$ و $z=1$) است.

بنابراین در پایان باید داشته باشیم:

$$\begin{array}{c} \square \otimes \square \otimes \square = \square\square\square \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \\ \\ 3 \times 3 \times 3 = 10 + 8 + 8 + 1 \\ \quad \quad \quad \uparrow \quad \quad \uparrow \quad \quad \uparrow \\ \quad \quad \quad 7+3 \quad 5+3 \quad 5+3 \end{array}$$

(۱۶-۵-۶)

برحسب حالت های تکانه ی زاویه ای، داریم:

$j=3$	(۷ بُعدی)	یک بار	(کاملاً متقارن)
$j=2$	(۵ بُعدی)	دو بار	(هر دو متقارن آمیخته)
$j=1$	(۳ بُعدی)	سه بار	(یکی کاملاً آمیخته و دو تا متقارن آمیخته)
$j=0$	(۱ بُعدی)	یک بار	(۱۷-۵-۶) (کاملاً پادمقارن)

که در آن حالت $z=0$ حالت یکتایی است و متناظر با این حقیقت است که فقط ضرب $\mathbf{a, b}$ و \mathbf{c} تحت چرخش $\mathbf{a \cdot (b \times c)}$ ناوردا است. که این حالت الزاماً پادمقارن است. همچنین می توانیم حالت های $z=1$ را با استفاده از رهیافت تانسوری بررسی کنیم. ما سه بردار مستقل که از $\mathbf{a, b, c}$ تشکیل شده اند داریم که عبارتند از: $\mathbf{a(b \cdot c)}$ ، $\mathbf{b(c \cdot a)}$ و $\mathbf{c(a \cdot b)}$. از این حالت ها، می توانیم تنها یک ترکیب کاملاً متقارن بسازیم.

$$\mathbf{a(b \cdot c) + b(c \cdot a) + c(a \cdot b)}$$

(۱۸-۵-۶)

می‌توانیم این ملاحظات را بر ترکیب‌بندی $(2p)^3$ در اتم نیتروژن N اعمال کنیم. ($Z = 7$)، ساختار پوسته‌ای $((1s)^2(2s)^2(2p)^3)$ روی هم رفته

$$\frac{6!}{3!3!} = \frac{6 \cdot 5 \cdot 4}{3 \cdot 2} = 20 \quad \text{حالت} \quad (19-5-6)$$

داریم. تابع فضایی نظیر $\square\square\square$ رفتار می‌کند که در آن $l_{tot} = 3$ عملاً غیرممکن است چون این باید با تابع اسپینی کاملاً پادمتقارن ترکیب شود. یادآوری می‌کنیم که



که در آن هر کدام از مربع‌ها بیان‌کننده‌ی اسپین بالا یا پایین هستند، برای حالت‌های اسپینی سه الکترون غیرممکن است. در عوض تابع فضایی کاملاً پادمتقارن



با $l_{tot} = 0$ ، اگر با تابع اسپینی کاملاً متقارن $\square\square\square$ که در آن تکانه‌ی زاویه‌ای اسپین $\frac{3}{2}$ است، ترکیب شود، کاملاً مجاز است. برای این ترکیب‌بندی $4s_{3/2}$ را داریم. تابع فضایی متقارن آمیخته $\square\square$ ($l_{tot} = 2, 1$) باید با یک تابع اسپینی متقارن آمیخته ترکیب شود و الزاماً این تابع باید یک دوتایی اسپینی $\square\square$ باشد. بنابراین $2D_{5/2,3/2}$ و $2P_{3/2,1/2}$ را خواهیم داشت. شمارش حالت‌ها به نتایج زیر منجر می‌شود:

$z = \frac{5}{2}$	حالت	6
$z = \frac{3}{2}$	حالت	4×3
$z = \frac{1}{2}$	حالت	2
	حالت	<hr style="width: 50%; margin: 0 auto;"/> 20

(20-5-6)

که این نتیجه، با شمارش از راه‌های دیگر در توافق است.

سرانجام به بررسی کاربردهای این روش در فیزیک ذرات بنیادی می‌رسیم. در این جا ملاحظات $SU(3)$ را بر مدل کوارک غیرنسبیتی اعمال می‌کنیم. که در آن اشیاء اولیه‌ی ما u و d هستند (بالا، پایین و ناشناس). که در آن بالا و پایین به ایزواسپین بالا و ایزواسپین پایین اشاره دارند). اکنون یک مربع می‌تواند در برگیرنده‌ی d و u یا s باشد. به نمایش ده‌گانه‌ی $\square\square\square$ (۱۰) نگاه می‌کنیم:

$\Delta^{++}, +, 0, -$	$ddd\ udd\ uud\ uuu$	$I = \frac{3}{2},$	
$\Sigma^{+}, 0, -$	$dds\ uds\ uus$	$I = 1,$	
$\Xi^{0}, -$	$dss\ uss$	$I = \frac{1}{2},$	
Ω^{-}	sss	$I = 0,$	(۶-۵-۲۱)

که در آن I بیان کننده‌ی ایزواسپین است.

حال همه‌ی ده حالت را به‌عنوان اشیایی با اسپین $\frac{3}{2}$ می‌شناسیم. فرض می‌کنیم که بخش فضایی برای حالت‌های پایین سه کوارک در حالت S نسبی است. در درجه‌ی آزادی اسپین، تقارن کاملی را انتظار داریم. برای مثال، حالت $z = \frac{3}{2}$ و $m = \frac{3}{2}$ برای Δ نشان می‌دهد که اسپین‌های کوارک همگی هم‌ردیف شده‌اند.

اما برای کوارک‌هایی با اشیاء اسپین $\frac{1}{2}$ ، انتظار داریم که کاملاً پادمتقارن باشند که این ناشی از آمار فرمی-دیراک است. هنوز برای $z = \frac{3}{2}$ ده گانه:

برچسب کوارک (حالا به آن طعم می‌گوییم):

مقارن است

اسپین:

مقارن است

فضا:

مقارن است

اما همان‌طور که از (۶-۵-۲۲) بدیهی است، تقارن کلی در این مورد زوج است! که این به "ناقض آماری" منجر می‌شود. که این مسأله باعث برآشتن ما می‌شود چون دیگر جنبه‌های مدل کوارک غیرنسبیتی کاملاً موفق هستند.

یک راه برای بیرون آمدن از این وضع دشوار، انگار کردن این است که در عمل یک درجه‌ی تجسمی آزادی به نام رنگ (قرمز، آبی یا زرد) وجود دارد و فرض می‌شود که هادرون‌ها (ذرات بنیادی با برهم کنش قوی که در این جا فرض شده است که حالت‌های $J = \frac{3}{2}^{+}$ را شامل شوند) رنگ یگانه دارند.

$$\frac{1}{\sqrt{6}} (|RBY\rangle - |BRY\rangle + |BYR\rangle - |YBR\rangle + |YRB\rangle - |RYB\rangle) \quad (۶-۵-۲۳)$$

این مسأله کاملاً با یکتایی

در (۶-۵-۱۰)، که یک ترکیب متقارن در فضای رنگ است، در توافق است. مشکل آماری به این صورت حل می شود چون:

$$P_{ij} = P_{ij}^{(طعم)} P_{ij}^{(اسپین)} P_{ij}^{(فضا)} P_{ij}^{(رنگ)}$$

(-) (+) (+) (+) (-)

(۶-۵-۲۴)

ممکن است فکر کنید که این راهی بی ارزش برای خلاصی از مخمصه بود. خوشبختانه، شواهد دیگری به نفع رنگ، نظیر نرخ تلاشی π^0 و سطح مقطع نابودی الکترون-پوزترون در برابر هادرون‌ها وجود دارد. در واقع، این مثال خیلی خوبی از چگونگی تلاش برای غلبه بر مشکلات است که به پیشگویی غیربديهی رنگ منجر می شود.

مسائل

۱- الف) ذره N همسان با اسپین $\frac{1}{2}$ در معرض پتانسیل یک نوسان گر هماهنگ ساده‌ی یک بعدی قرار

می گیرند. انرژی حالت پایه چیست؟ انرژی فرمی چقدر است؟

ب) اگر از برهم کنش متقابل صرف نظر کنیم و N را خیلی بزرگ در نظر بگیریم. انرژی فرمی و

انرژی حالت پایه چقدر می شوند؟

۲- پیدا است که دو ذره‌ی غیرهمسان با اسپین ۱ و بدون تکانه زاویه‌ای مداری (یعنی، هر دو در حالت L

هستند). می توانند $z=0$ و $z=1$ و $z=2$ را تشکیل دهند. اما فرض کنید که دو ذره همسان هستند،

قیدهایی که باید بگذاریم کدام‌اند؟

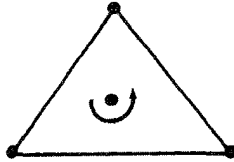
۳- بحث کنید که اگر الکترون یک بزون بدون اسپین بود، چه اتفاقی برای ترازهای انرژی اتم هلیوم رخ

می داد؟ تا جایی که می توانید کمیت بندی کنید.

۴- سه ذره با اسپین 0 در گوشه‌های یک مثلث متساوی الاضلاع قرار گرفته‌اند. فرض می کنیم که محور z

از مرکز مثلث می گذرد و بر آن عمود است. کل سیستم آزاد است که دور محور z بچرخد، با استفاده از

ملاحظات آماری، قیدهای روی اعداد کوانتومی مغناطیسی متناظر با J_z را بیابید.



۵- سه ذره‌ی همسان با اسپین 1 را در نظر بگیرید که با هم برهم کنش ضعیف دارند.

الف) فرض کنید که قسمت فضایی بردار حالت تحت تبادل هر جفت از آن‌ها متقارن باشد. از علامت‌نگاری $|+\rangle|0\rangle|+\rangle$ برای ذره‌ی ۱ با $m_s = +1$ ، ذره‌ی ۲ با $m_s = 0$ و ذره‌ی ۳ با $m_s = +1$ و به همین ترتیب، استفاده کنید.

حالت‌های بهنجار اسپینی را در سه مورد زیر تشکیل دهید:

(i) هر سه در $|+\rangle$ باشند.

(ii) دو تا از آنها در $|+\rangle$ و یکی در $|0\rangle$ باشد.

(iii) هر سه در حالت‌های اسپین متفاوت.

در هر یک از حالات فوق، اسپین کل چیست؟

ب) سعی کنید تا مسأله‌ای مشابه را برای وقتی که قسمت فضایی تحت تبادل هر جفت پادمقارن است، حل کنید.

۶- فرض کنید الکترونی مثل یک ذره‌ی اسپین $\frac{3}{2}$ از آمار فرمی - دیراک پیروی می‌کند. ترکیب‌بندی یک $\text{Ne} (Z = 10)$ فرضی را در نظر بگیرید که از چنین "الکترون‌هایی" ساخته شده است [یعنی، چیزی شبیه $(2p)^6(2s)^2(1s)^2$] نشان دهید که این ترکیب‌بندی بسیار تبهگن است. حالت پایه‌ی (پایین‌ترین جمله) این اتم Ne فرضی در علامت‌گذاری‌های طیف‌سنجی کدام است؟ ($2s^+1L$)، که در آن k ، L و J به ترتیب نشان‌دهنده‌ی اسپین کل، تکانه‌ی زاویه‌ای مدار و تکانه‌ی زاویه‌ای کل هستند. شکافتگی تبادلی و شکافتگی اسپین - مدار را به حساب بیاورید.

۷- دو فرمیون همسان اسپین $\frac{1}{2}$ تحت تأثیر پتانسیل یک بعدی چاه بی نهایت $V = \infty$ در $x < 0$ ، $x > L$ و $V = 0$ در $0 \leq x \leq L$ ، حرکت می کند.

(الف) تابع موج حالت پایه و انرژی حالت پایه را وقتی که دو ذره در حالت اسپینی سه گانه (حالت اورتو) قرار دارند، به دست آورید.

(ب) وقتی که دو ذره در حالت اسپینی یگانه هستند قسمت (الف) را تکرار کنید.

(ج) فرض می کنیم که دو ذره به طور متقابل با هم برهم کنش دارند. این برهم کنش به خاطر وجود پتانسیل جاذب بسیار کوتاه بردی است که با

$$V = -\lambda \delta(x_1 - x_2) \quad (\lambda > 0)$$

تخمین زده می شود. فرض کنید که نظریه ی اختلال، حتی با وجود چنین پتانسیل عجیبی، اعتبار داشته باشد. به طور نیمه کمی بحث کنید که برای ترازهای انرژی ای که در بخش (الف) و (ب) به دست آمده چه اتفاقی می افتد؟

آخرین بخش این کتاب به نظریه‌ی پراکندگی و یا به‌طور کلی‌تر به فرآیند برخورد اختصاص یافته است. بر اهمیت این موضوع بیش از حد تأکید می‌کنیم.

۱.۷ معادله‌ی لیپمن - شوینگر

با فرمول‌بندی مستقل از زمان فرآیند پراکندگی، کار خود را آغاز می‌کنیم. فرض می‌کنیم که بتوانیم هامیلتونی را به‌صورت

$$H = H_0 + V \quad (1-1-7)$$

بنویسیم. که در آن H_0 بیان‌کننده‌ی عملگر انرژی جنبشی است:

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \quad (2-1-7)$$

در غیاب پراکندگی، V صفر می‌شود و ویژه حالت انرژی درست شبیه به حالت ذره‌ی آزاد و $|\mathbf{p}\rangle$ خواهد شد. حضور V باعث می‌شود که ویژه حالت انرژی با حالت یک ذره‌ی آزاد متفاوت باشد. اما، اگر فرآیند پراکندگی کشسان در نظر گرفته شود (یعنی تغییری در انرژی رخ ندهد) تمایل داریم که جوابی برای کل هامیلتونی در معادله‌ی شرودینگر با ویژه مقدار یکسان به‌دست آوریم. به‌طور خاص‌تر، $|\phi\rangle$ را ویژه‌کت انرژی H_0 در نظر می‌گیریم:

$$H_0|\phi\rangle = E|\phi\rangle \quad (3-1-7)$$

(در اینجا به‌جای $|\mathbf{p}\rangle$ از $|\phi\rangle$ استفاده می‌کنیم چون ممکن است بعداً به‌جای حالت‌های موج تخت از موج کروی آزاد استفاده کنیم). $|\phi\rangle$ می‌تواند بیان‌کننده‌ی هر دو باشد. معادله‌ی شرودینگر اصلی که می‌خواهیم حل کنیم عبارت است از:

$$(H_0 + V)|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (4-1-7)$$

هم H_0 و $H_0 + V$ طیف پیوسته‌ای را نمایش می‌دهند. ما به‌دنبال جوابی برای (۴-۱-۷) می‌گردیم. به این منظور به‌ازای $0 \rightarrow V$ ، داریم $|\phi\rangle \rightarrow |\psi\rangle$ که در آن $|\phi\rangle$ جواب معادله‌ی شرودینگر ذره‌ی آزاد [(۳-۱-۷)] با ویژه مقدار انرژی یکسان است.

می توان حدس زد که جواب دلخواه ما

$$|\psi\rangle = \frac{1}{E - H_0} V|\psi\rangle + |\phi\rangle \quad (5-1-7)$$

است و این جدا از پیچیدگی های ناشی از طبیعت غریب عملگر $1/(E - H_0)$ است. می توانیم بینیم که این رابطه با توجه به این که $E - H_0$ روی $|\psi\rangle$ (۵-۱-۷) اثر کند، سریعاً معادله ی صحیح (۴-۱-۷) را می دهد. حضور $|\phi\rangle$ منطقی است چون $|\psi\rangle$ به ازای V صفر، باید به $|\phi\rangle$ تبدیل شود. اما بدون دستورالعملی برای سروکار داشتن با یک عملگر عجیب، معادله ای از نوع (۵-۱-۷) بی معنی است. راهکاری که در نظریه ی اختلال مستقل از زمان استفاده کردیم (وارد کردن عملگر تصویر و نظایر آن [بخش ۵-۱ را ببینید]) در این جا خوب کار نمی کند چون هم $|\phi\rangle$ و هم $|\psi\rangle$ طیف ویژه مقدراری پیوسته دارند. در عوض این بار جواب با کمی پیچیده ساختن E تعیین می شود.

$$|\psi^{(\pm)}\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} V|\psi^{(\pm)}\rangle \quad (6-1-7)$$

این رابطه به معادله ی لاین- شوینگر معروف است. معنی فیزیکی \pm با بررسی $\langle \mathbf{x} | \psi^{(\pm)} \rangle$ در فواصل بزرگ در ادامه بررسی می شود.

معادله ی لاین- شوینگر یک معادله ی کتی مستقل از نمایش خاصی است که کت در آن قرار دارد. با ضرب $\langle \mathbf{x} |$ از سمت چپ در این معادله می توانیم خودمان را به پایه های مکان محدود کنیم. بنابراین:

$$\langle \mathbf{x} | \psi^{(\pm)} \rangle = \langle \mathbf{x} | \phi \rangle + \int d^3x' \left\langle \mathbf{x} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} \right| \mathbf{x}' \right\rangle \langle \mathbf{x}' | V | \psi^{(\pm)} \rangle \quad (7-1-7)$$

این یک معادله ی کلی برای پراکندگی است چون، کت مجهول $|\psi^{(\pm)}\rangle$ زیر یک علامت انتگرال ظاهر شده است. اگر $|\phi\rangle$ بیان کننده ی یک موج تخت با تکانه ی \mathbf{p} باشد، می توانیم بنویسیم:

$$\langle \mathbf{x} | \phi \rangle = \frac{e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \quad (8-1-7)$$

[یادداشت ویراستار: در مقابل حالت های مقید، حالت موج تخت (۸-۱-۷) بهنجار نیست و یک بردار واقعی در فضای هیلبرت را نمایش نمی دهد. سروکار داشتن با چنین حالت هایی یکی از در دسرهای نظریه ی پراکندگی مستقل از زمان است. بهنجارش در (۸-۱-۷) عبارت از:

$$\int d^3x' \langle \mathbf{p}' | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = \delta^{(3)}(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \quad (9-1-7)$$

از طرف دیگر، اگر معادله‌ی لیمین-شوینگر با استفاده از پایه‌های تکانه نوشته شود، داریم:

$$\langle \mathbf{p} | \psi^{(\pm)} \rangle = \langle \mathbf{p} | \phi \rangle + \frac{1}{E - (\mathbf{p}^2/2m) \pm i\epsilon} \langle \mathbf{p} | V | \psi^{(\pm)} \rangle \quad (10-1-7)$$

در بخش ۷-۲ به این معادله بازمی‌گردیم.

بگذارید تا به‌طور خاص پایه‌های مکان را در نظر بگیریم و با (۷-۱-۷) کار کنیم. برای دستیابی به هر پیشرفتی باید ابتدا هسته‌ی معادله‌ی انتگرال را که با

$$G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \equiv \frac{\hbar^2}{2m} \left\langle \mathbf{x} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} \right| \mathbf{x}' \right\rangle \quad (11-1-7)$$

تعریف می‌شود، به‌دست آوریم. ادعا می‌کنیم که $G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ از

$$G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \quad (12-1-7)$$

به‌دست می‌آید که در آن $E \equiv \hbar^2 k^2/2m$ است. برای نشان دادن این مطلب (۱۱-۱-۷) را به صورت زیر محاسبه می‌کنیم:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m} \left\langle \mathbf{x} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} \right| \mathbf{x}' \right\rangle &= \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3 p' \int d^3 p'' \langle \mathbf{x} | \mathbf{p}' \rangle \\ &\times \left\langle \mathbf{p}' \left| \frac{1}{E - (\mathbf{p}'^2/2m) \pm i\epsilon} \right| \mathbf{p}'' \right\rangle \langle \mathbf{p}'' | \mathbf{x}' \rangle \end{aligned} \quad (13-1-7)$$

که در آن H_0 روی $|\mathbf{p}'\rangle$ عمل می‌کند. اکنون با استفاده از

$$\begin{aligned} \left\langle \mathbf{p}' \left| \frac{1}{E - (\mathbf{p}'^2/2m) \pm i\epsilon} \right| \mathbf{p}'' \right\rangle &= \frac{\delta^{(3)}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}'')}{E - (\mathbf{p}'^2/2m) \pm i\epsilon} \\ \langle \mathbf{x} | \mathbf{p}' \rangle &= \frac{e^{i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}, \quad \langle \mathbf{p}'' | \mathbf{x}' \rangle = \frac{e^{-i\mathbf{p}'' \cdot \mathbf{x}'/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \end{aligned} \quad (14-1-7)$$

طرف راست معادله‌ی (۱۳-۱-۷) می‌شود:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \int \frac{d^3 p'}{(2\pi\hbar)^3} \frac{e^{i\mathbf{p}' \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')/\hbar}}{[E - (\mathbf{p}'^2/2m) \pm i\epsilon]} \quad (15-1-7)$$

اکنون می نویسیم $E \equiv \hbar^2 k^2 / 2m$ و قرار می دهیم $\mathbf{p}' = \hbar \mathbf{q}$ معادله ی (۷-۱۵) می شود:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty q^2 dq \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{+1} \frac{d(\cos \theta) e^{i\mathbf{q}|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|\cos \theta}}{k^2 - q^2 \pm i\epsilon} \\ &= \frac{-1}{8\pi^2} \frac{1}{i|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \int_{-\infty}^{+\infty} dq q \left(\frac{e^{i q |\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} - e^{-i q |\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{q^2 - k^2 \mp i\epsilon} \right) \\ &= -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm i k |\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \end{aligned} \quad (16-1-7)$$

در آخرین مرحله از روش حساب مانده ها استفاده کردیم. توجه کنید که انتگرالده، قطب هایی در صفحه ی q مختلط در

$$q = \pm k \sqrt{1 \pm \left(\frac{i\epsilon}{k^2} \right)} \approx \pm k \pm i\epsilon' \quad (17-1-7)$$

دارد. خواننده ممکن است تشخیص داده باشد که G_{\pm} چیزی بیشتر از تابع گرین برای معادله ی هلمهولتز نیست:

$$(\nabla^2 + k^2)G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (18-1-7)$$

با تجهیز شدن به شکل صریح G_{\pm} در معادله ی (۷-۱۲)، می توانیم از (۷-۱۱) در نوشتن (۷-۱۷) به شکل:

$$\langle \mathbf{x} | \psi^{(\pm)} \rangle = \langle \mathbf{x} | \phi \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{\pm i k |\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \langle \mathbf{x}' | V | \psi^{(\pm)} \rangle \quad (19-1-7)$$

استفاده کنیم. توجه کنید که تابع موج $\langle \mathbf{x} | \psi^{(\pm)} \rangle$ در حضور پراکنده کننده به شکل جمع تابع موجی، نوشته می شود. که حاصل از موج فرودی $\langle \mathbf{x} | \phi \rangle$ و جمله ای ناشی از پراکنده گی است. همان طور که بعداً به طور صریح خواهیم دید در فواصلی که به اندازه ی کافی بزرگند، وابستگی فضایی جمله ی دوم $e^{\pm ikr}/r$ ایجاب می کند که پتانسیل گسترده ی محدودی داشته باشد. یعنی پاسخ مثبت (یا پاسخ منفی) متناظر با یک موج تخت به اضافه ی یک موج کروی بیرون رو (یا درون رو) است. ما در بیشتر مسائل فیزیکی به جواب مثبت علاقه داریم چون مهیا کردن سیستمی که شرایط مرزی متناسب با جواب منفی باشد، مشکل است.

برای صریح تر دیدن رفتار $\langle \mathbf{x} | \psi^{(\pm)} \rangle$ ، بگذارید حالت حاصلی را در نظر بگیریم که در آن V یک پتانسیل موضعی است (یعنی، پتانسیلی که در نمایش \mathbf{x} قطری است). پتانسیل‌هایی که فقط تابعی از عملگر مکان \mathbf{x} هستند، به این مجموعه تعلق دارند. به طور دقیق، اگر بتوان V را به شکل

$$\langle \mathbf{x}' | V | \mathbf{x}'' \rangle = V(\mathbf{x}') \delta^{(3)}(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') \quad (۲۰-۱-۷)$$

نوشت، به آن موضعی گفته می‌شود. در نتیجه داریم:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}' | V | \psi^{(\pm)} \rangle &= \int d^3x'' \langle \mathbf{x}' | V | \mathbf{x}'' \rangle \langle \mathbf{x}'' | \psi^{(\pm)} \rangle \\ &= V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \psi^{(\pm)} \rangle \end{aligned} \quad (۲۱-۱-۷)$$

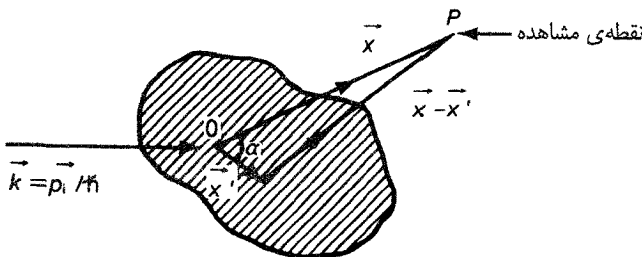
معادله‌ی انتگرالی (۱۹-۱-۷) حالا به شکل

$$\langle \mathbf{x} | \psi^{(\pm)} \rangle = \langle \mathbf{x} | \phi \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{\pm ik|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}}{4\pi|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \psi^{(\pm)} \rangle \quad (۲۲-۱-۷)$$

ساده می‌شود. بیاید تلاش کنیم فیزیک نهفته در این معادله را دریابیم. بردار \mathbf{x} را به عنوان برداری که به سمت نقطه‌ی مشاهده‌ای که تابع موج در آن محاسبه می‌شود، می‌شناسیم. برای پتانسیلی با گستره‌ی محدود، منطقه‌ای که در فضا سهم غیرصفر دارد، محدود است. در فرآیند پراکندگی، می‌خواهیم اثر پراکنده‌ساز (یعنی، پتانسیل گستره محدود) را در نقطه‌ای دور از محدوده‌ی پتانسیل بررسی کنیم. این کار از نقطه‌نظر عملی بسیار مناسب است چون ما نمی‌توانیم یک آشکارساز را در فاصله‌ی نزدیکی از مرکز پراکندگی قرار دهیم. معمولاً مشاهدات، طوری صورت می‌گیرد که آشکارساز در فاصله‌ی بسیار دوری از پراکنده‌ساز قرار می‌گیرد و r بسیار بزرگ‌تر از گستره‌ی پتانسیل است. به عبارت دیگر، با اطمینان می‌توان نوشت:

$$|\mathbf{x}| \gg |\mathbf{x}'| \quad (۲۳-۱-۷)$$

این مسأله در شکل ۷-۱ نشان داده شده است.



شکل ۷-۱: پتانسیل با گستره‌ی محدود. نقطه‌ی مشاهده‌ی P ، جایی است که $\langle \mathbf{x} | \psi^{(\pm)} \rangle$ در آن محاسبه می‌شود، در حالی که جملاتی که در

انتگرال رابطه‌ی (۲۲-۱-۷) سهم دارند، آن‌هایی هستند که فاصله‌ی $|\mathbf{x}'|$ کمتر از محدوده‌ی پتانسیل دارند. این محدوده، در شکل با

هاشور مشخص شده است.

معرفی‌های زیر را انجام می‌دهیم:

$$r = |\mathbf{x}|$$

$$r' = |\mathbf{x}'| \quad (۲۴-۱-۷)$$

و

$$\alpha = \angle(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \quad (۲۵-۱-۷)$$

آنگاه برای $r \gg r'$ داریم:

$$\begin{aligned} |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| &= \sqrt{r^2 - 2rr' \cos \alpha + r'^2} \\ &= r \left(1 - \frac{2r'}{r} \cos \alpha + \frac{r'^2}{r^2} \right)^{1/2} \end{aligned} \quad (۲۶-۱-۷)$$

که در آن

$$\hat{\mathbf{r}} \equiv \frac{\mathbf{x}}{|\mathbf{x}|} \quad (۲۷-۱-۷)$$

همچنین تعریف

$$\mathbf{k}' \equiv k \hat{\mathbf{r}} \quad (۲۸-۱-۷)$$

را انجام می‌دهیم. انگیزه‌ی ما از این تعریف این است که \mathbf{k}' بردار انتشار موجی را نشان دهد که به نقطه‌ی مشاهده‌ی \mathbf{x} می‌رسد. آنگاه برای r های بزرگ

$$e^{\pm ik|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \simeq e^{\pm ikr} e^{\mp ik' \cdot \mathbf{x}'} \quad (۲۹-۱-۷)$$

به دست می‌آید. می‌توانیم به جای $1/|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$ فقط $1/r$ را بنویسیم. به علاوه برای رهایی از تکرار نوشتن \hbar ها مثلاً در $1/(2\pi\hbar)^{3/2}$ ، مناسب است که به جای $|\mathbf{p}_i\rangle$ از $|\mathbf{k}\rangle$ استفاده کنیم. که در آن

$$\mathbf{k} \equiv \frac{\mathbf{p}_i}{\hbar} \quad (۳۰-۱-۷)$$

از آن جا که به ازای

$$\langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle = \delta^{(3)}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (۳۱-۱-۷)$$

$|\mathbf{k}\rangle$ بهنجار می‌شود، داریم:

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle = \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}}{(2\pi)^{3/2}} \quad (۳۲-۱-۷)$$

بنابراین، سرانجام خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} | \psi^{(+)} \rangle &\xrightarrow{\text{بزرگی } r} \langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle - \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3x' e^{-ik' \cdot \mathbf{x}'} V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \psi^{(+)} \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \right] \end{aligned} \quad (۳۳-۱-۷)$$

این شکل بسیار تمیز و شفاف است و بیان می‌کند که ما یک موج تخت اولیه با جهت انتشار \mathbf{k} به علاوه یک موج کروی خروجی با دامنه‌ی $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ داریم که $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ برابر است با:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) &\equiv -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \int d^3x' \frac{e^{-ik' \cdot \mathbf{x}'}}{(2\pi)^{3/2}} V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \psi^{(+)} \rangle \\ &= -\frac{1}{4\pi} (2\pi)^3 \frac{2m}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}' | V | \psi^{(+)} \rangle \end{aligned} \quad (۳۴-۱-۷)$$

به همین صورت، می‌توانیم از (۲۲-۱-۷) و (۲۹-۱-۷) نشان دهیم که $\langle \mathbf{x} | \psi^{(-)} \rangle$ متناظر با یک موج تخت اولیه در راستای انتشار \mathbf{k} به علاوه یک موج کروی ورودی با وابستگی فضایی e^{-ikr}/r و بزرگی $\langle -\mathbf{k}' | V | \psi^{(-)} \rangle = -(1/4\pi)(2\pi)^3(2m/\hbar^2)$ است.

برای به دست آوردن سطح مقطع دیفرانسیلی $d\sigma/d\Omega$ می‌توانیم تعداد زیادی از ذرات را در نظر بگیریم که به طور یکسان پراکنده شده‌اند و همگی با تابع موج (۳۲-۱-۷) مشخص می‌شوند. سپس می‌توان پرسید که چه تعداد از ذرات فرودی، در واحد تعداد ذرات ورودی در حجم یک و در واحد زمان، از یک صفحه‌ی عمودی عبور می‌کنند؟ این دقیقاً متناسب با شار احتمال است و ناشی از اولین جمله‌ی سمت چپ (۳۳-۱-۷) می‌باشد. همچنین ممکن است بپرسیم که چه تعداد از ذرات پراکنده شده که به ناحیه‌ی کوچک $d\sigma$ وارد می‌شوند المان زاویه‌ی فضایی دیفرانسیلی $d\Omega$ را می‌گیرند؟ پیداست که:

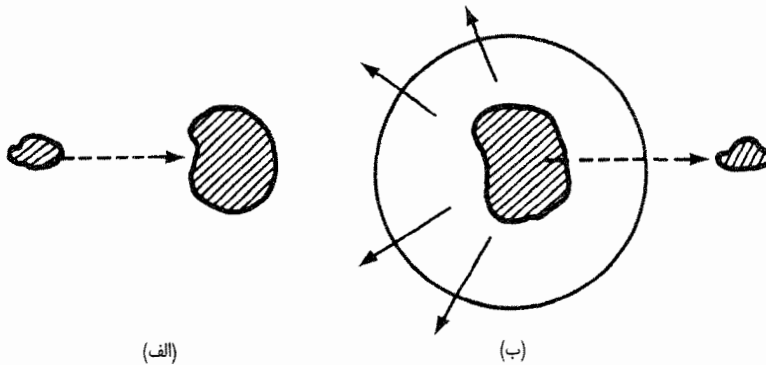
$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega &= \frac{\text{تعداد ذرات پراکنده شده در } d\Omega \text{ در هر واحد زمانی}}{\text{تعداد ذرات فرودی که از واحد سطح در واحد زمان عبور کرده‌اند}} \\ &= \frac{r^2 \left| \frac{d}{dz} \right|_{\text{پراکنده}}}{\left| \frac{d}{dz} \right|_{\text{فرودی}}} d\Omega = |f(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 d\Omega. \end{aligned} \quad (۳۵-۱-۷)$$

بنابراین سطح مقطع دیفرانسیلی برابر است با:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 \quad (۳۶-۱-۷)$$

توصیف بسته موجی

خواننده ممکن است تعجب کرده باشد که چطور در این جا فرمول بندی مستقل از زمان پراکندگی ما با حرکت ذره مقید به مرکز پراکندگی ارتباط پیدا می کند. تابع موج فرودی که ما در این جا استفاده کرده ایم، هم در فضا و هم در زمان گستره ی بی نهایت دارد. برای این که وضعیت واقعی تر شود، یک بسته موج (یک عنوان سخت!) را در نظر می گیریم که به مرکز پراکندگی نزدیک می شود.^۱



شکل ۷-۲: (الف) بسته موج فرودی در ابتدا به مرکز پراکندگی نزدیک می شود. (ب) بسته موج فرودی در جهت ابتدایی خود به حرکت ادامه می دهد، همچنین یک موج کروی خروجی نیز وجود دارد (پس از یک مدت زمان طولانی).

پس از گذر زمان طولانی بسته ی موج اولیه را که در جهت نخست، به حرکت ادامه می دهد به علاوه ی یک موج کروی که به سمت بیرون می رود، داریم. این وضعیت در شکل ۷-۲ نشان داده شده است. در واقع، استفاده از موج تخت تا وقتی رضایت بخش است که ابعاد بسته ی موج بسیار بزرگ تر از اندازه ی پراکنده ساز (یا محدوده ی V) باشد.

۲.۷ تقریب بورن

معادله ی (۷-۱-۳۴) هنوز به طور مستقیم در محاسبه ی سطح مقطع کارساز نیست چون در عبارت مربوط به $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ ، کت مجهول $\langle \psi^{(+)} | \psi \rangle$ ظاهر می شود. اگر اثر پراکنده ساز زیاد قوی نباشد، می توانیم پی ببریم که تعویض $\langle \mathbf{x}' | \psi^{(+)} \rangle$ (که در زیر انتگرال ظاهر می شود) با $\langle \mathbf{x}' | \phi \rangle$ ، تقریب زیاد بدی نباشد. یعنی:

$$\langle \mathbf{x}' | \psi^{(+)} \rangle \rightarrow \langle \mathbf{x}' | \phi \rangle = \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}'}}{(2\pi)^{3/2}} \quad (۷-۲-۱)$$

^۱ برای بررسی بیشتر رهیافت بسته موجی، کتاب ام. ال. گولد برگر و کی. ام. واتسن، نظریه ی برخورد، فصل ۳ (نیویورک؛ جان دیلی و ۱۹۶۴) و آر. جی. نیوتن، نظریه ی پراکندگی موجها و ذرات، فصل ۶ (نیویورک؛ مک گراو- هیل و ۱۹۶۶) را ببینید.

سپس یک عبارت تقریبی برای $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ به دست می آوریم. از آن جا که ما پتانسیل را مرتبه اول در نظر می گیریم، دامنه ی تقریبی که به دست می آید، دامنه ی مرتبه اول بورن نامیده می شود و با $f^{(1)}$ مشخص می شود:

$$f^{(1)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}'} V(\mathbf{x}') \quad (۲-۲-۷)$$

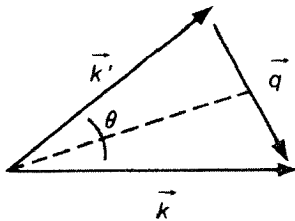
به عبارت دیگر، صرف نظر از $(2m/4\pi\hbar^2)$ ، دامنه ی مرتبه اول، درست همان تبدیل فوریه ی سه بعدی پتانسیل V نسبت به $\mathbf{q} \equiv \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ است.

برای یک پتانسیل متقارن کروی $f^{(1)}(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ تابعی از $|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|$ است که با رابطه ی

$$|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| \equiv q = 2k \sin \frac{\theta}{2} \quad (۳-۲-۷)$$

داده می شود (به یاد بیاورید که با پایستگی انرژی $|\mathbf{k}'| = k$ است). شکل ۳-۷ را ببینید. می توانیم انتگرال زاویه ای را صریحاً محاسبه کنیم، آنگاه به دست می آوریم:

$$\begin{aligned} f^{(1)}(\theta) &= -\frac{1}{2} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{iq} \int_0^\infty \frac{r^2}{r} V(r) (e^{iqr} - e^{-iqr}) dr \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{q} \int_0^\infty r V(r) \sin qr dr \end{aligned} \quad (۴-۲-۷)$$



شکل ۳-۷: پراکندگی با زاویه ی θ که در آن $q = k - k'$ است.

به عنوان یک مثال، پراکندگی پتانسیل یوکاوا:

$$V(r) = \frac{V_0 e^{-\mu r}}{\mu r} \quad (۵-۲-۷)$$

را در نظر می گیریم. که در آن V_0 مستقل از r است و $1/\mu$ ، به طور حتم، مربوط به گستره ی پتانسیل است. دقت کنید که به ازای $1/\mu \gg r$ ، پتانسیل V به سرعت به سمت صفر میل می کند. برای این پتانسیل به دست می آوریم [از (۴-۲-۷)]:

$$f^{(1)}(\theta) = -\left(\frac{2mV_0}{\mu\hbar^2}\right) \frac{1}{q^2 + \mu^2} \quad (۶-۲-۷)$$

که از

$$\begin{aligned} \text{Im} \left[\int_0^\infty e^{-\mu r} e^{iqr} dr \right] &= -\text{Im} \left(\frac{1}{-\mu + iq} \right) \\ &= \frac{q}{\mu^2 + q^2} \end{aligned} \quad (۷-۲-۷)$$

استفاده کرده‌ایم. همچنین توجه کنید که

$$q^2 = 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} = 2k^2(1 - \cos \theta) \quad (۸-۲-۷)$$

بنابراین در اولین تقریب بورن، سطح مقطع دیفرانسیلی برای پراکندگی با پتانسیل یوکاوا عبارت است از:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) \approx \left(\frac{2mV_0}{\mu\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{[2k^2(1 - \cos \theta) + \mu^2]^2} \quad (۹-۲-۷)$$

جالب است در این جا ببینیم که پتانسیل یوکاوا به‌ازای $\mu \rightarrow 0$ به پتانسیل کولنی کاهش می‌یابد. این مسأله وقتی رخ می‌دهد که در فرآیند حدگیری نسبت V_0/μ ثابت بماند. (برای مثال، برابر با $ZZ'e^2$ باشد). آنگاه می‌بینیم که سطح مقطع دیفرانسیلی بورن که از این روش به‌دست آمده، می‌شود:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) = \frac{(2m)^2 (ZZ'e^2)^2}{\hbar^4} \frac{1}{16k^4 \sin^4(\theta/2)} \quad (۱۰-۲-۷)$$

اگر $\hbar k$ را با $|p|$ برابر بگیریم، \hbar ظاهر نمی‌شود. بنابراین:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) = \frac{1}{16} \left(\frac{ZZ'e^2}{E_{KE}}\right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)} \quad (۱۱-۲-۷)$$

که در آن $E_{KE} = |p|^2/2m$ است. این دقیقاً همان سطح مقطع پراکندگی رادرفورد است که به‌شکل کلاسیکی به‌دست می‌آید.

به رابطه‌ی (۴-۲-۷)، دامنه‌ی بورن با پتانسیل متقارن کروی بازمی‌گردیم. چند نکته‌ی کلی وجود دارد اگر $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ با دامنه‌ی مرتبه اول $f^{(1)}$ تقریب زده شود، باید در نظر گرفته شود.

۱- $d\sigma/d\Omega$ ، یا $f(\theta)$ ، فقط تابعی از q است. یعنی $f(\theta)$ وابسته به انرژی $(\hbar^2 k^2/2m)$ است و θ فقط در ترکیب $2k^2(1 - \cos \theta)$ است.

۲- $f(\theta)$ همواره حقیقی است.

۳- $d\sigma/d\Omega$ مستقل از علامت V است.

۴- برای k های کوچک (q الزاماً کوچک است)

$$f^{(1)}(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int V(r) d^3x$$

شامل انتگرال حجمی مستقل از θ .

۵- $f(\theta)$ برای q های بزرگ که ناشی از نوسان سریع انتگرالده هستند، کوچک است.

اکنون بیایید تا درباره‌ی اعتبار تقریب مرتبه اول بورن بحث کنیم. از مشتق گیری پیدااست که اگر تقریب بورن اعمال شدنی باشد، $\langle \mathbf{x} | \psi^{(+)} \rangle$ در محدوده‌ی پتانسیل، نباید زیاد با $\langle \mathbf{x} | \phi \rangle$ تفاوت داشته باشد. (محدوده‌ی پتانسیل یعنی منطقه‌ای که در آن $V(\mathbf{x})$ محسوس باشد.) در غیر این صورت تعویض $\langle \psi^{(+)} |$ با $|\phi\rangle$ مجاز نخواهد بود. به عبارت دیگر انحراف موج فرودی باید کوچک باشد. به عبارت دقیق (۷-۱-۲۲) بازمی‌گردیم. دقت می‌کنیم، شرطی که با آن $\langle \mathbf{x} | \psi^{(+)} \rangle$ در مرکز پتانسیل پراکندگی $\mathbf{x} \approx 0$ ، زیاد تفاوتی با $\langle \mathbf{x} | \phi \rangle$ ندارد عبارت است از:

$$\left| \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \int d^3x' \frac{e^{ikr'}}{r'} V(\mathbf{x}') e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}'} \right| \ll 1 \quad (۷-۲-۱۲)$$

اکنون به بررسی این می‌پردازیم که مورد خاص پتانسیل یوکاوا در (۷-۲-۵) بر چه چیزی می‌تواند دلالت داشته باشد. در انرژی‌های پایین - یعنی برای k کوچک ($k \ll \mu$) - می‌توانیم به جای $e^{ikr'}$ مقدار ۱ را قرار دهیم. به این صورت داریم:

$$\frac{2m}{\hbar^2} \frac{|V_0|}{\mu^2} \ll 1 \quad (۷-۲-۱۳)$$

این الزام می‌تواند با شرط پتانسیل یوکاوا برای گسترش یک حالت مقید مقایسه شود، می‌توان نشان داد که باید داشته باشیم:

$$\frac{2m}{\hbar^2 \mu^2} |V_0| \geq 2.7 \quad (۷-۲-۱۴)$$

در این عبارت V_0 منفی است. به عبارت دیگر، اگر پتانسیل به اندازه‌ای بزرگ باشد که یک حالت مقید بسازد، تقریب بورن احتمالاً یک نتیجه‌ی گمراه‌کننده خواهد داد. در مقابل حد بالای k ، شرطی که به واسطه‌ی آن دومین جمله در (۷-۱-۲۲) کوچک می‌شود به این دلالت دارد که:

$$\frac{2m}{\hbar^2} \frac{|V_0|}{\mu k} \ln\left(\frac{k}{\mu}\right) \ll 1 \quad (۷-۲-۱۵)$$

باشد. هرچه k بزرگ تر شود، این نامساوی راحت تر برقرار می گردد. به طور کلی تقریب بورن در انرژی های بالا نتایج بهتری می دهد.

تقریب مرتبه های بالاتر بورن

اکنون بیاید تا تقریب مرتبه های بالاتر بورن را بررسی کنیم. در اینجا، استفاده از رهیافتی نمادین، فرمول بندی را فشرده تر می کند. برای عملگر انتقال T را قرار می دهیم. و T را به شکل

$$V|\psi^{(+)}\rangle = T|\phi\rangle \quad (۱۶-۲-۷)$$

تعریف می کنیم. با ضرب کردن معادله ی لپن - شوینگر (۶-۱-۷) در V ، به دست می آوریم:

$$T|\phi\rangle = V|\phi\rangle + V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} T|\phi\rangle \quad (۱۷-۲-۷)$$

فرض می کنیم که این رابطه برای هر $|\phi\rangle$ به ازای هر حالت موج تختی که اتخاذ کرده باشد برقرار است. به علاوه می دانیم که این ویژه کت های تکانه، کامل هستند. بنابراین، باید معادله ی عملگری زیر برقرار باشد:

$$T = V + V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} T \quad (۱۸-۲-۷)$$

اکنون دامنه ی پراکندگی (۷-۱-۳۴) را می توان [با استفاده از (۷-۲-۱۶)] با $|\phi\rangle$ که نشان دهنده ی ویژه کت های تکانه است [به شکل:

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle \quad (۱۹-۲-۷)$$

نوشت. بنابراین برای مشخص کردن $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ تنها کافی است که عملگر انتقال T را بدانیم.

می توانیم یک جواب تکرار شونده برای T به شکل

$$T = V + V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V + V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V + \dots \quad (۲۰-۲-۷)$$

بیاییم، متقابلاً می توانیم f را به شکل

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \sum_{n=1}^{\infty} f^{(n)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \quad (۲۱-۲-۷)$$

بسط دهیم. که در آن n تعداد دفعاتی است که عملگر V وارد شده است. داریم:

$$f^{(1)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle$$

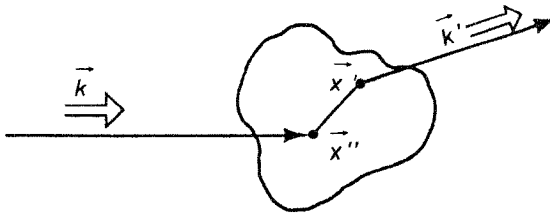
$$f^{(2)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \langle \mathbf{k}' | V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V | \mathbf{k} \rangle \quad (22-2-7)$$

اگر شکل صریحی برای $f^{(2)}$ نیاز داشته باشیم، می‌توانیم آن را به صورت

$$f^{(2)} = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \int d^3x' \int d^3x'' \langle \mathbf{k}' | \mathbf{x}' \rangle V(\mathbf{x}') \\ \times \left\langle \mathbf{x}' \left| \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} \right| \mathbf{x}'' \right\rangle V(\mathbf{x}'') \langle \mathbf{x}'' | \mathbf{k} \rangle$$

$$= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \int d^3x'' e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}'} V(\mathbf{x}') \\ \times \left[\frac{2m}{\hbar^2} G_+(\mathbf{x}', \mathbf{x}'') \right] V(\mathbf{x}'') e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}''} \quad (23-2-7)$$

بنویسیم. تفسیر فیزیکی (۲۳-۲-۷)، در شکل ۴-۷ آمده است. که در آن موج فرودی در \mathbf{x}'' اثر می‌کند (که حضور $V(\mathbf{x}'')$ را توصیف می‌کند) و سپس تحت تابع گرین معادله‌ی هلمهولتز (۷-۱-۱۸) از \mathbf{x}'' تا \mathbf{x}' انتشار می‌یابد. متوالیاً در \mathbf{x}' دومین برهم‌کنش رخ می‌دهد (بنابراین $V(\mathbf{x}')$ ظاهر می‌شود) و سرانجام موج در جهت \mathbf{k}' پراکنده می‌شود. به عبارت دیگر $f^{(2)}$ متناظر با نمایش پراکندگی در دو مرحله است. به این ترتیب، $f^{(3)}$ یک فرآیند سه‌مرحله‌ای را نشان می‌دهد و این رویه ادامه دارد.



شکل ۴-۷: تفسیر فیزیکی تقریب مرتبه بالاتر بورن، از مرتبه $f^{(2)}$

۳.۷ قضیه‌ی اپتیکی

رابطه‌ی بسیار مشهوری وجود دارد که به‌طور عوامانه به بور، پیرز و بلازک منسوب است [یادداشت ویراستار: این رابطه در واقع نتیجه‌ی کار ای. فینبرگ است.^۱ (۱۹۳۲ و ۴۰. *Phys. Rev.*). آر. جی نیوتن

^۱ همان‌طور که در مقاله‌ی نیوتن آمده است (به مرجع ۸ آن مراجعه کنید)، مقاله‌ی فینبرگ در تاریخ ۱ آوریل ۱۹۳۲ چاپ شده است، اما تاریخ دریافت آن ۸ سپتامبر ۱۹۳۲ است. یعنی علت را نقص می‌کند.

(۱۹۷۶ و ۶۳۹ و ۴۴. *Am.J. Phys.*) را برای یافتن زمینه‌ی تاریخی، ببینید. [و به قضیه‌ی اپتیکی مشهور است. این قضیه رابطه‌ی بخش موهمی دامنه‌ی پراکندگی جلوسو $f(\theta = 0)$ را با سطح مقطع پراکندگی کل σ_{tot} ، به شکل زیر شرح می‌دهد:

$$\text{Im } f(\theta = 0) = \frac{k \sigma_{\text{tot}}}{4\pi} \quad (۱-۳-۷)$$

که در آن

$$f(\theta = 0) \equiv f(\mathbf{k}, \mathbf{k}) \quad (۲-۲-۷)$$

است. قرار دادن $\mathbf{k}' \equiv \mathbf{k}$ ، پراکندگی را در جهت جلو پیش می‌برد، آنگاه:

$$\sigma_{\text{tot}} \equiv \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \quad (۳-۳-۷)$$

اثبات: از (۱۹-۲-۷) داریم:

$$f(\theta = 0) = f(\mathbf{k}, \mathbf{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \langle \mathbf{k} | T | \mathbf{k} \rangle \quad (۴-۳-۷)$$

سپس $\text{Im} \langle \mathbf{k} | T | \mathbf{k} \rangle$ را با استفاده از (۱۶-۲-۷) و (۱۶-۱-۷) و هرمیتی بودن V ، محاسبه می‌کنیم:

$$\begin{aligned} \text{Im} \langle \mathbf{k} | T | \mathbf{k} \rangle &= \text{Im} \langle \mathbf{k} | V | \psi^{(+)} \rangle \\ &= \text{Im} \left[\left(\langle \psi^{(+)} | - \langle \psi^{(+)} | V \frac{1}{E - H_0 - i\varepsilon} V | \psi^{(+)} \rangle \right) \right] \end{aligned} \quad (۵-۳-۷)$$

اکنون از رابطه‌ی مشهور

$$\frac{1}{E - H_0 - i\varepsilon} = \text{Pr.} \left(\frac{1}{E - H_0} \right) + i\pi\delta(E - H_0)$$

برای ساده‌تر شدن سمت چپ (۵-۳-۷) استفاده می‌کنیم. شکل زیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} \text{Im}(\langle \psi^{(+)} | V | \psi^{(+)} \rangle) - \text{Im} \langle \psi^{(+)} | V \text{Pr.} \frac{1}{E - H_0} V | \psi^{(+)} \rangle \\ - \text{Im} \langle \psi^{(+)} | V i\pi\delta(E - H_0) V | \psi^{(+)} \rangle \end{aligned} \quad (۶-۳-۷)$$

دو جمله‌ی اول (۶-۳-۷) صفر می‌شوند که این به خاطر هرمیتی بودن V و $V \text{Pr.}[1/(E - H_0)]V$ ، است.

بنابراین (۶-۳-۷) به

$$- \pi \langle \psi^{(+)} | V \delta(E - H_0) V | \psi^{(+)} \rangle \quad (۷-۳-۷)$$

ساده می‌شود. دوباره می‌توانیم (۷-۳-۷) با استفاده از (۱۶-۲-۷) و $|\phi\rangle = |\mathbf{k}\rangle$ بازنویسی کنیم. داریم:

$$\begin{aligned}
 \text{Im}\langle \mathbf{k}|T|\mathbf{k}\rangle &= -\pi\langle \mathbf{k}|T^\dagger\delta(E-H_0)T|\mathbf{k}\rangle \\
 &= -\pi\int d^3k'\langle \mathbf{k}|T^\dagger|\mathbf{k}'\rangle\langle \mathbf{k}'|T|\mathbf{k}\rangle\delta\left(E-\frac{\hbar^2k'^2}{2m}\right) \\
 &= -\pi\int d\Omega'\frac{mk}{\hbar^2}|\langle \mathbf{k}'|T|\mathbf{k}\rangle|^2
 \end{aligned}
 \tag{۸-۳-۷}$$

که در آن از $d^3k' = k'^2 dE(dk'/dE) d\Omega'$ استفاده کرده ایم. تاج دلنا محدودیت $E = \hbar^2k'^2/2m$ را دارد [چون $dE = (\hbar^2k'/m) dk'$ است] و سرانجام $k' = k$ می باشد. از (۴-۳-۷) و (۸-۳-۷) داریم:

$$\begin{aligned}
 \text{Im} f(0) &= -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}(2\pi)^3\left(-\frac{\pi mk}{\hbar^2}\int d\Omega'|\langle \mathbf{k}'|T|\mathbf{k}\rangle|^2\right) \\
 &= \frac{k\sigma_{\text{tot}}}{4\pi}
 \end{aligned}
 \tag{۹-۳-۷}$$

که در آخرین مرحله از (۳۶-۱-۷)، (۱۹-۲-۷) و (۳-۳-۷) استفاده کرده ایم. □

پس از آنکه در مورد پراکنندگی سایه‌ای بحث کردیم، می توانیم مفهوم فیزیکی قضیه‌ی اپتیکی را دریابیم.

۴.۷ تقریب ایکونال

این تقریب وضعیتی را در بر می گیرد که در آن $V(\mathbf{x})$ تغییرات خیلی کوچکی روی فاصله‌ای از مرتبه‌ی طول موج λ (که می توان آن را "کوچک" در نظر گرفت) دارد. توجه کنید که لازم نیست خود V طوری ضعیف باشد که $E \gg |V|$ برقرار باشد. بنابراین حوزه‌ی اعتبار این تقریب، با تقریب بورن متفاوت است. در این شرایط، مفهوم مسیر نیمه کلاسیکی به کار می آید و ما تابع موج دقیق $\psi^{(+)}$ را با تابع موج نیمه کلاسیکی [(۲-۴-۲) و (۱۸-۴-۲)] عوض می کنیم. داریم:

$$\psi^{(+)} \sim e^{iS(\mathbf{x})/\hbar}
 \tag{۱-۴-۷}$$

این کار به معادله‌ی هامیلتون-ژاکوبی برای S می انجامد.

$$\frac{(\nabla S)^2}{2m} + V = E = \frac{\hbar^2k^2}{2m}
 \tag{۲-۴-۷}$$

قبلاً در بخش ۴-۲ راجع به این موضوع بحث کرده ایم. هدف ما محاسبه‌ی S از (۲-۴-۷) و به وسیله‌ی در نظر گرفتن تقریب دیگری است که در آن مسیر کلاسیکی را یک مسیر مستقیم در نظر می گیریم. این مسیر

در انرژی‌های بالا به میزان کوچکی انحراف می‌یابد.^۱ وضعیتی که در شکل ۷-۵ نشان داده شده است را در نظر بگیرید که در آن مسیر خط راست در جهت z گرفته شده است. با انتگرال‌گیری از (۷-۴-۲) داریم:

$$\frac{S}{\hbar} = \int_{-\infty}^z \left[k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V(\sqrt{b^2 + z'^2}) \right]^{1/2} dz' + \text{ثابت} \quad (۳-۴-۷)$$

ثابت جمع شده را طوری انتخاب می‌کنیم که

$$\frac{S}{\hbar} \rightarrow kz \quad \leftarrow V \rightarrow 0 \quad \text{به ازای} \quad (۴-۴-۷)$$

بنابراین شکل تابع موجی (۷-۴-۱) در حد پتانسیل صفر، دوباره ایجاد می‌شود. سپس می‌توانیم معادله‌ی (۷-۴-۳) را به شکل

$$\begin{aligned} \frac{S}{\hbar} &= kz + \int_{-\infty}^z \left[\sqrt{k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V(\sqrt{b^2 + z'^2})} - k \right] dz' \\ &\cong kz - \frac{m}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^z V(\sqrt{b^2 + z'^2}) dz' \end{aligned} \quad (۵-۴-۷)$$

بنویسیم که در آن برای $E \gg V$ ، در $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ از

$$\sqrt{k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V(\sqrt{b^2 + z'^2})} \sim k - \frac{mV}{\hbar^2 k}$$

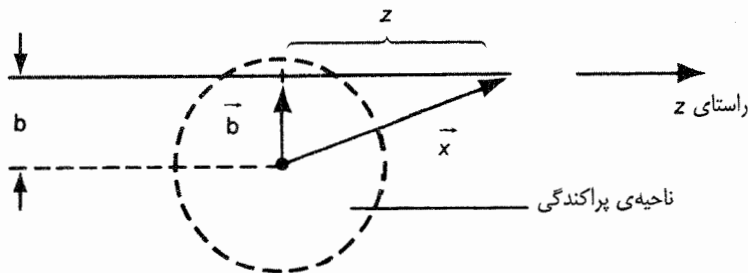
استفاده می‌کنیم. بنابراین:

$$\psi^{(+)}(\mathbf{x}) = \psi^{(+)}(\mathbf{b} + z\hat{z}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{ikz} \exp \left[-\frac{im}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^z V(\sqrt{b^2 + z'^2}) dz' \right] \quad (۶-۴-۷)$$

اما (۶-۴-۷) شکل مجانبی درستی برای موج فرودی به علاوه موج کروی بیرون‌رو، ندارد (یعنی، این رابطه به شکل $f(\theta)(e^{ikr}/r) + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$ نیست و در واقع در مسیر اولیه‌ی خود باقی می‌ماند). به همین خاطر هنوز نمی‌توانیم از (۷-۴-۳) به جهت به دست آوردن یک عبارت تقریبی برای $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ استفاده کنیم. به عبارت دیگر:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) &= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}'} V(\sqrt{b^2 + z'^2}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}'} \\ &\quad \times \exp \left[-\frac{im}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^{z'} V(\sqrt{b^2 + z''^2}) dz'' \right] \end{aligned} \quad (۷-۴-۷)$$

^۱ بدون احتیاج به این که بگوییم، حل (۷-۴-۲) برای تعیین مسیر کلاسیکی در حالت کلی ممنوع است!



شکل ۵-۷: طرحی برای توصیف تقریباً یک‌نوال که در آن مسیر خط راست کلاسیکی در راستای z و $|x|=r$ و $b=|b|$ است.

توجه کنید که بدون جمله‌ی آخر، $\exp[\dots]$ ، رابطه‌ی (۷-۴-۷) درست شبیه به دامنه‌ی مرتبه اول بورن در (۷-۲-۷) است. انتگرال سه‌بعدی (d^3x') در (۷-۴-۷) را با معرفی مختصات استوانه‌ای $d^3x' = b db d\phi_b dz'$ محاسبه می‌کنیم (شکل ۵-۷ را ببینید) و دقت می‌کنیم که:

$$(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}' = (\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot (\mathbf{b} + z' \hat{\mathbf{z}}) \approx -\mathbf{k}' \cdot \mathbf{b} \quad (۸-۴-۷)$$

که در آن از $\mathbf{k} \perp \mathbf{b}$ و $(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \hat{\mathbf{z}} \sim 0(\theta^2)$ که می‌توان برای انحراف‌های کوچک θ را در آن نادیده گرفت، استفاده کرده‌ایم. بدون از دست دادن عمومیت مسأله، پراکندگی در صفحه‌ی xz را انتخاب می‌کنیم و می‌نویسیم:

$$\mathbf{k}' \cdot \mathbf{b} = (k \sin \theta \hat{\mathbf{x}} + k \cos \theta \hat{\mathbf{z}}) \cdot (b \cos \phi_b \hat{\mathbf{x}} + b \sin \phi_b \hat{\mathbf{y}}) \approx kb \theta \cos \phi_b \quad (۹-۴-۷)$$

عبارت $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ می‌شود:

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty b db \int_0^{2\pi} d\phi_b e^{-ikb\theta \cos \phi_b} \times \int_{-\infty}^{+\infty} dz V \exp\left[\frac{-im}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^z V dz'\right] \quad (۱۰-۴-۷)$$

سپس از تساوی زیر استفاده می‌کنیم:

$$\int_0^{2\pi} d\phi_b e^{-ikb\theta \cos \phi_b} = 2\pi J_0(kb\theta) \quad (۱۱-۴-۷)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dz V \exp\left[\frac{-im}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^z V dz'\right] = \frac{i\hbar^2 k}{m} \exp\left[\frac{-im}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^z V dz'\right] \Bigg|_{z=-\infty}^{z=+\infty}$$

$$(۱۲-۴-۷)$$

که البته در سمت راست (۷-۴-۱۲) سهم $z = -\infty$ در تابع نمایی صفر می‌شود. سرانجام،

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -ik \int_0^{\infty} db b J_0(kb\theta) [e^{2i\Delta(b)} - 1] \quad (۷-۴-۱۳)$$

می‌شود که در آن:

$$\Delta(b) \equiv \frac{-m}{2k\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} V(\sqrt{b^2 + z^2}) dz \quad (۷-۴-۱۴)$$

است. در (۷-۴-۱۴) پارامتر برخورد b را ثابت نگه می‌داریم و در مسیر خط راست z که در شکل ۷-۵ نشان داده شده است، انتگرال می‌گیریم. اگر b بزرگ‌تر از گستره‌ی V باشد، $[e^{2i\Delta(b)} - 1]$ سهمی در (۷-۴-۱۳) نخواهد داشت.

به‌طور سراسری نشان دادیم که تقریب ایکونال در قضیه‌ی اپتیکی (۷-۳-۱) صدق می‌کند. این اثبات به‌علاوه‌ی چند رهیافت جالب دیگر (برای مثال، وقتی که V یک پتانسیل گاوسی است $\Delta(b)$ در فضای b گاوسی می‌شود) در دیگر متون مورد بحث قرار گرفته است (گاتفرید ۱۹۶۶، برای موردی که V پتانسیل یوکاوا است). مسأله‌ی ۷ این فصل را ببینید.

۵.۷ حالت‌های ذره‌ی آزاد: موج‌های تخت در مقابل موج‌های کروی

در بررسی پراکندگی بوسیله‌ی یک پتانسیل هماهنگ کروی، اغلب می‌آزماییم که حالت‌هایی که تکانه‌ی زاویه‌ای معین دارند، چگونه تحت تأثیر پراکنده‌ساز قرار می‌گیرند. این چنین ملاحظاتی به روش موج‌های پاره‌ای منجر می‌شود، که با جزییات در بخش ۷-۶ مورد بررسی قرار می‌گیرد. اما قبل از بحث راجع به تجزیه‌ی تکانه‌ی زاویه‌ای حالت‌های پراکنده شده، بیایید تا ابتدا درباره‌ی حالت‌های ذره‌ی آزاد، که ویژه حالت‌های تکانه‌ی زاویه‌ای هم هستند، بحث کنیم.

برای یک ذره‌ی آزاد، پیداست که هامیلتونی همان عملگر انرژی جنبشی است و این عملگر با عملگر تکانه جابه‌جا می‌شود. به‌همین خاطر در بخش ۷-۱ نیز گفتیم که $\langle \phi |$ که یک ویژه‌کت هامیلتونی ذره‌ی آزاد است، ویژه‌کت تکانه یا حالت موج تخت $\langle \mathbf{k} |$ نیز هست که ویژه‌مقدار عملگر تکانه برابر با $\hbar \mathbf{k}$ می‌باشد. دقت کنید که هنوز، هامیلتونی ذره‌ی آزاد با \mathbf{L}^2 و H_0 جابه‌جا می‌شود. بنابراین در نظر گرفتن یک ویژه‌کت همزمان H_0 ، \mathbf{L}^2 و L_z ممکن است. صرف‌نظر از اسپین، چنین حالتی که با $|E, l, m\rangle$ معین می‌شود، اغلب حالت موج کروی نام می‌گیرد.

به طور عام، کلی ترین حالت ذره‌ی آزاد را می‌توان به عنوان یک برهم نهی از $\langle E, l, m |$ ها با E و l و m های مختلف در نظر گرفت. همچنین می‌توان کلی ترین حالت ذره‌ی آزاد را به شکل یک برهم نهی از $\langle \mathbf{k} |$ با k های متفاوت فرض کرد که k ها هم در جهت و هم در اندازه با هم متفاوتند. به عبارت دیگر، حالت ذره‌ی آزاد هم می‌تواند با استفاده از پایه‌های موج تخت $\{ | \mathbf{k} \rangle \}$ و هم پایه‌های موج کروی مورد ارزیابی قرار گیرد.

اکنون به بررسی تابع تبدیل $\{ | E, l, m \rangle \}$ می‌پردازیم که پایه‌های موج تخت را به پایه‌های موج کروی وصل می‌کند. می‌توانیم این کمیت را نیز به عنوان تابع موجی در فضای تکانه برای موج کروی که با E, L و m مشخص می‌شود، در نظر بگیریم. قبول می‌کنیم که شرط بهنجارش برای ویژه‌کت موج کروی به شکل زیر است:

$$\langle E', l', m' | E, l, m \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \delta(E - E') \quad (1-5-7)$$

همانند تابع موج در فضای مکان، ممکن است حدس بزنیم که وابستگی زاویه‌ای به شکل

$$\langle \mathbf{k} | E, l, m \rangle = g_{lE}(k) Y_l^m(\hat{\mathbf{k}}) \quad (2-5-7)$$

است. برای اثبات محکم این رابطه به شکل زیر عمل می‌کنیم: نخست، ویژه‌کت تکانه $| k \hat{\mathbf{z}} \rangle$ یعنی موج تختی که در راستای مثبت z انتشار می‌یابد را در نظر می‌گیریم. یکی از ویژگی‌های مهم این موج تخت این است که مؤلفه‌ی تکانه‌ی زاویه‌ای در راستای z ندارد:

$$L_z | k \hat{\mathbf{z}} \rangle = (xp_y - yp_x) | k_x = 0, k_y = 0, k_z = k \rangle = 0 \quad (3-5-7)$$

از ملاحظات کلاسیکی این پذیرفتنی است که مؤلفه‌ی تکانه‌ی زاویه‌ای در راستای انتشار باید صفر باشد چون $\mathbf{L} \cdot \mathbf{p} = (\mathbf{x} \times \mathbf{p}) \cdot \mathbf{p} = 0$ است. به خاطر (3-5-7) و چون برای $m' \neq 0$ داریم: $\langle E', l', m' | k \hat{\mathbf{z}} \rangle = 0$ می‌توانیم $| k \hat{\mathbf{z}} \rangle$ را به شکل زیر بسط دهیم:

$$| k \hat{\mathbf{z}} \rangle = \sum_{l'} \int dE' | E', l', m' = 0 \rangle \langle E', l', m' = 0 | k \hat{\mathbf{z}} \rangle \quad (4-5-7)$$

توجه کنید که روی m' جمع نمی‌بندیم، m' همواره برابر با صفر است. می‌توانیم کلی ترین ویژه‌کت تکانه را در جهت \mathbf{k} که با θ و ϕ مشخص می‌شود، به دست آوریم. این ویژه‌کت با اعمال عملگر چرخش مناسب $| k \hat{\mathbf{z}} \rangle$ به دست می‌آید. [شکل 3-3 و (3-6-47) را ببینید]:

$$| \mathbf{k} \rangle = \mathcal{D}(\alpha = \phi, \beta = \theta, \gamma = 0) | k \hat{\mathbf{z}} \rangle \quad (5-5-7)$$

با ضرب $\langle E, l, m |$ از سمت چپ در (5-5-7) به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned}
 \langle E, l, m | \mathbf{k} \rangle &= \sum_{l'} \int dE' \langle E, l, m | \mathcal{D}(\alpha = \phi, \beta = \theta, \gamma = 0) | E', l', m' = 0 \rangle \\
 &\quad \times \langle E', l', m' = 0 | k \hat{z} \rangle \\
 &= \sum_{l'} \int dE' \mathcal{D}_{m0}^{(l')}(\alpha = \phi, \beta = \theta, \gamma = 0) \\
 &\quad \times \delta_{ll'} \delta(E - E') \langle E', l', m' = 0 | k \hat{z} \rangle \\
 &= \mathcal{D}_{m0}^{(l)}(\alpha = \phi, \beta = \theta, \gamma = 0) \langle E, l, m = 0 | k \hat{z} \rangle
 \end{aligned}
 \tag{۶-۵-۷}$$

اکنون $\langle E, l, m = 0 | k \hat{z} \rangle$ مستقل از جهت گیری \mathbf{k} است- یعنی مستقل از θ و ϕ است- و به خوبی

می‌توانیم به آن $\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} g_{lE}^*(k)$ بگوییم. بنابراین با استفاده از (۳-۶-۵) می‌توانیم بنویسیم:

$$\langle \mathbf{k} | E, l, m \rangle = g_{lE}(k) Y_l^m(\hat{\mathbf{k}})
 \tag{۷-۵-۷}$$

بگذارید تا $g_{lE}(k)$ را مشخص کنیم. نخست توجه می‌کنیم که

$$(H_0 - E) | E, l, m \rangle = 0
 \tag{۸-۵-۷}$$

است. اما معمولاً $H_0 - E$ را روی ویژه برای تکانه $|\mathbf{k}\rangle$ به شکل زیر اثر می‌دهیم:

$$\langle \mathbf{k} | (H_0 - E) = \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) \langle \mathbf{k} |
 \tag{۹-۵-۷}$$

با ضرب $| E, l, m \rangle$ از سمت راست در (۷-۵-۹)، داریم:

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) \langle \mathbf{k} | E, l, m \rangle = 0
 \tag{۱۰-۵-۷}$$

یعنی $\langle \mathbf{k} | E, l, m \rangle$ فقط به ازای $\langle \mathbf{k} | E, l, m \rangle$ غیر صفر است. بنابراین باید بتوانیم $g_{lE}(k)$ را به شکل

$$g_{lE}(k) = N \delta \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right)
 \tag{۱۱-۵-۷}$$

بنویسیم. برای مشخص کردن N به شرط بهنجارش (۷-۵-۱) باز می‌گردیم. به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned}
 \langle E', l', m' | E, l, m \rangle &= \int d^3 k'' \langle E', l', m' | \mathbf{k}'' \rangle \langle \mathbf{k}'' | E, l, m \rangle \\
 &= \int k''^2 dk'' \int d\Omega_{\mathbf{k}''} |N|^2 \delta\left(\frac{\hbar^2 k''^2}{2m} - E'\right) \\
 &\quad \times \delta\left(\frac{\hbar^2 k''^2}{2m} - E\right) Y_{l', m'}^*(\hat{\mathbf{k}}'') Y_{l, m}(\hat{\mathbf{k}}'') \\
 &= \int \frac{k''^2 dE''}{dE''/dk''} \int d\Omega_{\mathbf{k}''} |N|^2 \delta\left(\frac{\hbar^2 k''^2}{2m} - E'\right) \delta\left(\frac{\hbar^2 k''^2}{2m} - E\right) \\
 &\quad \times Y_{l', m'}^*(\hat{\mathbf{k}}'') Y_{l, m}(\hat{\mathbf{k}}'') \\
 &= |N|^2 \frac{mk'}{\hbar^2} \delta(E - E') \delta_{ll'} \delta_{mm'}
 \end{aligned}
 \tag{۱۲-۵-۷}$$

که در آن $E'' = \hbar^2 k''^2 / 2m$ تعریف شده است تا انتگرال گیری نسبت به k'' را به انتگرال گیری نسبت به E'' تغییر دهد. با مقایسه‌ی این عبارت و (۱-۵-۷) می‌بینیم که $N = \hbar / \sqrt{mk}$ کفایت خواهد کرد. سرانجام می‌توانیم بنویسیم:

$$g_{lE}(k) = \frac{\hbar}{\sqrt{mk}} \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) \tag{۱۳-۵-۷}$$

بنابراین:

$$\langle \mathbf{k} | E, l, m \rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{mk}} \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) Y_{l, m}(\hat{\mathbf{k}}) \tag{۱۴-۵-۷}$$

از (۱۴-۵-۷) این‌طور استنتاج می‌کنیم که حالت موج تخت $|\mathbf{k}\rangle$ را می‌توان به‌عنوان یک برهم‌نهی از حالت‌های موج کروی آزاد با تمام مقادیر ممکن l در نظر بگیریم. به‌ویژه:

$$\begin{aligned}
 |\mathbf{k}\rangle &= \sum_l \sum_m \int dE |E, l, m\rangle \langle E, l, m | \mathbf{k}\rangle \\
 &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l |E, l, m\rangle \Bigg|_{E=\hbar^2 k^2 / 2m} \left(\frac{\hbar}{\sqrt{mk}} Y_{l, m}^*(\hat{\mathbf{k}}) \right)
 \end{aligned}
 \tag{۱۵-۵-۷}$$

از آن که بعد عرضی موج تخت محدود است، انتظار داریم که موج تخت شامل تمام مقادیر ممکن پارامتر برخورد b باشد (از نظر نیمه کلاسیکی، پارامتر برخورد $b \approx \hbar h / p$ است). از این نقطه نظر تعجب‌آور نیست

که ویژه حالت‌های تکانه‌ی (\mathbf{k}, l, m) ، وقتی برحسب حالت‌های موج کروی مورد بررسی قرار می‌گیرند، تمام مقادیر ممکن l را شامل می‌شوند.

ما تابع موج (E, l, m) را در فضای تکانه به دست آوردیم. سپس تابع موج متناظر با آن را در فضای مکان مورد بررسی قرار می‌دهیم. خواننده باید از مکانیک موجی با شکل تابع موج، موج کروی آزاد که به صورت $j_l(kr)Y_l^m(\hat{\mathbf{r}})$ است، آشنا باشد. همان تابع بسل کروی مرتبه l است (پیوست الف را ببینید). جواب دوم، $n_l(kr)$ ، نیز اگرچه در معادله دیفرانسیلی صدق می‌کند، اما غیرمجاز است. چون در مبدأ تکینه است. بنابراین می‌توانیم بنویسیم:

$$\langle \mathbf{x} | E, l, m \rangle = c_l j_l(kr) Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}) \quad (16-5-7)$$

برای مشخص کردن c_l باید از راه مقایسه وارد شویم. داریم:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle &= \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{(2\pi)^{3/2}} = \sum_l \sum_m \int dE \langle \mathbf{x} | E, l, m \rangle \langle E, l, m | \mathbf{k} \rangle \\ &= \sum_l \sum_m \int dE c_l j_l(kr) Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}) \frac{\hbar}{\sqrt{mk}} \delta\left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{k}}) \\ &= \sum_l \frac{(2l+1)}{4\pi} P_l(\hat{\mathbf{k}}\cdot\hat{\mathbf{r}}) \frac{\hbar}{\sqrt{mk}} c_l j_l(kr) \end{aligned} \quad (17-5-7)$$

در آخرین مرحله از محاسبات بالا، از قضیه‌ی جمع استفاده کرده‌ایم:

$$\sum_m Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}) Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{k}}) = [(2l+1)/4\pi] P_l(\hat{\mathbf{k}}\cdot\hat{\mathbf{r}})$$

اکنون می‌توانیم $\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} / (2\pi)^{3/2}$ را به شکل

$$\frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{(2\pi)^{3/2}} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_l (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\hat{\mathbf{k}}\cdot\hat{\mathbf{r}}) \quad (18-5-7)$$

بنویسیم. که با استفاده از نمایش انتگرالی زیر برای $j_l(kr)$ اثبات می‌شود.

$$j_l(kr) = \frac{1}{2i^l} \int_{-1}^{+1} e^{ikr\cos\theta} P_l(\cos\theta) d(\cos\theta) \quad (19-5-7)$$

با مقایسه‌ی (17-5-7) و (18-5-7) داریم:

$$c_l = \frac{i^l}{\hbar} \sqrt{\frac{2mk}{\pi}} \quad (۷-۵-۲۰)$$

به طور خلاصه، داریم:

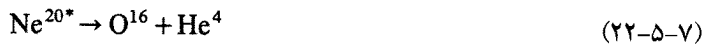
$$\langle \mathbf{k} | E, l, m \rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{mk}} \delta \left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) Y_l^m(\hat{\mathbf{k}}) \quad (۷-۵-۲۱ \text{ الف})$$

$$\langle \mathbf{x} | E, l, m \rangle = \frac{i^l}{\hbar} \sqrt{\frac{2mk}{\pi}} j_l(kr) Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}) \quad (۷-۵-۲۱ \text{ ب})$$

این عبارت در گسترش بسط موج پاره‌ای که در بخش بعد مورد بحث قرار می‌گیرد، بی‌نهایت مفید است.

این بخش را با اعمال (۷-۵-۲۱ الف) بر یک فرآیند تجزیه به پایان می‌بریم. فرض کنید یک ذره‌ی مادر با اسپین z به دو ذره‌ی اسپین صفر تجزیه شود: (اسپین 0) $C + B$ (اسپین z) A . در حالت کلی، هامیلتونی معتبر برای یک چنین فرآیند واپاشی، بسیار پیچیده است. اما، می‌دانیم که تکانه‌ی زاویه‌ای پایسته است چون هامیلتونی پایه باید تحت چرخش ناوردا باشد. بنابراین تابع موج حالت نهایی باید به شکل (۷-۵-۲۱ الف) باشد. که l باید با توجه به اسپین ذره‌ی مادر مشخص شود. این مسأله ما را قادر می‌سازد که سریعاً توزیع زاویه‌ای حاصل از تجزیه را محاسبه کنیم. چون تابع موج در فضای تکانه چیزی غیر از دامنه‌ی احتمال پیدا کردن فرآورده‌ی تجزیه با جهت تکانه‌ی نسبی \mathbf{k} نیست.

به‌عنوان یک مثال محسوس از فیزیک هسته‌ای، بگذارید تا تجزیه‌ی یک اتم برانگیخته، Ne^{20*} را در نظر بگیریم:



هم O^{16} و هم He^4 را به‌عنوان ذرات بدون اسپین می‌شناسیم. فرض کنید که عدد کوانتومی مغناطیسی هسته‌ی مادر با جهت نسبی دلخواه z برابر با ± 1 است. آن‌گاه توزیع زاویه‌ای محصول تجزیه متناسب با $|Y_1^{\pm 1}(\theta, \phi)|^2 = (3/8\pi) \sin^2 \theta$ است. که در آن (θ, ϕ) زاویه‌های قطبی هستند که با جهت نسبی \mathbf{k} محصول تجزیه تعریف می‌شوند. از طرف دیگر اگر عدد کوانتومی مغناطیسی برای یک هسته‌ی مادر با اسپین ۱ برابر با ۰ باشد، توزیع زاویه‌ای تجزیه به‌صورت $|Y_1^0(\theta, \phi)|^2 = (3/4\pi) \cos^2 \theta$ تغییر می‌کند.

برای جهت‌گیری عمومی اسپین داریم:

$$\sum_{m=-1}^1 w(m) |Y_{l=1}^m|^2 \quad (۷-۵-۲۳)$$

برای یک هسته‌ی غیرقطبیده، مقادیر $w(m)$ همگی برابر هستند و ما یک توزیع یکنواخت را به دست خواهیم آورد. این تعجب آور نیست، چون اگر ذره‌ی مادر قطبیده نباشد، جهت برگزیده‌ای نخواهیم داشت. برای چیزی با اسپین بالاتر، توزیع زاویه‌ای تجزیه پیچیده‌تر خواهد بود. اسپین بالاتر سیستم تجزیه شونده‌ی مادر، پیچیدگی بیشتری را برای توزیع زاویه‌ای محصولات تجزیه در پی خواهد داشت. به طور کلی، در طی مطالعه‌ی توزیع زاویه‌ای محصولات تجزیه، مشخص کردن اسپین هسته‌ی مادر غیرممکن است.

۶.۷ روش موج‌های پاره‌ای

بسط موج پاره‌ای

بیاید تا به مورد $V \neq 0$ باز گردیم. ما فرض می‌کنیم که پتانسیل تقارن کروی دارد، یعنی تحت چرخش در سه بعد ناوردا است. آنگاه عملگر انتقال T که با $(\mathbf{L}^2 - 2V)$ داده می‌شود. با \mathbf{L}^2 و \mathbf{L} جابه‌جا می‌شود. به عبارت دیگر T یک عملگر نرده‌ای خواهد بود.

اکنون استفاده از پایه‌های موج کروی کارآمد است چون با اعمال قضیه‌ی ایگنر-اکارت [(۳-۱۰-۳۸) را ببینید.] بر یک عملگر نرده‌ای، سریعاً خواهیم داشت:

$$\langle E', l', m' | T | E, l, m \rangle = T_l(E) \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (۱-۶-۷)$$

به عبارت دیگر T هم در \mathbf{L} و هم در m قطری است. به علاوه آرایه‌های قطری (غیرصفر) به E و l وابسته‌اند اما به m بستگی ندارند. همان‌طور که به زودی خواهید دید، این مسأله منجر به یک ساده‌سازی بزرگ خواهد شد.

بیاید تا به بررسی دامنه‌ی پراکندگی (۷-۲-۱۹) بپردازیم:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) &= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle \\ &= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \sum_l \sum_m \sum_{l'} \sum_{m'} \int dE \int dE' \langle \mathbf{k}' | E' l' m' \rangle \\ &\quad \times \langle E' l' m' | T | E l m \rangle \langle E l m | \mathbf{k} \rangle \\ &= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \frac{\hbar^2}{mk} \sum_l \sum_m T_l(E) \Big|_{E=\hbar^2 k^2/2m} Y_l^m(\hat{\mathbf{k}}') Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{k}}) \\ &= -\frac{4\pi^2}{k} \sum_l \sum_m T_l(E) \Big|_{E=\hbar^2 k^2/2m} Y_l^m(\hat{\mathbf{k}}') Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{k}}) \end{aligned} \quad (۲-۶-۷)$$

برای به دست آوردن وابستگی زاویه‌ای دامنه‌ی پراکندگی، بیایید تا سیستم مختصاتی را انتخاب کنیم که در آن k همان‌طور که معمول است، در جهت مثبت محور z قرار گیرد. آنگاه داریم $[(۳-۶-۵۰)$ را ببینید]:

$$Y_l^m(\hat{\mathbf{k}}) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \delta_{m0} \quad (۳-۶-۷)$$

که در آن از $P_l(1) = 1$ استفاده کرده‌ایم. بنابراین تنها جمله‌ی $m = 0$ سهم دارد، θ را زاویه‌ی بین \mathbf{k} و \mathbf{k}' می‌گیریم، می‌توانیم بنویسیم:

$$Y_l^0(\hat{\mathbf{k}}') = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta) \quad (۴-۶-۷)$$

مرسوم است که دامنه‌ی موج پاره‌ای $f_l(k)$ را به شکل زیر تعریف کنند:

$$f_l(k) \equiv -\frac{\pi T_l(E)}{k} \quad (۵-۶-۷)$$

سپس برای $(۲-۶-۷)$ داریم:

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l(k) P_l(\cos \theta) \quad (۶-۶-۷)$$

که در آن $f(\theta)$ هنوز وابسته به \mathbf{k} (یا انرژی فرودی) است، اگرچه \mathbf{k} ذکر نشده است.

برای نشان دادن مفهوم فیزیکی $f_l(k)$ ، بگذارید تا رفتار دور بُرد تابع موج $\langle \mathbf{x} | \psi^{(+)} \rangle$ را که با $(۷-۱-۱)$ داده می‌شود مطالعه کنیم. با استفاده از بسط موج تخت بر حسب امواج کروی $[(۷-۵-۱۸)]$ و توجه به این که (پیوست الف)

$$j_l(kr) \xrightarrow{r \text{ بزرگی}} \frac{e^{i(kr - (l\pi/2))} - e^{-i(kr - (l\pi/2))}}{2ikr}, \quad (i^l = e^{i(\pi/2)l}) \quad (۷-۶-۷)$$

است و اینکه $f(\theta)$ از $(۶-۶-۷)$ حاصل می‌شود، داریم:

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{x} | \psi^{(+)} \rangle &\xrightarrow{\text{بزرگ } r} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right] \\
 &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[\sum_l (2l+1) P_l(\cos\theta) \left(\frac{e^{ikr} - e^{-i(kr-l\pi)}}{2ikr} \right) \right. \\
 &\quad \left. + \sum_l (2l+1) f_l(k) P_l(\cos\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right] \\
 &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_l (2l+1) \frac{P_l}{2ik} \left[[1 + 2ikf_l(k)] \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-i(kr-l\pi)}}{r} \right]
 \end{aligned}$$

(۸-۷-۶)

اکنون فیزیک پراکندگی شفاف شد. وقتی که پراکندگی نداشته باشیم، می‌توانیم موج تخت را به‌عنوان یک موج کروی برون‌رو که رفتاری شبیه به e^{ikr}/r دارد و یک موج کروی درون‌رو که شبیه $e^{-i(kr-l\pi)}/r$ - (به‌ازای هر l) رفتار می‌کند، در نظر بگیریم. حضور پراکنده‌ساز تنها ضریب موج برون‌رو را تغییر می‌دهد به‌طوری که:

$$1 \rightarrow 1 + 2ikf_l(k) \quad (۹-۶-۷)$$

موج درون‌رو کاملاً بدون تأثیر می‌ماند.

یکانی بودن و جابه‌جایی‌های فاز

اکنون به بررسی نتایج پایستگی شار، یا یکانی بودن می‌پردازیم. در فرمول‌بندی مستقل از زمان، چگالی شار جریان \mathbf{j} باید در رابطه‌ی

$$\nabla \cdot \mathbf{j} = - \frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} = 0 \quad (۱۰-۶-۷)$$

صدق کند. حال بگذارید یک سطح کروی با شعاع بزرگ را در نظر بگیریم. با توجه به قضیه گاوس، باید داشته باشیم:

$$\int_{\text{سطح کروی}} \mathbf{j} \cdot d\mathbf{S} = 0 \quad (۱۱-۶-۷)$$

از نظر فیزیکی (۱۰-۶-۷) و (۱۱-۶-۷) به این معنی هستند که چاه و چشمه وجود ندارد. شار خروجی باید برابر با شار ورودی باشد. به‌علاوه به‌خاطر پایستگی تکانه‌ی زاویه‌ای، این مسأله باید برای هر موج پاره‌ای

به طور جداگانه صادق باشد. به عبارت دیگر، ضریب e^{ikr}/r باید هم اندازه‌ی ضریب e^{-ikr}/r باشد. $S_l(k)$ به شکل

$$S_l(k) \equiv 1 + 2ikf_l(k) \quad (12-6-7)$$

است. به این معنی که [از (۷-۶-۹)]

$$|S_l(k)| = 1 \quad (13-6-7)$$

است. یعنی آنچه بیشتر از همه رخ می‌دهد، تغییر فاز موج خروجی است. معادله‌ی (۷-۶-۱۳) به رابطه‌ی یکانی بودن برای l امین موج پاره‌ای معروف است. در طرز عمل پیشرفته‌تر پراکندگی، $S_l(k)$ به عنوان l امین آرایه‌ی قطری عملگر S محسوب می‌شود که باید به عنوان نتیجه‌ای از پایداری احتمال، یکانی باشد.

بنابراین می‌بینیم که تنها تغییر در تابع موج، در فاصله‌های بزرگ، به عنوان نتیجه‌ای از پراکندگی، تنها تغییر فاز موج خروجی است. این فاز را با $2\delta_l$ نشان می‌دهیم (ضریب ۲ در اینجا، قراردادی است). می‌توانیم بنویسیم:

$$S_l = e^{2i\delta_l} \quad (14-6-7)$$

که δ_l حقیقی است. در این جا می‌دانیم که δ_l تابعی از k است، حتی اگر صریحاً δ_l را به شکل $\delta_l(k)$ ننویسیم. به f_l بازمی‌گردیم. می‌توانیم بنویسیم [از (۷-۶-۱۲)]:

$$f_l = \frac{(S_l - 1)}{2ik} \quad (15-6-7)$$

یا به طور صریح بر حسب δ_l

$$f_l = \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} = \frac{e^{i\delta_l} \sin \delta_l}{k} = \frac{1}{k \cot \delta_l - ik} \quad (16-6-7)$$

هر کدام که مناسب‌تر است را می‌توانید به کار برید. برای دامنه‌ی پراکندگی کل داریم:

$$\begin{aligned} f(\theta) &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left(\frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} \right) P_l(\cos \theta) \\ &= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta) \end{aligned} \quad (17-6-7)$$

که δ_l حقیقی است. این عبارت برای $f(\theta)$ حاصل از دو اصل ناوردایی چرخشی و پایداری احتمال است. در بسیاری از کتاب‌های مکانیک موجی، (۷-۶-۱۷) به طور صریح با حل معادله شرودینگر و با در نظر گرفتن یک پتانسیل متقارن کروی حقیقی به دست می‌آید. روش به دست آوردن (۷-۶-۱۷) که در

این جا صورت گرفت از آن جهت جالب تر است که می تواند به وضعیت هایی عمومیت پیدا کند که در آن پتانسیل در جایی که مکانیک کوانتومی غیرنسبیتی با شکست مواجه می شود، توصیف شده باشد.

سطح مقطع دیفرانسیلی $d\sigma/d\Omega$ را می توان با مربع کردن اندازه ی (۷-۶-۱۷) به دست آورد [۷-۱-۳۶] را ببینید]. برای به دست آوردن سطح مقطع کل داریم:

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{tot}} &= \int |f(\theta)|^2 d\Omega \\ &= \frac{1}{k^2} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{+1} d(\cos\theta) \sum_l \sum_{l'} (2l+1)(2l'+1) \\ &\quad \times e^{i\delta_l} \sin\delta_l e^{-i\delta_{l'}} \sin\delta_{l'} P_l P_{l'} \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2\delta_l\end{aligned}\quad (18-6-7)$$

می توانیم قضیه ی اپتیکی (۷-۳-۱) را که پیش تر با استفاده از یک استدلال کلی تر به دست آمده بود، بیازماییم. همه ی آن چه که باید انجام دهیم توجه به این نکته است که از (۷-۶-۱۷) داریم:

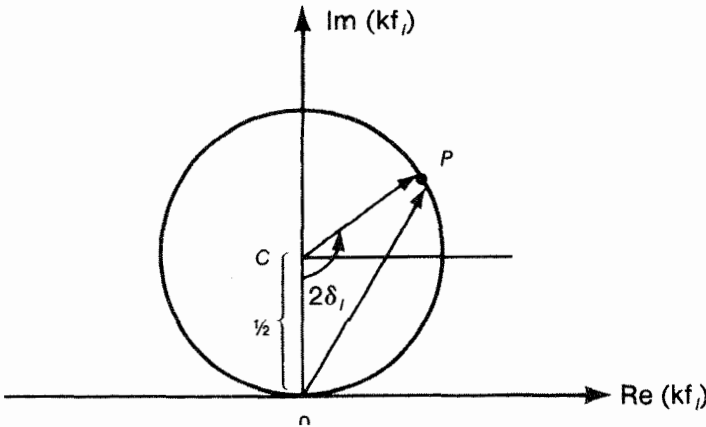
$$\begin{aligned}\text{Im } f(\theta=0) &= \sum_l \frac{(2l+1) \text{Im} [e^{i\delta_l} \sin\delta_l]}{k} P_l(\cos\theta) \Big|_{\theta=0} \\ &= \sum_l \frac{(2l+1)}{k} \sin^2\delta_l,\end{aligned}\quad (19-6-7)$$

که صرف نظر از یک $4\pi/k$ شبیه به (۷-۶-۱۸) است.

δ_l به شکل تابعی از انرژی تغییر می کند. بنابراین $f_l(k)$ نیز تغییر می کند. $f_l(k)$ می تواند طوری تغییر کند که رابطه ی یکانی بودن (۷-۶-۱۳) برقرار باشد. با کشیدن نمودار آرگاند برای kf_l این امر بهتر دیده می شود. kf_l را همان طور که در شکل ۷-۶ نشان داده شده است، در صفحه ی مختلط رسم کردیم. اگر از (۷-۶-۱۶) توجه داشته باشیم که:

$$kf_l = \frac{i}{2} + \frac{1}{2} e^{-(i\pi/2) + 2i\delta_l} \quad (20-6-7)$$

این شکل کاملاً روشنگر و واضح خواهد بود. توجه کنید که در این جا دایره ای با شعاع $\frac{1}{2}$ وجود دارد که به دایره ی یکانی معروف است و kf_l باید روی آن باشد.



شکل ۶-۷: نمودار آرگانند برای kf_l . بزرگی kf_l است. در حالی که CO و CP هر کدام برابر با شعاع دایره و به طول $\frac{1}{2}$ هستند. زاویه OCP برابر با دو برابر δ_l است.

می توانیم صورت های مهمی را در شکل ۶-۷ ببینیم. فرض کنید که δ_l کوچک است. پس f_l باید در نزدیکی پایین دایره بماند. این می تواند مثبت یا منفی باشد. اما f_l تقریباً حقیقی خالص است:

$$f_l = \frac{e^{i\delta_l} \sin \delta_l}{k} = \frac{(1 + i\delta_l) \delta_l}{k} = \frac{\delta_l}{k} \quad (21-6-7)$$

از طرف دیگر، اگر δ_l در نزدیکی $\pi/2$ باشد، kf_l تقریباً موهومی خالص است و دامنه ی kf_l بیشینه است. تحت چنین شرایطی l آمین موج پاره ای می تواند در تشدید باشد، این مسأله در بخش ۷-۸ با جزییات بررسی می شود. توجه کنید که سطح مقطع پاره ای بیشینه وقتی که $\sin^2 \delta_l = 1$ باشد به دست می آید [۶-۷-۱۸] را ببینید:

$$\sigma_{\max}^{(l)} = 4\pi\lambda^2 (2l + 1) \quad (22-6-7)$$

ارتباط با تقریب آیکونال

تقریب آیکونال که در بخش ۴-۷ مورد بررسی قرار گرفت در انرژی های بالا اعتبار دارد (مرتبه ی $\lambda \ll R$) بنابراین پاره موج های زیادی سهم هستند. می توانیم l را به عنوان یک متغیر پیوسته در نظر بگیریم. به طور جداگانه بحث نیمه کلاسیکی را مورد توجه قرار می دهیم که در آن $l = bk$ است (چون تکانه ی زاویه ای $l\hbar = bp$) است، که در آن b پارامتر برخورد است و تکانه با $p = \hbar k$ مشخص می شود. داریم:

$$l_{\max} = kR \quad (23-6-7)$$

پس جایگزینی زیر را در عبارت (۷-۶-۱۷) انجام می دهیم:

$$\sum_l^{l_{\max} = kR} \rightarrow k \int db, \quad P_l(\cos \theta) \stackrel{\substack{l \text{ بزرگ} \\ \theta \text{ کوچک}}}{\approx} J_0(l\theta) = J_0(kb\theta)$$

$$\delta_l \rightarrow \Delta(b)|_{b=l/k} \quad (۲۴-۶-۷)$$

که در آن $l_{\max} = kR$ منجر می شود به:

$l_{\max} = kR$ implies that

$$e^{2i\delta_l} - 1 = e^{2i\Delta(b)} - 1 = 0 \quad \text{for } l > l_{\max} \quad (۲۵-۶-۷)$$

داریم:

$$f(\theta) \rightarrow k \int db \frac{2kb}{2ik} (e^{2i\Delta(b)} - 1) J_0(kb\theta)$$

$$= -ik \int db b J_0(kb\theta) [e^{2i\Delta(b)} - 1] \quad (۲۶-۶-۷)$$

محاسبه δ_l را می توان با استفاده از شکل صریح $\Delta(b)$ که با (۷-۴-۱۴) داده می شود، انجام داد. (مسأله ۷ این فصل را ببینید).

تعیین جابه جایی فاز

حال بگذارید تا ببینیم در عمل، چطور می توانیم جابه جایی های فاز را برای پتانسیل معلوم V مورد بررسی قرار دهیم. فرض می کنیم که به ازای $r > R$ ، پتانسیل V صفر می شود. R گستره ی پتانسیل است. در بیرون (یعنی $r > R$) تابع موج باید به صورت موج کروی آزاد باشد. ولی این بار دلیلی برای مستثنی کردن $n_l(r)$ نداریم. چون مبدأ در ملاحظات ما جایی ندارد. بنابراین تابع موج یک ترکیب خطی از $j_l(kr)P_l(\cos \theta)$ و $n_l(kr)P_l(\cos \theta)$ یا به طور معادل، $h_l^{(1)}P_l$ و $h_l^{(2)}P_l$ است که در آن $h_l^{(1)}$ و $h_l^{(2)}$ توابع هنکل کروی هستند که با

$$h_l^{(1)} = j_l + in_l, \quad h_l^{(2)} = j_l - in_l \quad (۲۷-۶-۷)$$

تعریف می شوند. این توابع رفتار مجانبی دارند. (پیوست الف را ببینید)

$$(۲۸-۶-۷)$$

$$h_l^{(1)} \xrightarrow{\text{بزرگ } r} \frac{e^{i(kr - (l\pi/2))}}{ikr}, \quad h_l^{(2)} \xrightarrow{\text{بزرگ } r} -\frac{e^{-i(kr - (l\pi/2))}}{ikr}$$

تابع موج کل در هر r دلخواه را به شکل زیر می‌نویسیم:

$$\langle \mathbf{x} | \psi^{(+)} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_l i^l (2l+1) A_l(r) P_l(\cos \theta) \quad (r > R) \quad (29-6-7)$$

برای $r > R$ داریم (برای تابع موج شعاعی):

$$A_l = c_l^{(1)} h_l^{(1)}(kr) + c_l^{(2)} h_l^{(2)}(kr) \quad (30-6-7)$$

که در آن ضریبی که در A_l در (۲۹-۶-۷) ضرب شده است برای $V = 0$ طوری انتخاب می‌شود که $j_l(kr)$ بر $A_l(r)$ منطبق شود. با استفاده از (۲۸-۶-۷) می‌توان رفتار تابع موج را، برای r بزرگ، که با (۲۹-۶-۷) و (۳۰-۶-۷) داده می‌شود با:

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_l (2l+1) P_l \left[\frac{e^{2i\delta_l} e^{ikr}}{2ikr} - \frac{e^{-i(kr-l\pi)}}{2ikr} \right] \quad (31-6-7)$$

مقایسه کرد. واضح است که باید داشته باشیم:

$$c_l^{(1)} = \frac{1}{2} e^{2i\delta_l}, \quad c_l^{(2)} = \frac{1}{2} \quad (32-6-7)$$

بنابراین تابع موج شعاعی برای $r > R$ به شکل

$$A_l(r) = e^{i\delta_l} [\cos \delta_l j_l(kr) - \sin \delta_l n_l(kr)] \quad (33-6-7)$$

نوشته می‌شود. با استفاده از این رابطه، می‌توانیم مشتق لگاریتمی را در $r = R$ (یعنی درست بیرون از محدوده‌ی پتانسیل) به شکل زیر محاسبه کنیم:

$$\begin{aligned} \beta_l &\equiv \left(\frac{r}{A_l} \frac{dA_l}{dr} \right)_{r=R} \\ &= kR \left[\frac{j_l'(kR) \cos \delta_l - n_l'(kR) \sin \delta_l}{j_l(kR) \cos \delta_l - n_l(kR) \sin \delta_l} \right] \end{aligned} \quad (34-6-7)$$

که در آن $j_l'(kR)$ بیان‌کننده‌ی مشتق j_l برحسب kr است که در $kr = kR$ محاسبه شده است. با دانستن مشتق لگاریتمی در R می‌توانیم جابه‌جایی فاز را به شکل زیر محاسبه کنیم:

$$\tan \delta_l = \frac{kR j_l'(kR) - \beta_l j_l(kR)}{kR n_l'(kR) - \beta_l n_l(kR)} \quad (35-6-7)$$

مسأله‌ی مشخص کردن جابه‌جایی فاز اکنون به بدست آوردن β_l ساده شده است.

اکنون جواب معادله‌ی شرودینگر را برای $r < R$ بررسی می‌کنیم (یعنی درون محدوده‌ی پتانسیل). با نگاه کردن به تساوی معادله‌ی یک بعدی

$$\frac{d^2 u_l}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u_l = 0 \quad (۳۶-۶-۷)$$

می‌توانیم معادله‌ی شرودینگر در سه بُعد را حل کنیم. که در رابطه‌ی بالا

$$u_l = r A_l(r) \quad (۳۷-۶-۷)$$

است. و شرط مرزی

$$u_l|_{r=0} = 0 \quad (۳۸-۶-۷)$$

برقرار است. از این معادله‌ی شرودینگر یک بعدی از $r = 0$ تا $r = R$ انتگرال‌گیری می‌کنیم (اگر لازم باشد به روش عددی). به این ترتیب مشتق لگاریتمی در R به دست می‌آید. بنا به پیوستگی باید قادر باشیم که مشتق لگاریتمی را در درون و بیرون در $r = R$ جور کنیم.

$$\beta_l|_{\text{داخل}} = \beta_l|_{\text{بیرون}} \quad (۳۹-۶-۷)$$

که در آن، طرف چپ با انتگرال‌گیری از معادله‌ی شرودینگر تا $r = R$ به دست می‌آید، در حالی که سمت راست برحسب جابه‌جایی‌های فاز قابل بیان است که رفتار بلند برد تابع موج را مشخص می‌کند. یعنی جابه‌جایی‌های فاز به سادگی با جایگزینی β_l در $\tan \delta_l$ [(۳۵-۶-۷)] برای جواب داخل به دست می‌آید. به عنوان یک رهیافت متفاوت، ممکن است که با استفاده از جابه‌جایی‌های فاز به دست آمده، یک معادله‌ی انتگرالی برای $A_l(r)$ استخراج کرد (مسأله‌ی ۸ این فصل را ببینید).

پراکندگی کره‌ی سخت

بگذارید تا روی یک مثال خاص کار کنیم. پراکندگی از یک کره‌ی سخت یا صلب را در نظر می‌گیریم:

$$V = \begin{cases} \infty & \text{برای } r < R \\ 0 & \text{برای } r > R \end{cases} \quad (۴۰-۶-۷)$$

در این مسأله لازم نیست که β_l (که در واقع ∞ است) را محاسبه کنیم. آنچه باید بدانیم این است که تابع موج در $r = R$ صفر می‌شود، چون کره نفوذناپذیر است. بنابراین:

$$A_l(r)|_{r=R} = 0 \quad (۴۱-۶-۷)$$

یا از (۳۳-۶-۷) داریم:

$$j_l(kR) \cos \delta_l - n_l(kR) \sin \delta_l = 0 \quad (۴۲-۶-۷)$$

یا:

$$\tan \delta_l = \frac{j_l(kR)}{n_l(kR)} \quad (۴۳-۶-۷)$$

بنابراین اکنون جابه‌جایی‌های فاز برای هر l دلخواه شناخته شده است. توجه کنید که تا این جا تقریبی نزده‌ایم.

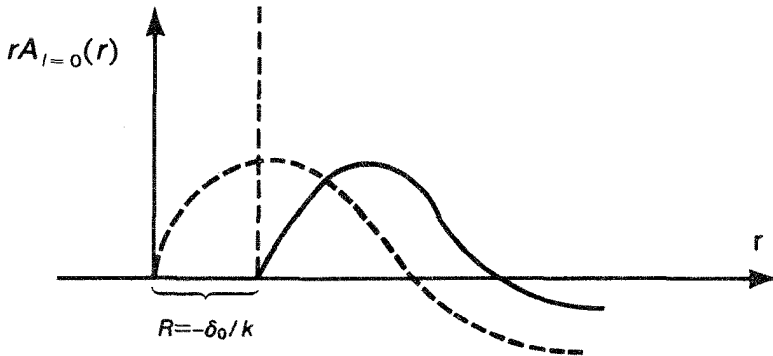
برای فهمیدن معنای فیزیکی جابه‌جایی‌های فاز، بیایید تا مورد $l = 0$ را در نظر بگیریم (پراکندگی موج s). برای $l = 0$ معادله‌ی (۴۳-۶-۷) می‌شود:

$$\tan \delta_0 = \frac{\sin kR/kR}{-\cos kR/kR} = -\tan kR \quad (۴۴-۶-۷)$$

یا $\delta_0 = -kR$. تابع موج شعاعی (۳۳-۶-۷) با $e^{i\delta_0}$ ، تغییرات را به شکل زیر حذف می‌کند:

$$A_{l=0}(r) \propto \frac{\sin kr}{kr} \cos \delta_0 + \frac{\cos kr}{kr} \sin \delta_0 = \frac{1}{kr} \sin(kr + \delta_0) \quad (۴۵-۶-۷)$$

بنابراین، اگر $A_{l=0}(r)$ را به عنوان تابعی از فاصله‌ی r رسم کنیم، یک موج سینوسی به دست می‌آوریم که وقتی با موج سینوسی آزاد مقایسه می‌شود، به اندازه‌ی R جابه‌جا شده است. شکل ۷-۷ را ببینید.



شکل ۷-۷: نمودار $rA_{l=0}(r)$ بر حسب r (ضریب $e^{i\delta_0}$ حذف شده است. منحنی‌ای که با خط چین مشخص شده است، مربوط به حالت $V=0$ است و مانند sinkr رفتار می‌کند در حالی که منحنی خط سیاه برای موج S پراکندگی از کره تخت است و به اندازه‌ی R نسبت به مورد $V=0$ جابه‌جا شده است.

اکنون بگذارید تا به مطالعه‌ی حدود انرژی بالا و انرژی پایین $\tan \delta_l$ بپردازیم. انرژی پایین به این معنی است که kR کوچک است، $kR \ll 1$. می‌توانیم از رابطه‌ی زیر استفاده کنیم (پیوست الف را ببینید):

$$j_l(kr) \approx \frac{(kr)^l}{(2l+1)!!} \quad (46-6-7)$$

$$n_l(kr) \approx -\frac{(2l-1)!!}{(kr)^{l+1}}$$

به دست می‌آید:

$$\tan \delta_l = \frac{-(kR)^{2l+1}}{\{(2l+1)[(2l-1)!!]^2\}} \quad (47-6-7)$$

بنابراین می‌توانیم برای δ_l ، $l \neq 0$ را نادیده بگیریم. به عبارت دیگر تنها پراکندگی موج S را داریم که در عمل، برای بیشتر محدوده‌های پتانسیل در انرژی پایین، قابل انتظار است. از آن جا که $\delta_0 = -kR$ است، بدون توجه به این که k بزرگ است یا کوچک، به دست می‌آوریم:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\sin^2 \delta_0}{k^2} \approx R^2 \quad \text{برای } kR \ll 1 \quad (48-6-7)$$

جالب است که سطح مقطع کل با رابطه‌ی زیر داده می‌شود:

$$\sigma_{\text{tot}} = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = 4\pi R^2 \quad (49-6-7)$$

که این چهار برابر سطح مقطع هندسی πR^2 است. با توجه به سطح مقطع هندسی می فهمیم که مساحت قرصی به شعاع R ، انتشار موج تخت را سد کرده است (و سطح مقطع یکسانی با کره‌ی سخت دارد). البته پراکندگی انرژی پایین به معنی پراکندگی با طول موج بسیار بلند است و نباید از آن یک نتیجه‌ی منطقی کلاسیکی را انتظار داشت.

ممکن است گمان برده شود که برای انرژی بالا، انتظار داشتن سطح مقطع کلاسیکی منطقی است. چون در انرژی‌های بالا وضعیت را می توان شبیه به وضعیت نیمه کلاسیکی دانست. یک فرض منطقی این است که در انرژی‌های بالا مقادیر بسیار زیادی از l تا $l_{\max} \approx kR$ توزیع شده‌اند. بنابراین سطح مقطع کل با رابطه‌ی

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l=kR} (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (۵۰-۶-۷)$$

داده می‌شود. اما با استفاده از (۴۳-۶-۷) داریم:

$$\sin^2 \delta_l = \frac{\tan^2 \delta_l}{1 + \tan^2 \delta_l} = \frac{[j_l(kR)]^2}{[j_l(kR)]^2 + [n_l(kR)]^2} \approx \sin^2 \left(kR - \frac{\pi l}{2} \right) \quad (۵۱-۶-۷)$$

که در آن از

$$\begin{aligned} j_l(kr) &\sim \frac{1}{kr} \sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} \right) \\ n_l(kr) &\sim -\frac{1}{kr} \cos \left(kr - \frac{l\pi}{2} \right) \end{aligned} \quad (۵۲-۶-۷)$$

استفاده کرده‌ایم. می‌بینیم که اگر δ_l به اندازه‌ی 90° کاهش یابد، l باید یک واحد افزایش یابد. بنابراین برای یک جفت موج پاره‌ای جفت شده داریم:

$$\sin^2 \delta_l + \sin^2 \delta_{l+1} = \sin^2 \delta_l + \sin^2 (\delta_l - \pi/2) = \sin^2 \delta_l + \cos^2 \delta_l = 1$$

و برای مقادیر بسیار زیاد در (۵۰-۶-۷) منطقی است که به جای $\sin^2 \delta_l$ ، مقدار متوسط آن، $\frac{1}{2}$ ، را قرار دهیم. تعداد جملات در جمع روی l ، به‌طور غیردقیق برابر با kR است. همانند میانگین $2l+1$. با قرار دادن همه‌ی عوامل کنار یکدیگر، (۵۰-۶-۷) می‌شود:

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k^2} (kR)^2 \frac{1}{2} = 2\pi R^2 \quad (۵۳-۶-۷)$$

که باز سطح مقطع هندسی πR^2 نیست. برای دیدن مبدأ عامل ۲، می‌توانیم (۷-۶-۱۷) را به دو قسمت تقسیم کنیم:

$$\begin{aligned} f(\theta) &= \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{kR} (2l+1) e^{2i\delta_l} P_l(\cos\theta) + \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{kR} (2l+1) P_l(\cos\theta) \\ &= f_{\text{پارتاب}} + f_{\text{سایه}} \end{aligned} \quad (۵۴-۶-۷)$$

در محاسبه $\int |f_{\text{پارتاب}}|^2 d\Omega$ ، متعامد بودن $P_l(\cos\theta)$ ها ما را متقاعد می‌سازد که تداخلی بین سهم ناشی از l های مختلف وجود ندارد و می‌توانیم جمع مربع قسمت‌های موج پاره‌ای را به دست آوریم:

$$\begin{aligned} \int |f_{\text{پارتاب}}|^2 d\Omega &= \frac{2\pi}{4k^2} \sum_{l=0}^{l_{\text{max}}} \int_{-1}^{+1} (2l+1)^2 [P_l(\cos\theta)]^2 d(\cos\theta) \\ &= \frac{\pi l_{\text{max}}^2}{k^2} = \pi R^2 \end{aligned} \quad (۵۵-۶-۷)$$

توجه خود را به سایه $f_{\text{سایه}}$ معطوف می‌کنیم. دقت می‌کنیم که این جمله موهومی خالص است. این جمله به‌ویژه در استای جلوسو قوی‌تر است. چون برای $\theta = 0$ داریم: $P_l(\cos\theta) = 1$ و سهم‌های ناشی از مقادیر مختلف l همگی همدوس هستند (یعنی، با یک فاز یکسان، در این مورد موهومی خالص و مثبت) و با هم جمع می‌شوند. می‌توانیم از تقریب زاویه کوچک برای P_l استفاده کنیم [۷-۶-۲۴] را ببینید] و به دست آوریم:

$$\begin{aligned} f_{\text{سایه}} &\approx \frac{i}{2k} \sum (2l+1) J_0(l\theta) \\ &\approx ik \int_0^R b db J_0(kb\theta) \\ &= \frac{iR J_1(kR\theta)}{\theta} \end{aligned} \quad (۵۶-۶-۷)$$

اما این درست همان فرمول پراش فرانهورفر در اپتیک است که قله‌ی بلندی در نزدیکی $\theta \approx 0$ دارد. با قرار دادن $\xi = kR\theta$ و $d\xi/\xi = d\theta/\theta$ می‌توانیم محاسبه کنیم:

$$\begin{aligned} \int |f_{\text{سایه}}|^2 d\Omega &= 2\pi \int_{-1}^{+1} \frac{R^2 [J_1(kR\theta)]^2}{\theta^2} d(\cos\theta) \\ &\approx 2\pi R^2 \int_0^\infty \frac{[J_1(\xi)]^2}{\xi} d\xi \\ &\approx \pi R^2 \end{aligned} \quad (۵۷-۶-۷)$$

در پایان، تداخل بین سایه $f_{\text{سایه}}$ و پارتاب $f_{\text{پارتاب}}$ صفر می‌شود:

$$\text{Re}(f_{\text{پارتاب}}^* f_{\text{سایه}}) \approx 0 \quad (۵۸-۶-۷)$$

از آن جا که فاز $f_{\text{تاب}}$ نوسان می کند $(2\delta_{l+1} = 2\delta_l - \pi)$ میانگین تقریبی آن صفر می شود، در حالی که سایه f موهومی خالص است. بنابراین:

$$\sigma_{\text{tot}} = \underbrace{\pi R^2}_{\sigma_{\text{تاب}}} + \underbrace{\pi R^2}_{\sigma_{\text{سایه}}} \quad (۵۹-۶-۷)$$

جمله‌ی دوم (سهم همدوس در مسیر جلوسو) از آن جهت سایه گفته می شود که در پراکندگی از کره‌ی سخت در انرژی‌های بالا، موج‌هایی که پارامتر برخورد آن‌ها کمتر از R است باید انحراف یابند. بنابراین درست پشت پراکنده‌ساز، احتمال یافت ذره صفر می شود و باید سایه ایجاد شود. به بیان مکانیک موجی، این سایه ناشی از تداخل ویرانگر بین موج اولیه (که در غیاب تداخل ساز وجود داشت) و موج تداخل یافته‌ی جدید است. بنابراین برای ایجاد سایه به پراکندگی نیاز داریم. که این دامنه‌ی سایه‌ای باید موهومی خالص باشد. این مسأله را می توان با یادآوری (۷-۶-۸) دید. این رابطه بیان می کند که ضریب $e^{ikr}/2ikr$ برای l امین موج پاره‌ای نظیر $1 + 2ikf_l(k)$ رفتار می کند که ۱ در آن، در غیاب پراکنده‌ساز هم وجود دارد. بنابراین باید یک جمله‌ی موهومی مثبت در f_l وجود داشته باشد تا خنثی سازی را انجام دهد. در واقع این مسأله یک تفسیر فیزیکی از قضیه اپتیکی ارائه می دهد که می توان آن را صریحاً آزمود. ابتدا توجه می کنیم که:

$$\frac{4\pi}{k} \text{Im} f(0) = \frac{4\pi}{k} \text{Im} [f_{\text{سایه}}(0)] \quad (۶۰-۶-۷)$$

چون، به خاطر نوسان فاز، میانگین $\text{Im}[f_{\text{تاب}}(0)]$ صفر می شود. با استفاده از (۷-۶-۵۴) به دست می آوریم:

$$\frac{4\pi}{k} \text{Im} f_{\text{سایه}}(0) = \frac{4\pi}{k} \text{Im} \left[\frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{kR} (2l+1) P_l(1) \right] = 2\pi R^2 \quad (۶۱-۶-۷)$$

که در واقع معادل با σ_{tot} است.

۷.۷ پراکندگی با انرژی پایین و حالت‌های مقید

به طور کلی، در انرژی‌های پایین (یا به طور دقیق تر، وقتی که $\lambda = 1/k$ با R قابل مقایسه یا از آن بزرگ تر باشد) موج‌های پاره‌ای برای l های بالاتر، فاقد اهمیت هستند. ممکن است این مسأله کلاسیکی به نظر برسد چون ذره نمی تواند به داخل سد نفوذ کند. در نتیجه در درون پتانسیل اثری مشاهده نمی شود. به زبان مکانیک کوانتومی، پتانسیل مؤثر برای l امین موج پاره‌ای با رابطه‌ی

$$V_{\text{eff}} = V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \quad (۱-۷-۷)$$

داده می‌شود. مگر این که پتانسیل آندر قوی باشد که برای $l \neq 0$ در نزدیکی $E \approx 0$ حالت مقید به وجود آید. رفتار تابع موج شعاعی تا حد زیادی با جمله‌ی گریز از مرکز ناشی از سد، مشخص می‌شود. یعنی این تابع باید شبیه به $j_l(kr)$ باشد. به طور کمی تر می‌توان رفتار جابه‌جایی فاز را با استفاده از معادله‌ی انتگرالی برای موج پاره‌ای تخمین زد (مسأله‌ی ۸ این فصل را ببینید):

$$\frac{e^{i\delta_l} \sin \delta_l}{k} = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty j_l(kr) V(r) A_l(r) r^2 dr \quad (۷-۷-۲)$$

اگر $A_l(r)$ تفاوت زیادی با $j_l(kr)$ نداشته باشد و $1/k$ بسیار بزرگ تر از محدودی پتانسیل باشد، سمت راست همانند k^{2l} تغییر می‌یابد. برای δ_l های کوچک، سمت چپ باید به شکل δ_l/k تغییر یابد. بنابراین جابه‌جایی فاز k به ازای

$$\delta_l \sim k^{2l+1} \quad (۷-۷-۳)$$

و برای k های کوچک، صفر می‌شود. این مسأله، به رفتار آستانه مشهور است. بنابراین پیداست که در انرژی‌های پایین با گستره‌ی پتانسیل محدود، پراکندگی موج S مهم است.

چاه یا سد مربعی

به طور خاص، بیابید تا پراکندگی موج S با

$$V = \begin{cases} V_0 = \text{ثابت} & r < R \text{ برای} \\ 0 & \text{بقیه‌ی جاها} \end{cases} \quad \begin{cases} V_0 > 0 & \text{دافع} \\ V_0 < 0 & \text{جاذب} \end{cases} \quad (۷-۷-۴)$$

را در نظر بگیریم. بسیاری از خصوصیات که در این جا به دست می‌آوریم با پتانسیل‌های محدود پیچیده‌تر مشترک است.

پیش تر دیدیم که تابع موج بیرون $[(۷-۶-۳۳)]$ و $[(۷-۶-۴۵)]$ را ببینید] باید نظیر

$$e^{i\delta_0} [j_0(kr) \cos \delta_0 - n_0(kr) \sin \delta_0] \approx \frac{e^{i\delta_0} \sin(kr + \delta_0)}{kr} \quad (۷-۷-۵)$$

رفتار کنند. جواب داخل نیز به آسانی برای V_0 ثابت به دست می‌آید:

$$u \equiv r A_{l=0}(r) \propto \sin k'r \quad (۷-۷-۶)$$

که در آن k' از رابطه‌ی زیر مشخص می‌شود:

$$E - V_0 = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} \quad (۷-۷-۷)$$

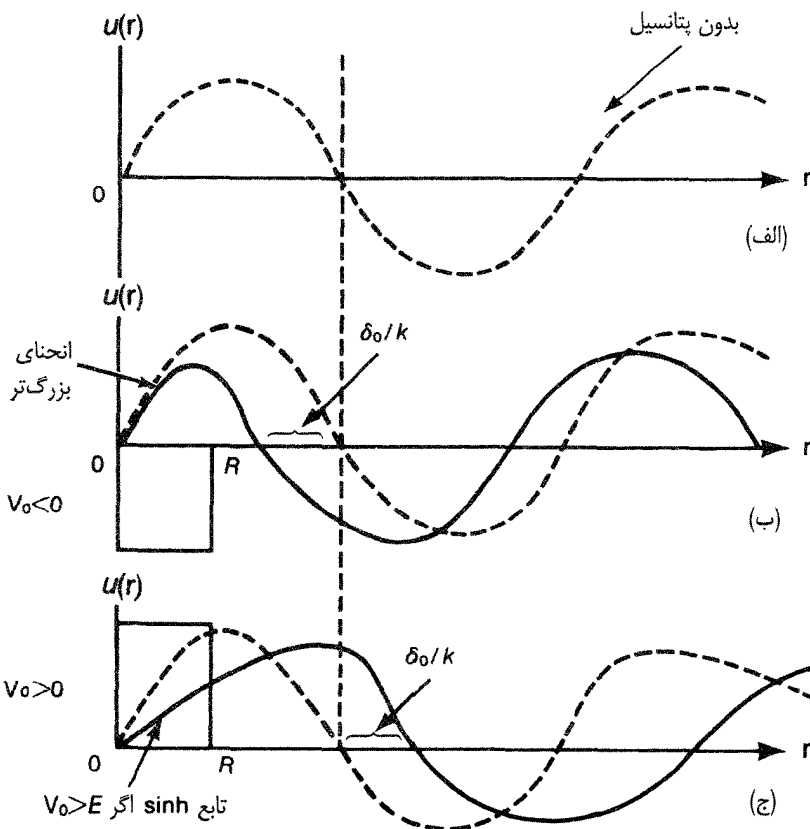
در این رابطه از شرط مرزی $u = 0$ در $r = 0$ استفاده کرده ایم به عبارت دیگر تا وقتی که $E > V_0$ باشد تابع موج داخل نیز سینوسی است. منحنی موج سینوسی با مورد ذره ی آزاد فرق دارد. در نتیجه همان طور که در شکل ۷-۸ نشان داده شده است تابع موج بسته به این که $V_0 < 0$ (جاذب) یا $V_0 > 0$ (دافع) باشد، می تواند کشیده ($\delta_0 > 0$) یا هُل داده ($\delta_0 < 0$) شود. توجه کنید که $(\phi - \gamma - \gamma)$ و $(\gamma - \gamma - \gamma)$ حتی اگر $V_0 > E$ باشد همچنان برقرار هستند به شرطی که \sin به \sinh تبدیل بشود، یعنی تابع موج نظیر

$$u(r) \propto \sinh[\kappa r] \tag{۶-۷-۷}$$

رفتار کند. که در آن

$$\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = (V_0 - E) \tag{۷-۷-۷}$$

است.



شکل ۸-۷: نمودار $u(r)$ بر حسب r . (الف) برای $V=0$ (خط چین). (ب) برای $V_0 < 0$ و $\delta_0 > 0$ ، که در آن تابع موج (خط سیاه) کشیده شده است. (ج) برای $V_0 > 0$ و $\delta_0 < 0$ ، که در آن تابع موج (خط سیاه) هل داده شده است.

اکنون روی مورد جاذب تمرکز می‌کنیم و فرض می‌کنیم که بزرگی V_0 در حال افزایش است. جذب رو به افزایش باعث می‌شود که تابع موج منحنی طولی‌تری داشته باشد. فرض کنید که جاذبه‌طوری باشد که بازه‌ی $[0, R]$ درست مطابق با یک چهارم دوره‌ی موج سینوسی باشد. وقتی در محدوده‌ی انرژی پایین $kR \ll 1$ کار می‌کنیم. جابه‌جایی فاز برابر با $\delta_0 = \pi/2$ است و این منجر به یک سطح مقطع موج S بیشینه برای یک k معلوم می‌گردد، چون $\sin^2 \delta_0$ برابر واحد است. اکنون عمق چاه V_0 را افزایش می‌دهیم. در نتیجه جاذبه آنقدر قوی می‌شود که یک دوم دوره موج سینوسی می‌تواند درون گستره‌ی پتانسیل جای گیرد. جابه‌جایی فاز δ_0 اکنون π است. به عبارت دیگر، تابع موج خارج از R نسبت به تابع موج ذره‌ی آزاد، 180° اختلاف فاز دارد. آن چه حائز اهمیت است، این است که سطح مقطع پاره‌ای صفر شده است ($\sin^2 \delta_0 = 0$):

$$\sigma_{l=0} = 0 \quad (۸-۷-۷)$$

با این که جاذبه‌ی پتانسیل بسیار قوی است. به علاوه، اگر انرژی آن‌قدر کم باشد که برای $l \neq 0$ موج‌ها هنوز فاقد اهمیت باشند، آنگاه یک انتقال تقریباً کامل برای موج فرودی داریم. این وضعیت به اثر رامسائر-تانزند مشهور است و در آزمایشگاه برای پراکندگی گازهای نادر، همچون آرگون، کریپتون و زنون دیده شده است. این اثر نخستین بار در ۱۹۲۳، قبل از تولد مکانیک موجی دیده شد و موجبات سردرگمی زیادی را فراهم آورد. توجه کنید که پارامترهای نوعی در این جا $R \sim 2 \times 10^{-8}$ و انرژی جنبشی الکترون از مرتبه‌ی 0.1 eV هستند که به $kR \sim 0.324$ منجر می‌شوند.

پراکندگی انرژی صفر و حالت‌های مقید

بگذارید تا پراکندگی را در حد انرژی‌های خیلی پایین ($k \approx 0$) بررسی کنیم. برای $r > R$ و $l = 0$ ، تابع موج شعاعی خارجی در رابطه‌ی

$$\frac{d^2 u}{dr^2} = 0 \quad (۹-۷-۷)$$

صدق می‌کند. پیدا است که جواب (۹-۷-۷) برابر است با:

$$u(r) = \text{ثابت}(r - a) \quad (۱۰-۷-۷)$$

درست یک خط راست! می‌توان این را به منزله‌ی یک طول موج بی‌نهایت بزرگ در نظر گرفت که به طور معمول برای تابع موج بیرون بیان می‌شود [(۳۷-۶-۷) و (۴۵-۶-۷) را ببینید]

$$\lim_{k \rightarrow 0} \sin(kr + \delta_0) = \lim_{k \rightarrow 0} \sin \left[k \left(r + \frac{\delta_0}{k} \right) \right] \quad (11-7-7)$$

که شبیه به (۱۰-۷-۷) است. داریم:

$$\frac{u'}{u} = k \cot \left[k \left(r + \frac{\delta_0}{k} \right) \right] \xrightarrow{k \rightarrow 0} \frac{1}{r-a} \quad (12-7-7)$$

با قرار دادن $r=0$ [هرچند در $r=0$ ، (۱۰-۷-۷) تابع موج صحیحی نیست] داریم:

$$\lim_{k \rightarrow 0} k \cot \delta_0 \xrightarrow{k \rightarrow 0} -\frac{1}{a} \quad (13-7-7)$$

کمیت a به عنوان طول پراکندگی شناخته می شود. حد سطح مقطع کل به ازای $k \rightarrow 0$ با عبارت:

$$\sigma_{\text{tot}} = \sigma_{I=0} = 4\pi \lim_{k \rightarrow 0} \left| \frac{1}{k \cot \delta_0 - ik} \right|^2 = 4\pi a^2 \quad (14-7-7)$$

داده می شود [(۱۶-۶-۷) را ببینید].

اگرچه a بُعد یکسانی با گستره‌ی پتانسیل R دارد اما a و R در مرتبه‌ی بزرگی با هم متفاوت هستند. به‌ویژه برای یک پتانسیل جاذب، ممکن است که بزرگی طول پراکندگی بسیار بزرگ‌تر از گستره‌ی پتانسیل باشد. برای دیدن معنی فیزیکی a ، توجه می‌کنیم که a چیزی غیر از محل تقاطع تابع موج بیرونی نیست. برای یک پتانسیل دافع، $a > 0$ است و تقریباً از مرتبه‌ی R است. همان‌طور که در شکل ۹-۷ الف دیده می‌شود. اما، برای پتانسیل جاذب، محل تقاطع در سمت منفی واقع است (شکل ۹-۷ ب). اگر جاذبه را افزایش دهیم، تابع موج بیرون می‌تواند دوباره از محور r در سمت مثبت عبور کند. (شکل ۹-۷ ج).

تغییر علامتی که ناشی از افزایش جاذبه است وابسته به ایجاد یک حالت مقید است. برای دیدن این نکته به‌طور کمی، توجه می‌کنیم که در شکل ۹-۷ ج، وقتی a بسیار بزرگ و مثبت است، تابع موج به‌طور محسوسی برای $r > R$ تخت می‌شود. اما (۱۰-۷-۷) با a خیلی بزرگ، با e^{-kr} با k تقریباً صفر تفاوتی ندارد. اکنون e^{-kr} با $\kappa \approx 0$ برای $r > R$ تابع موج حالت مقیدی است که انرژی بی‌نهایت کوچک منفی دارد. تابع موج داخل ($r < R$) برای مورد $E = 0 +$ (پراکندگی با انرژی جنبشی صفر) و مورد $E = 0 -$ (حالت مقید با انرژی بی‌نهایت کوچک مقید) تقریباً یکسان است. چون k' در $\sin k'r$ [(۶-۷-۷)] با رابطه‌ی زیر مشخص می‌شود:

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} = E - V_0 \approx |V_0| \quad (15-7-7)$$

که E بسیار کوچک است (مثبت یا منفی).

از آنجا که توابع موج داخل برای دو وضعیت فیزیکی ($E = 0+$ و $E = 0-$) یکسان هستند، می‌توانیم مشتق لگاریتمی تابع موج حالت مقید را با جواب شامل صفر انرژی جنبشی پراکندگی برابر قرار دهیم:

$$-\frac{\kappa e^{-\kappa r}}{e^{-\kappa r}} \Big|_{r=R} = \left(\frac{1}{r-a} \right) \Big|_{r=R} \quad (۱۶-۷-۷)$$

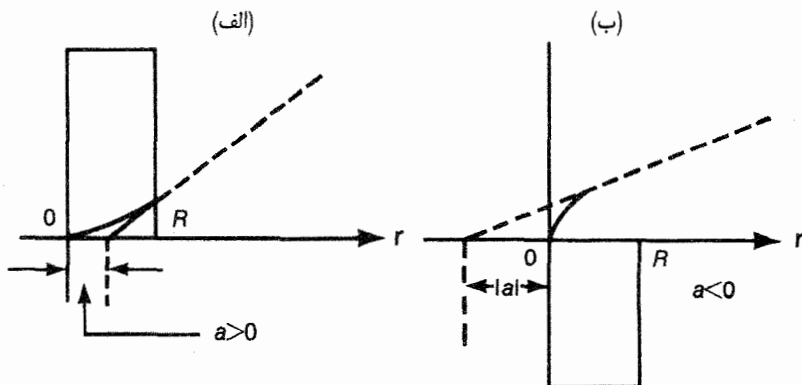
یا اگر $R \ll a$

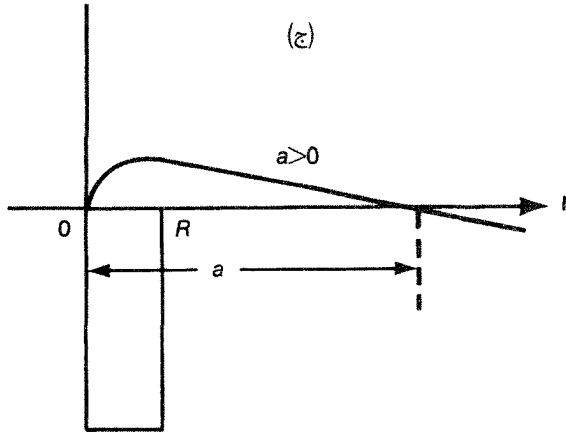
$$\kappa \approx \frac{1}{a} \quad (۱۷-۷-۷)$$

انرژی بستگی در رابطه‌ی

$$E_{BE} = -E_{\text{bound state}} = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2}{2ma^2} \quad (۱۸-۷-۷)$$

صدق می‌کند و به این ترتیب، رابطه‌ای بین طول پراکندگی و انرژی حالت مقید به دست می‌آوریم. این نتیجه‌ی قابل توجهی است. اگر حالت مقید ضعیفی داشته باشیم، می‌توانیم استنتاج کنیم که با انجام آزمایشات پراکندگی با انرژی جنبشی نزدیک به صفر، a اندازه‌گیری شده بسیار بزرگ‌تر از محدوده‌ی R پتانسیل است. این رابطه بین طول پراکندگی و انرژی حالت مقید، نخستین بار توسط ویگنر به دست آمد. او سعی کرد که (۱۸-۷-۷) را بر پراکندگی np اعمال کند.





شکل ۷-۹: نمودار $u(r)$ بر حسب r برای (الف) پتانسیل دافع (ب) پتانسیل جاذب، و (ج) جاذبه‌ی عمیق‌تر. محل تلاقی a که نشان‌دهنده‌ی انرژی صفر تابع موج بیرون است و محور r را قطع کرده است در هر سه شکل مشخص شده است.

به‌طور آزمایشگاهی حالت 3S_1 سیستم np یک حالت مقید دارد. یعنی دوترونی با:

$$E_{BE} = 2.22 \text{ MeV} \quad (19-7-7)$$

طول پراکندگی برابر است با:

$$a_{\text{سه‌گانه}} = 5.4 \times 10^{-13} \text{ cm} \quad (20-7-7)$$

که منجر به پیش‌بینی زیر برای انرژی بستگی می‌شود:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2\mu a^2} &= \frac{\hbar^2}{m_N a^2} = m_N c^2 \left(\frac{\hbar}{m_N c a} \right)^2 \\ &= (938 \text{ MeV}) \left(\frac{2.1 \times 10^{-14} \text{ cm}}{5.4 \times 10^{-13} \text{ cm}} \right)^2 = 1.4 \text{ MeV} \end{aligned} \quad (21-7-7)$$

که در آن جرم کاهش یافته‌ی μ با $m_{n,p}/2$ تخمین زده شده است. توافق (۱۹-۷-۷) با (۲۱-۷-۷) چندان رضایت‌بخش نیست. این عدم توافق ناشی از آن است که توابع موج داخل دقیقاً شبیه به هم نیستند و $R \gg a_{\text{سه‌گانه}}$ در واقع تقریب خوبی برای دوترون نیست. نتیجه بهتر را می‌توان با در نظر گرفتن جمله‌ی بعدی در بسط $k \cot \delta$ به‌عنوان تابعی از k به‌دست آورد:

$$k \cot \delta_0 = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_0 k^2 \quad (22-7-7)$$

که در آن r_0 به‌عنوان گستره‌ی اثر در نظر گرفته می‌شود (برای مثال، پترسون ۱۹۶۲ و ۲۳ را ببینید).

حالت‌های مقید به عنوان قطب‌های $S_l(k)$

این بخش را با مطالعه‌ی خواص تحلیلی دامنه‌ی $S_l(k)$ برای $l = 0$ به پایان می‌بریم. بیایید تا به (۷-۶-۸) و (۷-۶-۱۲) بازگردیم که در آن تابع موج شعاعی برای $l = 0$ در فاصله‌ی زیاد متناسب است با:

$$S_{l=0}(k) \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-ikr}}{r} \quad (۷-۶-۲۳)$$

این رابطه را با تابع موج حالت مقید در فاصله‌ی زیاد مقایسه کنید:

$$\frac{e^{-kr}}{r} \quad (۷-۶-۲۴)$$

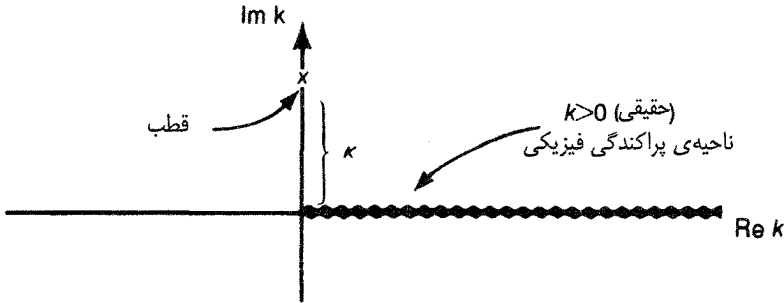
وجود حالت مقید منجر به یک جواب غیربدیهی برای معادله‌ی شرودینگر با $E < 0$ می‌شود که فقط برای یک مقدار خاص (گسسته) K وجود دارد. حدس می‌زنیم که e^{-kr}/r شبیه به e^{-kr}/r است با این تفاوت که k اکنون موهومی خالص است. جدا از موهومی بودن k ، اختلاف مهم بین (۷-۶-۲۳) و (۷-۶-۲۴) این است که در مورد حالت مقید، حتی بدون قیاس با موج فرودی، e^{-kr}/r وجود دارد. به‌طور کلی فقط نسبت ضریب e^{ikr}/r به e^{-ikr}/r از نظر فیزیکی جالب است و این نسبت با $S_l(k)$ داده می‌شود. در مورد حالت مقید، حتی بدون موج فرودی می‌توانیم موج بیرون‌رونده (با k موهومی) را داشته باشیم. بنابراین این نسبت ∞ است. یعنی $S_{l=0}(k)$ به‌عنوان تابعی از متغیر مختلط k در $k = iK$ یک قطب دارد. بنابراین یک حالت مقید منجر به یک قطب (که می‌تواند با یک قطب ساده نمایش داده شود) در سمت مثبت محور موهومی صفحه‌ی مختلط k می‌گردد. شکل ۷-۱۰ را ببینید. k حقیقی و مثبت، خاستگاه فیزیکی پراکندگی است. در این جا باید داشته باشیم [در مقایسه با (۷-۶-۱۴)]:

$$S_{l=0} = e^{2i\delta_0} \quad (۷-۶-۲۵)$$

که در آن δ_0 حقیقی است. به‌علاوه به‌ازای $k \rightarrow 0$ ، $k \cot \delta_0$ مقدار حدی $-1/a$ را خواهد داشت [(۷-۶-۱۳)]، که محدود است. بنابراین δ_0 باید به‌شکل زیر رفتار کند:

$$\delta_0 \rightarrow 0, \pm \pi, \dots \quad (۷-۶-۲۶)$$

به این ترتیب به‌ازای $k \rightarrow 0$ داریم $S_{l=0} = e^{2i\delta_0} \rightarrow 1$:



شکل ۷-۱۰: نمودار k مختلط با قطب حالت مقید در $k = i\kappa$

اکنون بگذارید تا یک تابع ساده تشکیل دهیم که شرط‌های زیر را برآورده سازد:

۱- قطب در $k = i\kappa$ (وجود حالت مقید)

۲- برای $k > 0$ و حقیقی داشته باشیم: $|S_{l=0}| = 1$ (یکانی بودن) (۷-۷-۲۷)

۳- در $k = 0$ داشته باشیم: $S_{l=0} = 1$ (رفتار آستانه)

تابع ساده‌ای که هر سه شرط (۷-۷-۲۷) را برآورده کند عبارت است از:

$$S_{l=0}(k) = \frac{-k - i\kappa}{k - i\kappa} \quad (۷-۷-۲۸)$$

[یادداشت ویراستار: معادله‌ی (۷-۷-۲۸) نسبت به مثال‌های واقعی فیزیکی، ساده انگار شده است. برای

پتانسیل‌های منطقی (نه کره‌ی سخت!) جابه‌جایی فاز به‌ازای $k \rightarrow \infty$ صفر می‌شود.]

فرض مهمی که منجر به انتخاب این شکل از تابع شد، این است که تکنیکی دیگری سوا از قطب حالت

مقید وجود ندارد. پس می‌توانیم با استفاده از (۷-۶-۱۵) برای $f_{l=0}(k)$ به‌دست آوریم:

$$f_{l=0} = \frac{S_{l=0} - 1}{2ik} = \frac{1}{-\kappa - ik} \quad (۷-۷-۲۹)$$

با مقایسه‌ی این رابطه و (۷-۶-۱۶) داریم:

$$f_{l=0} = \frac{1}{k \cot \delta_0 - ik} \quad (۷-۷-۳۰)$$

می‌بینیم که

$$\lim_{k \rightarrow 0} k \cot \delta_0 = -\frac{1}{a} = -\kappa \quad (۷-۷-۳۱)$$

که این دقیقاً رابطه‌ی بین حالت مقید و طول پراکندگی [(۷-۷-۱۷)] است.

بنابراین واضح است که با رفتار یکانی و تحلیلی $S_l(k)$ در صفحه k ، می توانیم به قسمی از اطلاعات دست یابیم که می توانست با حل صریح معادله ی شرودینگر تأمین شود. این تکنیک می تواند در مسأله هایی که در آن ها جزییات پتانسیل معلوم نیست، بسیار مفید واقع شود.

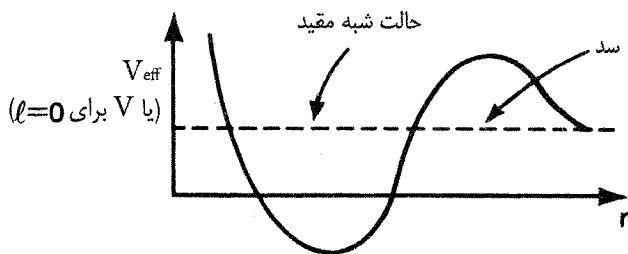
۸.۷ پراکندگی تشدید

در فیزیک اتمی، هسته ای و ذرات، اغلب با وضعیتی سروکار داریم که در آن سطح مقطع پراکندگی برای موج پاره ای داده شده یک قله دارد. این بخش به بررسی دینامیک این چنین تشدید می پردازد.

در ادامه یک پتانسیل با گستره ی محدود $V(r)$ در نظر می گیریم. پتانسیل مؤثر مناسب برای تابع موج شعاعی l امین موج پاره ای، $V(r)$ است، به علاوه ی جمله ی گریز از مرکز ناشی از سد که با $-V-V$ داده می شود. فرض کنید که خود $V(r)$ جاذب است. از آن جا که جمله ی دوم

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}$$

دافع است، با وضعیتی سروکار داریم که همانند شکل ۷-۱۱ پتانسیل مؤثر یک چاه جاذب است که پشت سر آن یک سد دافع در فاصله ی دورتری قرار گرفته است.



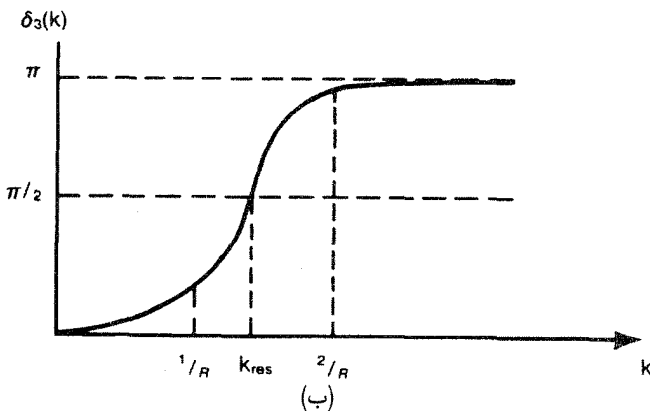
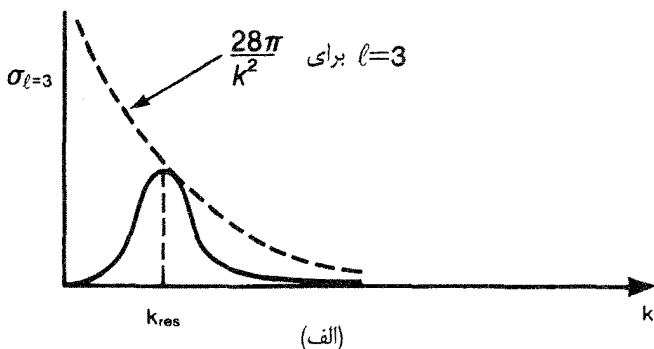
شکل ۷-۱۱: V_{eff} بر حسب r

فرض کنید که سد بی نهایت بزرگ باشد. آنگاه ذرات در درون چاه گیر می کنند. این طور بگوییم که انتظار یک حالت مقید با انرژی $E > 0$ را داریم. این ها حالت های مقید حقیقی هستند. یعنی ویژه حالت های هامیلتونی با ویژه مقادیر معلوم E می باشند. به عبارت دیگر، این ها حالت های پایا با طول عمر بی نهایتند.

در حالت واقعی تر که سد بی نهایت نیست، ذرات در داخل چاه گیر می کنند اما برای همیشه در آن نمی مانند. به طوری که یک حالت مقید به خاطر تونل زنی کوانتومی طول عمر محدودی دارد. به بیان دیگر

یک ذره به سد رخنه می‌کند تا از منطقه بیرون رود. بگذارید تا به این حالت، حالت شبه مقید بگوییم چون اگر طول سد بی‌نهایت بود، این حال می‌توانست یک حالت مقید حقیقی باشد.

با افزایش انرژی موج فرودی بیش از حالت شبه مقید، جابه‌جایی فاز پراکندگی متناظر با δ_l از $\pi/2$ بیشتر می‌شود و در همان زمان سطح مقطع موج پاره‌ای متناظر از بیشترین مقدار ممکن خود یعنی $4\pi(2l+1)/k^2$ می‌گذرد. [یادداشت ویراستار: چنین افزایش تیزی در جابه‌جایی فاز، در معادله‌ی شرودینگر وابسته به زمان، متناظر با یک تأخیر در بیرون آمدن ذرات گیر افتاده است.]



شکل ۷-۱۲: نمودارها برای یک چاه کروی با $2mV_0R^2/\hbar^2 = 5.5$ ترسیم شده‌اند.

نشان دادن این نکته، برای برخی از پتانسیل‌های شناخته شده، آموزنده است. نتایج یک محاسبه‌ی عددی نشان می‌دهد که در واقع برای $l \neq 0$ با یک پتانسیل چاه کروی، رفتار تشدیدی رخ می‌دهد. در شکل ۷-۱۲، نتایج یک چاه کروی را با $2mV_0R^2/\hbar^2 = 5.5$ و $l = 3$ مشخص کرده‌ایم. جابه‌جایی فاز (شکل ۷-۱۲ ب) که در حد انرژی‌های خیلی پایین، کوچک است، پس از $k = 1/R$ به سرعت رو به افزایش می‌گذارد و در $k = 1.3/R$ به حدود $\pi/2$ می‌رسد.

مثال بسیار آموزنده‌ی دیگر با در نظر گرفتن یک پتانسیل پوسته‌ای δ ی دافع انگار می‌شود، که بطور صریح حل پذیر است (مسأله‌ی ۹ این فصل را ببینید):

$$\frac{2m}{\hbar^2} V(r) = \gamma \delta(r - R) \quad (1-8-7)$$

در این جا تشدید برای $l = 0$ ممکن است چون خود پتانسیل پوسته‌ای δ می‌تواند ذره را در ناحیه‌ی $0 < r < R$ گیر بیاندازد. برای مورد $\gamma = \infty$ ، انتظار داریم که یک سری حالت مقید در ناحیه‌ی $r < R$ با

$$kR = \pi, 2\pi, \dots \quad (2-8-7)$$

داشته باشیم. این به آن خاطر است که تابع موج شعاعی برای $l = 0$ نه تنها باید در $r = 0$ صفر شود بلکه در این مورد در $r = R$ نیز صفر خواهد شد. در ناحیه‌ی $r > R$ ، به‌طور ساده، پراکندگی کروی سخت با جابه‌جایی فاز موج k را داریم که با رابطه‌ی

$$\delta_0 = -kR \quad (3-8-7)$$

داده می‌شود. وقتی $\gamma = \infty$ است، ممکن نیست که رابطه‌ای بین دو مسأله وجود داشته باشد، چون دیواره واقع در $r = R$ نفوذناپذیر خواهد بود.

هنگامی که به‌طور صریح نشان دهیم، این وضعیت با سد غیربینهایت، بسیار جذاب‌تر خواهد شد. وقتی که

$$E_{\text{فرودی}} \approx E_{\text{مقید}} \quad (4-8-7)$$

باشد، جابه‌جایی فاز پراکندگی رفتار تشدیدی از خود نشان خواهد داد. به‌علاوه، r بزرگ‌تر، قله‌ی تشدید تیزتری خواهد داشت. اما جدا از تشدید، δ_0 خیلی شبیه به جابه‌جایی فاز کروی سخت به‌نظر می‌رسد. بنابراین وضعیتی داریم که در آن رفتار تشدید روی یک زمینه‌ی پراکندگی با رفتار نرم قرار گرفته است. این وضعیت به‌عنوان سدی برای پراکندگی هسته‌ای نوترون به‌کار می‌رود که در آن یک سری قله‌ی تشدید نیز بر روی یک سطح مقطع نرم مشاهده می‌شود.

به بحث کلی پراکندگی تشدید بازمی‌گردیم. سؤال این است که دامنه‌های پراکندگی در مجاورت انرژی تشدید، چطور تغییر می‌کنند. همان‌طور که در بالا بحث کردیم، اگر بین بزرگ بودن δ_0 و حالت‌های شبه‌ایستا ارتباطی داشته باشیم، δ_0 باید از پایین $\pi/2$ (یا $3\pi/2$ و ...) بگذرد. به‌عبارت دیگر δ_0 باید از بالا از صفر گذر کند. فرض می‌کنیم که در مجاورت تشدید یعنی:

$$E \approx E_r \quad (5-8-7)$$

$\cot \delta_l$ تغییرات نرمی داشته باشد. سعی می‌کنیم که $\cot \delta_l$ را به شکل زیر بسط دهیم:

$$\cot \delta_l = \underbrace{\cot \delta_l|_{E=E_r}}_0 - c(E - E_r) + 0[(E - E_r)^2] \quad (۶-۸-۷)$$

این رابطه به

$$\begin{aligned} f_l(k) &= \frac{1}{k \cot \delta_l - ik} = \frac{1}{k [-c(E - E_r) - i]} \\ &= -\frac{\Gamma/2}{k \left[(E - E_r) + \frac{i\Gamma}{2} \right]} \end{aligned} \quad (۷-۸-۷)$$

منجر می‌شود. که در آن عرض Γ را به صورت

$$\left. \frac{d(\cot \delta_l)}{dE} \right|_{E=E_r} = -c \equiv -\frac{2}{\Gamma} \quad (۸-۸-۷)$$

تعریف کرده‌ایم. دقت کنید که اگر δ_l به سرعت تغییر کند، $\cot \delta_l$ خیلی کوچک می‌شود. اگر یک تشدید ساده بر سطح مقطع l آمین موج پاره‌ای قرار گیرد، یک فرمول تشدید مرتبه یک به دست می‌آوریم (فرمول بریت-ویگنر):

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} \frac{(2l+1)(\Gamma/2)^2}{(E - E_r)^2 + \Gamma^2/4} \quad (۹-۸-۷)$$

بنابراین منطقی است که Γ را به عنوان تمام عرض، نیمه‌ی بیشینه در نظر بگیریم. عرض این بیشینه که از تشدید ایجاد شده به طور منطقی نازک است بنابراین تغییرات در $1/k^2$ می‌تواند نادیده گرفته شود.

۹.۷ ذرات یکسان و پراکندگی

به عنوان یک مثال برای روشن شدن مسأله‌ی فاز دامنه‌ی پراکندگی، بگذارید تا پراکندگی دو ذره‌ی باردار بدون اسپین را در نظر بگیریم که این پراکندگی، به خاطر پتانسیل کولنی صورت یافته است (که در بخش ۱۳-۷ بیشتر راجع به آن صحبت می‌کنیم). تابع موج فضایی باید متقارن باشد، بنابراین تابع موج فرضی باید شبیه به

$$e^{ik \cdot x} + e^{-ik \cdot x} + [f(\theta) + f(\pi - \theta)] \frac{e^{ikr}}{r} \quad (۱-۹-۷)$$

باشد که در آن $\mathbf{x} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$ بردار موقعیت نسبی بین دو ذره‌ی ۱ و ۲ است. این نتایج در سطح مقطع دیفرانسیلی عبارت است از:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 + 2\text{Re}[f(\theta)f^*(\pi - \theta)] \end{aligned} \quad (2-9-7)$$

سطح مقطع در تداخل سازنده‌ای که در $\theta \approx \pi/2$ صورت می‌پذیرد، افزایش می‌یابد.

در عوض، برای پراکندگی دو ذره با اسپین $\frac{1}{2}$ ، با پرتو غیرقطبیده و V مستقل از اسپین، پراکندگی اسپین یگانه با تابع متقارن فضایی رخ می‌دهد و اسپین سه‌گانه با تابع موج پادمقارن فضایی ایجاد می‌شود. (بخش ۶-۳ را ببینید). اگر موج اولیه غیرقطبیده باشد، سهم آماری $\frac{1}{4}$ را برای اسپین یگانه و سهم $\frac{3}{4}$ را برای اسپین سه‌گانه داریم. بنابراین:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{1}{4}|f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 + \frac{3}{4}|f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 - \text{Re}[f(\theta)f^*(\pi - \theta)] \end{aligned} \quad (3-9-7)$$

به عبارت دیگر، در $\theta \approx \pi/2$ انتظار یک تداخل مخرب را داریم. این مطلب، در عمل نیز قابل مشاهده است.

۱۰.۷ ملاحظات تقارنی در پراکندگی

فرض کنید که V و H_0 تحت برخی از عملگرهای تقارنی ناورد باشند. می‌توانیم بررسی کنیم که چه اتفاقی برای آرایه‌های ماتریسی T یا دامنه‌ی پراکندگی $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ می‌افتد.

اگر عملگر تقارنی یکانی باشد (برای مثال، چرخش و یا پاریته) همه چیز سراسر خواهد بود. با استفاده از شکل صریح T که از (۷-۲-۲۰) به دست می‌آید می‌بینیم که:

$$UH_0U^\dagger = H_0, \quad UVU^\dagger = V \quad (1-10-7)$$

که این منجر می‌شود به این که T نیز تحت U ناورد است. یعنی:

$$UTU^\dagger = T \quad (2-10-7)$$

تعریف می‌کنیم:

$$|\bar{\mathbf{k}}\rangle \equiv U|\mathbf{k}\rangle, \quad |\bar{\mathbf{k}}'\rangle \equiv U|\mathbf{k}'\rangle \quad (3-10-7)$$

پس داریم:

$$\begin{aligned}\langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle &= \langle \vec{k}' | U^\dagger U T U^\dagger U | \vec{k} \rangle \\ &= \langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle\end{aligned}\quad (۴-۱۰-۷)$$

به عنوان یک مثال، مورد خاصی را در نظر می‌گیریم که در آن U ، عملگر پاریته است:

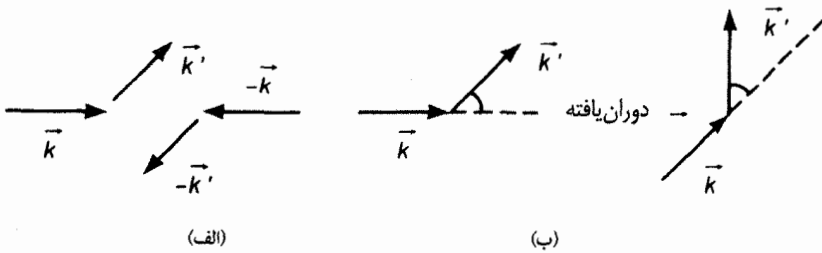
$$\pi |\vec{k}\rangle = |-\vec{k}\rangle, \quad \pi |-\vec{k}\rangle = |\vec{k}\rangle \quad (۵-۱۰-۷)$$

این ناوردایی H_0 و V تحت پاریته به این معنی است که:

$$\langle -\vec{k}' | T | -\vec{k} \rangle = \langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle \quad (۶-۱۰-۷)$$

به طور تصویری، این وضعیت در شکل ۷-۱۳ الف پدیدار شده است.

وقتی که روش پاره موج‌ها را گسترش می‌دادیم، نتایج پایستگی تکانه زاویه‌ای را به کار بستیم. این واقعیت که T در نمایش $|Elm\rangle$ قطری است، نتیجه‌ی مستقیم این مطلب است که T تحت چرخش ناوردا می‌ماند. همچنین توجه کنید که $\langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle$ همان‌طور که در شکل ۷-۱۳ ب نشان داده شده است، تنها به جهت‌گیری \vec{k} و \vec{k}' بستگی دارد.



شکل ۷-۱۳: (الف) برابری آرایه‌های ماتریسی T به ازای $k \rightarrow k'$ و $-k \rightarrow -k'$.

(ب) برابری آرایه‌های ماتریسی T تحت چرخش.

وقتی جهت‌گیری تقارنی پادیکانی (به‌ازای وارونی زمانی) باشد، باید بیشتر دقت کنیم. نخست توجه می‌کنیم، این الزام که V همانند H_0 ، تحت وارونی زمانی باید ناوردا باشد، ایجاب می‌کند که:

$$\Theta T \Theta^{-1} = T^\dagger \quad (۷-۱۰-۷)$$

به این خاطر که عملگر پادمقارنی در (۷-۲-۲۰) تغییر زیر را موجب می‌شود:

$$\frac{1}{E - H_0 - i\epsilon} \quad \text{به} \quad \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} \quad (۸-۱۰-۷)$$

همچنین یادآوری می‌کنیم که برای یک عملگر پادمتقارن [(۴-۴-۱۱) را ببینید] داریم:

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \langle \bar{\alpha} | \bar{\beta} \rangle \quad (۹-۱۰-۷)$$

که در آن

$$|\bar{\alpha}\rangle \equiv \Theta|\alpha\rangle \quad \text{and} \quad |\bar{\beta}\rangle \equiv \Theta|\beta\rangle \quad (۱۰-۱۰-۷)$$

است. بگذارید تا

$$|\alpha\rangle = T|\mathbf{k}\rangle, \quad \langle \beta| = \langle \mathbf{k}'| \quad (۱۱-۱۰-۷)$$

را در نظر بگیریم. آنگاه نتیجه می‌شود:

$$\begin{aligned} |\bar{\alpha}\rangle &= \Theta T|\mathbf{k}\rangle = \Theta T \Theta^{-1} \Theta|\mathbf{k}\rangle = T^+ |-\mathbf{k}\rangle \\ |\bar{\beta}\rangle &= \Theta|\mathbf{k}'\rangle = |-\mathbf{k}'\rangle \end{aligned} \quad (۱۲-۱۰-۷)$$

در نتیجه (۹-۱۰-۷) می‌شود:

$$\langle \mathbf{k}'|T|\mathbf{k}\rangle = \langle -\mathbf{k}'|T|-\mathbf{k}\rangle \quad (۱۳-۱۰-۷)$$

توجه کنید که تکانه‌ی اولیه و نهایی با هم مبادله می‌شوند، به علاوه جهت تکانه‌ها عکس می‌شود.

روی هم گذاشتن الزامات وارونی زمانی [(۷-۱۰-۱۳)] و پارته [(۷-۱۰-۶)] نیز جالب است:

$$\langle \mathbf{k}'|T|\mathbf{k}\rangle \stackrel{\Theta}{=} \langle -\mathbf{k}'|T|-\mathbf{k}\rangle \stackrel{\pi}{=} \langle \mathbf{k}|T|\mathbf{k}'\rangle \quad (۱۴-۱۰-۷)$$

یعنی از (۷-۲-۱۹) و (۷-۲-۲۲) داریم:

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \quad (۱۵-۱۰-۷)$$

در نتیجه داریم:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') = \frac{d\sigma}{d\Omega}(\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k}) \quad (۱۶-۱۰-۷)$$

معادله‌ی (۷-۱۰-۱۶) به توازن جزئی مشهور است.

نگریستن به (۷-۱۰-۱۴) وقتی که اسپین داریم جالب تر است. در این جا می‌توانیم کت ذره‌ی آزاد

اولیه را با $|\mathbf{k}, m_s\rangle$ مشخص کنیم و [(۴-۴-۷۹) را برای وارونی زمانی به شکل زیر بنویسیم:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}', m'_s | T | \mathbf{k}, m_s \rangle &= i^{-2m_s+2m'_s} \langle -\mathbf{k}, -m_s | T | -\mathbf{k}', -m'_s \rangle \\ &= i^{-2m_s+2m'_s} \langle \mathbf{k}, -m_s | T | \mathbf{k}', -m'_s \rangle \end{aligned} \quad (۱۷-۱۰-۷)$$

برای حالت‌های غیرقطبیده‌ی اولیه، روی تمام حالت‌های اسپینی اولیه جمع می‌زنیم و حاصل را بر $(2s + 1)$ تقسیم می‌کنیم. اگر قطبش نهایی مشاهده نشد، باید روی تمام حالت‌های نهایی جمع بزنیم. آنگاه توازن جزئی به صورت زیر است:

$$\overline{\frac{d\sigma}{d\Omega}}(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') = \overline{\frac{d\sigma}{d\Omega}}(\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k}) \quad (18-10-7)$$

که خط بالای $d\sigma/d\Omega$ در (۱۸-۱۰-۷) به معنی متوسط گیری روی حالت‌های اسپینی اولیه و جمع روی حالت‌های اسپینی نهایی است.

۱۱.۷ فرمول بندی وابسته به زمان پراکندگی

بحث ما در مورد پراکندگی هنوز بر پایه‌ی فرمول بندی مستقل از زمان است. می‌توانیم فرمول بندی پراکندگی را بر پایه‌ی معادله‌ی شرودینگر وابسته به زمان گسترش دهیم. نشان می‌دهیم که این فرمول بندی به معادله‌ای شبیه به معادله‌ی لیمن-شونینگر (۶-۱-۷) منجر می‌شود.

در فرمول بندی وابسته به زمان، فرآیند پراکندگی را به منزله‌ی تغییر در کت حالت، از یک کت حالت ذره‌ی آزاد به یک کت حالت متأثر از حضور پتانسیل V ، در نظر می‌گیریم. معادله‌ی حرکت اساسی عبارت است از:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) |\psi; t\rangle = V |\psi; t\rangle \quad (1-11-7)$$

که در آن $|\psi; t\rangle$ کت شرودینگر وابسته به زمان در حضور V است. شرط مرزی مناسب برای مسأله‌ی پراکندگی این است که در زمان خیلی قبل $(t \rightarrow -\infty)$ ، ذره آزاد بوده باشد. اگر به پتانسیلی که به آهستگی تغییر می‌کند و در بخش ۵-۸ به آن پرداختیم بازگردیم، این الزام به طور خودکار برآورده می‌شود.

$$V \rightarrow \lim_{\eta \rightarrow 0} V e^{\eta t} \quad (2-11-7)$$

درست مانند معادله‌ی دیفرانسیل پاره‌ای با یک جمله‌ی غیرهمگن که با معرفی توابع گرین حل شد [(۱۸-۱-۷) را ببینید]. معادله‌ی شرودینگر عملگری (۱-۱۱-۷) با معرفی عملگر گرین $G_+(t, t')$ که در

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) G_+(t, t') = \delta(t - t') \quad (3-11-7)$$

صدق می کند، قابل حل است. بنا به الزام علیت، G_+ را مقید می کنیم که برهم کنش یک ذره در t' فقط در زمان $t > t'$ تأثیر گذار باشد. بنابراین شرط مرزی تأخیری زیر را لحاظ می کنیم:

$$G_+(t, t') = 0 \quad \text{for } t < t' \quad (۴-۱۱-۷)$$

ادعا می کنیم که جواب (۳-۱۱-۷) و (۴-۱۱-۷) برای $t > t'$ برابر است با:

$$G_+(t, t') = -\frac{i}{\hbar} \theta(t - t') e^{-iH_0(t-t')/\hbar} \quad (۵-۱۱-۷)$$

پیداست که یک ثابت ضرب در $e^{-iH_0(t-t')/\hbar}$ معادله ی دیفرانسیل (۳-۱۱-۷) را برقرار می سازد چون تابع δ در طرف راست نامعتبر است. برای $t < t'$ ، پیداست که شرط دلخواه (۴-۱۱-۷) را داریم چون در این جا $G_+(t, t')$ برابر با صفر است. در $t = t'$ ، توجه می کنیم که یک سهم اضافه وجود دارد که ناشی از ناپیوستگی تابع θ است که فقط سمت راست (۳-۱۱-۷) را میزان می کند:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[-\frac{i}{\hbar} \theta(t - t') \right] = \delta(t - t') \quad (۶-۱۱-۷)$$

اکنون می توانیم جواب کلی مسأله را به شکل زیر بنویسیم:

$$|\psi^{(+)}; t\rangle = |\phi; t\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} G_+(t, t') V |\psi^{(+)}; t'\rangle dt' \quad (۷-۱۱-۷)$$

که در آن داریم:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) |\phi; t\rangle = 0 \quad (۸-۱۱-۷)$$

و حد بالایی در انتگرال (۷-۱۱-۷) می تواند t گرفته شود، چون تابع گرین برای $t' > t$ صفر می شود. به ازای $t \rightarrow -\infty$ ، همان طور که نیاز است، $|\psi^{(+)}; t\rangle$ بر $|\phi; t\rangle$ منطبق می شود. این به خاطر آن است که برای هر مقدار معلوم t' ، به ازای $t \rightarrow -\infty$ صفر می شود. برای این که بینیم (۷-۱۱-۷) در معادله ی شرودینگر وابسته به زمان (۱-۱۱-۷) صدق می کند، بلافاصله عملگر $[i\hbar(\partial/\partial t) - H_0]$ را بر $|\psi^{(+)}; t\rangle$ اعمال می کنیم. کت $|\phi; t\rangle$ سهمی ندارد. به همین ترتیب، اثر جمله ی دوم $[i\hbar(\partial/\partial t) - H_0]$ نیز بر G_+ تنها $\delta(t - t')$ را می دهد. به این معنی که انتگرال گیری سریعاً با $V |\psi^{(+)}; t\rangle$ محاسبه می شود.

تا به این جا، به این که $|\psi^{(+)}; t\rangle$ ویژه کت انرژی باشند، نیازی نداشته ایم. اگر این گونه باشد می توانیم وابستگی زمانی را به طور معمولی جدا کنیم:

$$|\phi; t\rangle = |\phi\rangle e^{-iEt/\hbar}$$

$$|\psi; t\rangle = |\psi\rangle e^{-iEt/\hbar}$$

در این جا تلویحاً فرض شده است که اگر V مطابق (۷-۱۱-۲) به طور آهسته تغییر کند، تغییری در E رخ نمی دهد. با محاسبه ی (۷-۱۱-۵) و (۷-۱۱-۷) در $t = 0$ ، داریم:

$$|\psi^{(+)}\rangle = |\phi\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 dt' e^{iH_0 t'/\hbar} e^{-iEt'/\hbar} V |\psi^{(+)}\rangle \quad (۷-۱۱-۱۰)$$

انتگرال ممکن است تا بی نهایت نوسان کند. اما به یاد می آوریم V در واقع به شکل $V e^{\eta t}$ است. در نتیجه انتگرال زمانی سراسر است:

$$\begin{aligned} |\psi^{(+)}\rangle &= |\phi\rangle - \frac{i}{\hbar} \lim_{\eta'' \rightarrow -\infty} \int_{t''}^0 dt' e^{i(H_0 - E - i\eta\hbar)t'/\hbar} V |\psi^{(+)}\rangle \\ &= |\phi\rangle - \frac{1}{H_0 - E - i\eta\hbar} \left[1 - \lim_{t'' \rightarrow -\infty} e^{i(H_0 - E)/\hbar + \eta} t'' \right] V |\psi^{(+)}\rangle \end{aligned} \quad (۷-۱۱-۱۱)$$

اما به ازای $t'' \rightarrow -\infty$ ، این همان معادله ی لیمن-شرویدینگر (۷-۱۱-۶) است.

خواننده باید دقت کند که $i\varepsilon$ چطور در هر دو فرمول بندی ظاهر می شود. پیش تر با استفاده از فرمول بندی مستقل از زمان دیدیم که انتخاب علامت مثبت جمله ی $i\varepsilon$ (بخش ۷-۱ را ببینید) متناظر با این است که اثر پراکنده ساز تنها روی موج های کروی بیرون رونده اثر می کند. در فرمول بندی وابسته به زمان که در این جا ارائه می شود، حضور $i\varepsilon$ ($\varepsilon = \eta\hbar$) در (۷-۱۱-۱۱) ناشی از این الزام است که ذره باید در زمان خیلی دور آزاد بوده باشد.

ممکن است فکر کنید که آهسته روشن کردن پتانسیل (۷-۱۱-۲) تا حدی ساختگی است. اما بیابید فرض کنیم که ما برای توصیف پراکندگی از فرمول بندی بسته موجی استفاده می کنیم. وقتی که بسته موج خارج از محدوده ی پتانسیل است، مطرح نیست که کدام پتانسیل صفر است یا مقدار دارد. به ویژه، V می تواند در زمان خیلی دور صفر باشد و به مشکلی منجر نشود.

ارتباط با نظریه ی اختلال وابسته به زمان

مسأله ی پراکندگی که با استفاده از فرمول بندی وابسته به زمان تا این جا مورد بحث قرار گرفت، بر پایه ی معادله ی شرویدینگر وابسته به زمان (۷-۱۱-۱) استوار است. باید بتوانیم بر مبنای (۷-۱۱-۱) یک شکل تقریبی اعمال کنیم. به ویژه باید قادر باشیم که روش های نظریه ی اختلال مستقل از زمان را که پیش تر در بخش ۵-۶ گسترش یافت به مسأله ی پراکندگی گسترش دهیم. البته این مسأله با ضعیف در نظر گرفتن پتانسیل از برخی جهات، حاصل می گردد.

نخست، نشان می‌دهیم که قانون طلایی چطور می‌تواند برای محاسبه‌ی $d\sigma/d\Omega$ به کار افتد و منجر به نتایج تقریب بورن در بخش ۷-۲ گردد.

فرض می‌کنیم که در زمان خیلی دور کت حالت با یک ویژه‌کت تکانه $\langle \mathbf{k} \rangle$ نشان داده می‌شود. هنگامی که برهم‌کنش به آهستگی روشن می‌شود، (۷-۱۱-۲)، ویژه‌کت‌های دیگری به غیر از $\langle \mathbf{k} \rangle$ (مثلاً $\langle \mathbf{k}' \rangle$) اشغال می‌شوند. همان‌طور که دیدیم احتمال‌گذار (در مرتبه‌ی اول) به روش زیر محاسبه می‌شود (بخش ۵-۶ را ببینید). ابتدا می‌نویسیم:

$$\langle \mathbf{k}' | U_I^{(1)}(t, -\infty) | \mathbf{k} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \langle \mathbf{k}' | V_I(t') | \mathbf{k} \rangle dt' \quad (12-11-7)$$

که در آن

$$V_I(t') = e^{iH_0 t'/\hbar} V e^{-iH_0 t'/\hbar} e^{\eta t'}$$

و

$$E_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m$$

احتمال‌گذار برای یافتن $\langle \mathbf{k}' \rangle$ در زمان t برابر است با:

$$|\langle \mathbf{k}' | U_I^{(1)}(t, -\infty) | \mathbf{k} \rangle|^2 = \frac{|\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle|^2}{\hbar^2} \frac{e^{2\eta t}}{[(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'})^2 / \hbar^2 + \eta^2]} \quad (13-11-7)$$

همان‌طور که انتظار داریم در $\eta \rightarrow 0$ (زمان معلوم)، سرعت‌گذار، از قانون طلایی به دست می‌آید:

$$\frac{d}{dt} |\langle \mathbf{k}' | U_I^{(1)}(t, -\infty) | \mathbf{k} \rangle|^2 = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle|^2 \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'}) \quad (14-11-7)$$

که در آن از (۵-۸-۵) استفاده کردیم. به این توجه کنید که سمت راست (۷-۱۱-۱۴) مستقل از t است. بازنگری به قراردادهای بهنجارش که برای حالت‌های موج تخت استفاده شد در این جا مهم است. در

بخش ۱-۷ از بهنجارش تابع δ استفاده کردیم:

$$\langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle = \delta^{(3)}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (15-11-7)$$

پس رابطه‌ی تمامیت به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$1 = \int d^3k |\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}| \quad (16-11-7)$$

بسیار مفید است که در اعمال نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان در فرآیندهای پراکندگی، از بهنجارش جعبه‌ای استفاده کنیم:

$$\langle \mathbf{k}' | \mathbf{k} \rangle = \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} \quad (17-11-7)$$

که مقادیر مجاز k با رابطه‌ی

$$k_{x,y,z} = \frac{2\pi n_{x,y,z}}{L} \quad (18-11-7)$$

داده می‌شوند. تابع موج به جای $[1/(2\pi)^{3/2}]e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$ عبارت است از:

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (19-11-7)$$

رابطه‌ی تمامیت نیز برابر است با:

$$1 = \sum_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}| \quad (20-11-7)$$

اما یک جعبه‌ی خیلی بزرگ می‌تواند آنچنان خوب رفتار کند که متغیرهای $k_{x,y,z}$ پیوسته باشند، بنابراین:

$$1 = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int d^3k |\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}| \quad (21-11-7)$$

این رابطه شبیه به (۱۶-۱۱-۷) است، به غیر از این که در این جا $(L/2\pi)^3$ نیز حضور دارد. رابطه‌ی بسیار مفیدی که ما را قادر می‌سازد تا از شرط بهنجارش تابع δ به بهنجارش جعبه‌ای برویم عبارت است از:

$$(2\pi)^3 \langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle_{\text{بهنجارش}} = L^3 \langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle_{\text{جعبه‌ای}} \quad (22-11-7)$$

همان‌طور که خواننده نیز می‌تواند با وارد کردن یک مجموعه‌ی کامل از حالت‌ها در نمایش مکان این را نشان دهد.

نمایش جعبه‌ای برای محاسبه‌ی چگالی حالت‌ها بسیار مناسب است. به همین دلیل در بیشتر مواقع برای طرز عمل پراکندگی مبتنی بر نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان مورد استفاده قرار می‌گیرد. بنابراین اگر به پراکندگی در زاویه‌ی حجمی $d\Omega$ علاقه‌مند باشیم، فرمول وابسته عبارت است:

$$n^2 dn d\Omega = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{km}{\hbar^2} dE d\Omega \quad (23-11-7)$$

به پراکندگی بازمی گردیم. پراکندگی را به صورت نرخ گذار w از $|k\rangle$ به حالت‌های $|k'\rangle$ ، در نظر می‌گیریم که این گذار در آرایه‌ای که زوایه‌ی فضایی $d\Omega$ را شامل می‌شود، صورت می‌پذیرد. w با رابطه‌ی

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle k' | V | k \rangle|^2 \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \frac{km}{\hbar^2} d\Omega \quad (24-11-7)$$

داده می‌شود (برای پراکندگی کشسان $k' = k$ است). این رابطه از قانون طلایی (۳۴-۶-۵) و (۱۴-۱۱-۷) به دست می‌آید. این باید با

$$(\text{شار فرودی}) \times \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \quad (25-11-7)$$

معادل باشد. برای شار فرودی به دست می‌آوریم [از $j = (\hbar/m)\text{Im}(\psi^* \nabla \psi)$]:

$$|j| = \frac{\hbar}{m} \left| \text{Im} \left(\frac{e^{-ik \cdot x}}{L^{3/2}} \nabla \frac{e^{ik \cdot x}}{L^{3/2}} \right) \right| = \frac{\hbar k}{mL^3} \quad (26-11-7)$$

از طرف دیگر:

$$\text{شار فرودی} = \frac{\text{سرعت}}{\text{حجم}} = \frac{\hbar k}{mL^3}$$

با جایگذاری آن چه به دست آورده‌ایم داریم:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \left(\frac{mL^3}{\hbar k} \right) \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right) \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \left(\frac{km}{\hbar^2} \right) \left| \frac{1}{L^3} \int d^3x V(x) e^{i(k-k') \cdot x} \right|^2 \\ &= \left| \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x V(x) e^{i(k-k') \cdot x} \right|^2 \end{aligned} \quad (27-11-7)$$

اما این دقیقاً نتیجه‌ی تقریباً مرتبه اول بورن [(۲۲-۲-۷)] است. به روش‌های مشابهی می‌توان جملات مرتبه بالاتر بورن را به دست آورد.

در مجموع، فرمول‌بندی وابسته به زمان که بر پایه‌ی معادله‌ی شرودینگر وابسته به زمان [(۱-۱۱-۷)] است، ما را قادر می‌سازد تا نتایجی را که پیش‌تر با استفاده از فرمول‌بندی مستقل از زمان، به دست آورده بودیم، نظیر معادله‌ی لیمین-شونگر، تقریب بورن و نظایر آن، دوباره به دست آوریم. به علاوه، فرمول‌بندی وابسته به زمان برای بحث کلی‌تر فرآیندهای برهم‌کنشی به‌جای پراکندگی کشسان بسیار مناسب است. به‌عنوان یک مثال واقعی برای روشن شدن مطلب، به بحث درباره‌ی پراکندگی غیرکشسان الکترون‌ها با اتم‌ها می‌پردازیم.

۱۲.۷ پراکندگی غیرکشسان الکترون - اتم

بگذارید تا برهم کنش‌های پرتوهای الکترون با اتم‌ها را در نظر بگیریم که این اتم‌ها در حالت پایه مفروض هستند. اگر پس از پراکندگی، اتم‌ها برانگیخته نشوند، الکترون‌ها پراکندگی کشسان را تجربه خواهند کرد:

$$\text{اتم (حالت پایه)} + e^- \rightarrow \text{اتم (حالت پایه)} + e^- \quad (1-12-7)$$

این مثالی از پراکندگی کشسان است. اگر بتوان اتم را بی‌نهایت سنگین در نظر گرفت، انرژی جنبشی الکترون تغییر نمی‌کند. همچنین ممکن است که اتم هدف به حالت برانگیخته نیز برود:

$$\text{اتم (حالت برانگیخته)} + e^- \rightarrow \text{اتم (حالت پایه)} + e^- \quad (2-12-7)$$

در این جا باید در مورد پراکندگی غیرکشسان صحبت کنیم چون انرژی جنبشی الکترون بیرون روندهی نهایی، دیگر کمتر از الکترون ورودی اولیه است. این تفاوت صرف برانگیخته شدن اتم گشته است.

کت اولیهی الکترون به‌علاوهی سیستم اتمی به‌صورت

$$|k, 0\rangle \quad (3-12-7)$$

نوشته می‌شود. که در آن k وابسته به بردار موج الکترون فرودی و 0 بیان‌کنندهی حالت پایهی اتمی است. به بیان مستقیم (۱۲-۱۳) همان ضرب کت الکترون فرودی $|k\rangle$ در کت اتمی حالت پایهی $|0\rangle$ است. تابع موج متناظر با آن عبارت است از

$$\frac{1}{L^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \psi_0(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_z) \quad (4-12-7)$$

که در آن از بهنجارش جعبه‌ای برای موج تخت استفاده کرده‌ایم.

ممکن است که به حالت نهایی الکترون با بردار موج معلوم k' علاقه‌مند باشیم. کت حالت نهایی و

تابع موج متناظر عبارت است از:

$$|k', n\rangle \quad \text{and} \quad \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}} \psi_n(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_z) \quad (5-12-7)$$

که در آن برای پراکندگی کشسان $n = 0$ و برای پراکندگی غیرکشسان n مخالف صفر است.

فرض می‌کنیم که نظریه‌ی اختلال وابسته به زمان قابل اعمال باشد، سریعاً می‌توانیم سطح مقطع دیفرانسیلی را همانند بخش قبل بنویسیم:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega}(0 \rightarrow n) &= \frac{1}{(\hbar k/m_e L^3)} \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k}'n | V | \mathbf{k}0 \rangle|^2 \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \left(\frac{k'm_e}{\hbar^2} \right) \\ &= \left(\frac{k'}{k} \right) L^6 \left| \frac{1}{4\pi} \frac{2m_e}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}', n | V | \mathbf{k}, 0 \rangle \right|^2 \end{aligned} \quad (6-12-7)$$

همه چیز مانند قبل است، از جمله حذف شدن جملاتی نظیر L^3 ، اما یک تمایز مهم وجود دارد: در حالت کلی برای پراکندگی غیرکشسان $k' \equiv k$ نظیر $k' \equiv |k'|$ نیست.

پرسش بعدی این است که کدام V برای این مسأله ظاهر می‌شود؟ الکترون فرودی می‌تواند با هسته‌ای که در مرکز ثابت فرض شده است، برهم کنش کند. همچنین این الکترون می‌تواند با سایر الکترون‌ها نیز برهم کنش کند. بنابراین می‌توان V را به شکل زیر نوشت:

$$V = -\frac{Ze^2}{r} + \sum_i \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|} \quad (7-12-7)$$

به دلیل همسانی الکترون‌های فرودی با هر کدام از الکترون‌های اتمی، ممکن است پیچیدگی‌ها زیاد شود. بررسی دقیق این مسأله امری غیررایج است. خوشبختانه برای یک الکترون نسبتاً سریع مجازیم که مسأله‌ی همسانی را نادیده بگیریم. به این خاطر که یک همپوشانی کوچک بین الکترون حالت مقید و الکترون فرودی در فضای تکانه وجود دارد. می‌باید آرایه‌ی ماتریسی $\langle \mathbf{k}'n | V | \mathbf{k}0 \rangle$ را محاسبه کنیم، که اگر به صورت صریح نوشته شود عبارت است از:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}'n | V | \mathbf{k}0 \rangle &= \frac{1}{L^3} \int d^3x e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \langle n | -\frac{Ze^2}{r} + \sum_i \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|} | 0 \rangle \\ &= \frac{1}{L^3} \int d^3x e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \prod_i \int d^3x_i \psi_n^*(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_z) \left[-\frac{Ze^2}{r} + \sum_i \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|} \right] \\ &\quad \times \psi_0(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_z) \end{aligned}$$

(۸-۱۲-۷)

که در آن $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ است.

بیاید ببینیم که آرایه‌ی ماتریسی مرتبه اول $-Ze^2/r$ چطور محاسبه می‌شود که در آن r در عمل همان $|\mathbf{x}|$ است. ابتدا توجه می‌کنیم که این پتانسیلی بین الکترون فرودی و اتم‌هاست که مستقل از مختصات الکترون اتمی است. بنابراین در (۷-۱۲-۸)

$$\prod_i \int d^3x_i,$$

از انتگرال بیرون می‌آید و به سادگی به دست می‌آوریم:

$$\langle n|0\rangle = \delta_{n0} \quad (۷-۱۲-۹)$$

به عبارت دیگر، این جمله تنها در مورد پراکندگی کشتان سهم دارد، که در آن اتم هدف بدون برانگیختگی باقی می‌ماند. در مورد کشتان می‌بایست هنوز از r نسبت به \mathbf{x} انتگرال بگیریم. که همان تبدیل فوریه گرفتن از پتانسیل کولنی است، که می‌توان به سرعت آن را انجام داد. چون قبلاً تبدیل فوریه‌ی پتانسیل یوکاوا را در بخش ۷-۲ محاسبه کرده‌ایم [۷-۲-۶] را در رابطه با (۷-۲-۲) ببینید. بنابراین:

$$\int d^3x \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}}{r} = \lim_{\mu \rightarrow 0} \int \frac{d^3x e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x} - \mu r}}{r} = \frac{4\pi}{q^2} \quad (۷-۱۲-۱۰)$$

به همین صورت برای جمله‌ی دوم در (۷-۱۲-۸) می‌توانیم تبدیل فوریه‌ی $1/|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|$ را محاسبه کنیم. با جابه‌جایی متغیرهای مختصات به شکل $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} + \mathbf{x}_i$ می‌توان این عبارت را محاسبه کرد:

$$\sum_i \int \frac{d^3x e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|} = \sum_i \int \frac{d^3x e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{x} + \mathbf{x}_i)}}{|\mathbf{x}|} = \frac{4\pi}{q^2} \sum_i e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}_i}. \quad (۷-۱۲-۱۱)$$

توجه کنید که این، همان تبدیل فوریه‌ی پتانسیل کولنی ضربدر تبدیل فوریه‌ی چگالی الکترون ناشی از الکترون‌های اتمی واقع شده در \mathbf{x}_i است:

$$\rho_{\text{اتم}}(\mathbf{x}) = \sum_i \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \quad (۷-۱۲-۱۲)$$

به‌طور مرسوم عامل فورم $F_n(\mathbf{q})$ را برای برانگیزش از $|0\rangle$ به $|n\rangle$ به صورت زیر در نظر می‌گیریم:

$$ZF_n(\mathbf{q}) \equiv \langle n | \sum_i e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}_i} | 0 \rangle \quad (۷-۱۲-۱۳)$$

که از سهم‌های حالت‌های همدوس (از جهت رابطه‌ی فاز معلوم) ناشی از الکترون‌های مختلف به دست می‌آید. دقت کنید که به‌ازای $q \rightarrow 0$ برای $n = 0$ داریم:

$$\frac{1}{Z} \langle n | \sum_i e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}_i} | 0 \rangle \rightarrow 1$$

بنابراین، عامل فرم در مورد پراکندگی کشسان به سمت واحد میل می‌کند. برای $n \neq 0$ (پراکندگی غیر کشسان)، به ازای $q \rightarrow 0$ ، بنابه متعامد بودن $|n\rangle$ و $|0\rangle$ است. پس می‌توانیم آرایه‌ی ماتریسی در (۸-۱۲-۷) را به شکل زیر بنویسیم:

$$\int d^3x e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \langle n | \left(-\frac{Ze^2}{r} + \sum_i \frac{e^2}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}_i|} \right) | 0 \rangle = \frac{4\pi Ze^2}{q^2} [-\delta_{n0} + F_n(\mathbf{q})] \quad (14-12-7)$$

سرانجام در موقعیتی هستیم که می‌توانیم سطح مقطع دیفرانسیلی را برای پراکندگی غیر کشسان (یا کشسان) الکترون‌ها توسط اتم‌ها بنویسیم:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} (0 \rightarrow n) &= \left(\frac{k'}{k} \right) \left| \frac{1}{4\pi} \frac{2m_e}{\hbar^2} \frac{4\pi Ze^2}{q^2} [-\delta_{n0} + F_n(\mathbf{q})] \right|^2 \\ &= \frac{4m_e^2 (Ze^2)^2}{\hbar^4 q^4} \left(\frac{k'}{k} \right) |-\delta_{n0} + F_n(\mathbf{q})|^2 \end{aligned} \quad (15-12-7)$$

در پراکندگی غیر کشسان، جمله‌ی δ_{n0} سهمی ندارد و مرسوم است که سطح مقطع دیفرانسیلی را برحسب شعاع بوهر

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{e^2 m_e} \quad (16-12-7)$$

می‌نویسند، به طوری که:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} (0 \rightarrow n) = 4Z^2 a_0^2 \left(\frac{k'}{k} \right) \frac{1}{(qa_0)^4} |F_n(\mathbf{q})|^2 \quad (17-12-7)$$

اغلب به جای $d\sigma/d\Omega$ از $d\sigma/dq$ استفاده می‌شود. با استفاده از

$$q^2 = |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2 = k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \theta \quad (18-12-7)$$

و می‌توان نوشت:

$$\frac{d\sigma}{dq} = \frac{2\pi q}{kk'} \frac{d\sigma}{d\Omega} \quad (19-12-7)$$

سطح مقطع غیر کشسانی که به دست آوردیم در بحث قدرت توقف یا همان انرژی‌ای که ذره‌ی باردار در عبور از یک ماده از دست می‌دهد، به کار می‌آید. عده‌ای نظیر اچ.ای. تبه و اف. بلاخ در مورد به دست آوردن کوانتومی قدرت توقف از نقطه نظر سطح مقطع غیر کشسان بحث کردند. ما به انرژی از دست رفته‌ی

ذره‌ی باردار فرودی در هر طول واحد علاقه‌مندیم. نرخ برخورد هر طول واحد برابر با $N\sigma$ است که در آن N تعداد اتم‌ها در هر حجم واحد است. در هر فرآیند برخورد انرژی از دست رفته توسط ذره‌ی باردار برابر با $E_n - E_0$ است. بنابراین dE/dx به صورت زیر است:

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dx} &= N \sum_n (E_n - E_0) \int \frac{d\sigma}{dq} (0 \rightarrow n) dq \\ &= N \sum_n (E_n - E_0) \frac{4Z^2}{a_0^2} \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} \frac{k'}{k} \frac{1}{q^4} \frac{2\pi q}{kk'} |F_n(\mathbf{q})|^2 dq \\ &= \frac{8\pi N}{k^2 a_0^2} \sum_n (E_n - E_0) \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} \left| \langle n | \sum_{i=1}^Z e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} | 0 \rangle \right|^2 \frac{dq}{q^3} \end{aligned} \quad (20-12-7)$$

مقالات زیادی نوشته شده است تا نشان دهند که چطور جمع (۲۰-۱۲-۷) محاسبه می‌شود^۱ با توجه به آن چه گفته شد فرمول کوانتومی بوهر ۱۹۱۳ برای قدرت توقف تصدیق می‌شود:

$$\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi N Z e^4}{m_e v^2} \ln \left(\frac{2m_e v^2}{I} \right) \quad (21-12-7)$$

که در آن I پارامتر نیمه کلاسیکی وابسته به متوسط انرژی برانگیختگی $\langle E_n - E_0 \rangle$ است. اگر ذره‌ی باردار بار الکتریکی $\pm ze$ را داشته باشد، باید Ze^4 را با $z^2 Ze^4$ جایگزین کنیم. باید توجه کنیم که حتی اگر ذره پرتاب شده، الکترون نباشد، جرم m_e که در (۲۱-۱۲-۷) ظاهر می‌شود، جرم ذره‌ی باردار نیست، این جرم هنوز همان جرم الکترون است. بنابراین انرژی تلف شده وابسته به بار و سرعت ذره‌ی پرتاب شده هست، اما از جرم آن مستقل است. این مسأله نقش مهمی را در شناسایی ذرات باردار ایفا می‌کند.

از نظر کوانتومی، انرژی از دست‌رفته‌ی ذره‌ی باردار را به صورت مجموعه‌ای از فرآیندهای پراکندگی غیرکشسان نشان دادیم. در هر برهم کنش بین ذره‌ی باردار و اتم می‌توانیم تصور کنیم که "اندازه‌گیری" روی مکان ذره‌ی باردار انجام می‌شود. ممکن است تعجب کنیم که چرا مسیر ذره در محیط‌هایی نظیر اتاق‌های ابری و امولسیون هسته‌ای تقریباً مستقیم است. دلیل این مسأله آن است که سطح مقطع دیفرانسیلی (۲۱-۱۲-۷) در q کوچک قله‌ی تیری دارد. به همین دلیل در برخوردهای خیلی زیاد جهت نهایی تکانه شبیه به الکترون فرودی است چون q^{-4} و $F_n(\mathbf{q})$ برای q بزرگ به سرعت افت می‌کند.

^۱ برای دیدن یک بحث مقدماتی به کی. گانفرید (۱۹۶۶) و اچ‌ای. بته و آر. دلبیو. جکیو (۱۹۶۸) مراجعه کنید.

عامل فرم هسته‌ای

برای $q \sim 10^9 \text{ cm}^{-1}$ تا $q \sim 10^{10} \text{ cm}^{-1}$ برانگیزش ناشی از پراکندگی غیرکشسان در اتم‌ها اهمیت دارد. اگر q خیلی بزرگ باشد، سهم ناشی از $F_0(\mathbf{q})$ یا $F_n(\mathbf{q})$ به سرعت نزول می‌کند. در q های بی‌نهایت بزرگ، که q از مرتبه‌ی 10^{12} cm^{-1} هسته‌ها $1/R$ ، ساختار اتمی مهم خواهد بود. پتانسیل کولنی ناشی از هسته‌های نقطه‌ای باید جای خود را به پتانسیل کولنی ناشی از یک شیء بسیط بدهد:

$$-\frac{Ze^2}{r} \rightarrow -Ze^2 \int \frac{d^3x' N(r')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \quad (22-12-7)$$

که در آن $N(r)$ توزیعی برای بار هسته‌ای است و به صورت

$$\int d^3x' N(r') = 1 \quad (23-12-7)$$

بهنجار می‌شود. در این صورت هسته‌ی نقطه‌وار، حالت خاصی به صورت

$$N(r') = \delta^{(3)}(r') \quad (24-12-7)$$

خواهد بود. می‌توانیم تبدیل فوریه‌ی سمت راست (22-12-7) را همانند (10-12-7) به شکل زیر حل کنیم:

$$\begin{aligned} Ze^2 \int d^3x \int \frac{d^3x' e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} N(r')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} &= Ze^2 \int d^3x' e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}'} N(r') \int \frac{d^3x e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}}}{r} \\ &= Ze^2 \frac{4\pi}{q^2} F_{\text{هسته‌ای}}(\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (25-12-7)$$

که در آن جابه‌جایی مختصه‌ی $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} + \mathbf{x}'$ را در مرحله‌ی اول انجام داده‌ایم و

$$F_{\text{هسته‌ای}} \equiv \int d^3x e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} N(r) \quad (26-12-7)$$

است. بنابراین انحراف از فرمول رادرفورد را که ناشی از اندازه‌ی محدود هسته‌هاست به دست می‌آوریم:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{رادرفورد}} |F(\mathbf{q})|^2 \quad (27-12-7)$$

که در آن رادرفورد $(d\sigma/d\Omega)$ سطح مقطع دیفرانسیلی پراکندگی الکتریکی الکترونها با هسته‌های نقطه‌وار به بار $Z|e|$ است. برای q کوچک داریم:

$$F_{\text{هسته‌ای}}(\mathbf{q}) = \int d^3x \left(1 + i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x} - \frac{1}{2} q^2 r^2 (\hat{\mathbf{q}} \cdot \hat{\mathbf{r}})^2 + \dots \right) N(r)$$

$$= 1 - \frac{1}{6} q^2 \langle r^2 \rangle_{\text{هسته‌ای}} + \dots \quad (7-12-28)$$

به‌خاطر تقارن کروی، جمله‌ی $\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}$ صفر می‌شود و در جمله‌ی q^2 از این حقیقت استفاده می‌کنیم که میانگین زاویه‌ای $\cos^2 \theta$ (که θ زاویه‌ی بین $\hat{\mathbf{q}}$ و $\hat{\mathbf{r}}$ است) برابر با $\frac{1}{3}$ است:

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} d(\cos \theta) \cos^2 \theta = \frac{1}{3} \quad (7-12-29)$$

کمیت هسته‌ای $\langle r^2 \rangle$ به‌عنوان میانگین مربعی شعاع هسته‌ها محسوب می‌شود. به این ترتیب "اندازه‌گیری" اندازه‌ی هسته‌ها و همچنین پروتون‌ها، همان‌طور که توسط آر. هافستادر و همکارانش انجام شد، میسر می‌شود. در مورد پرتون اثر اسپین (تکانه‌ی مغناطیسی) نیز مهم است.

۱۳.۷ پراکندگی کولنی

این بخش آخر، حتی به‌صورت پیش‌نویس نیز توسط پروفیسور ساکورایی نوشته نشده است، اما به‌عنوان بخشی که مایل بود در مکانیک کوانتومی مدرن آورده شود، درج شده است. پروفیسور توماس فولتون از دانشگاه جان‌هاپکینز متون درسی خود درباره‌ی پراکندگی کولنی را در یادبود پروفیسور ساکورایی، به ما اهدا کرده است. ویراستار صمیمانه از این یاری دوستانه ممنون است. اما خواننده باید دقت کند، چون در این جا تغییراتی در سبک و حتی نمادگذاری نسبت به بقیه‌ی کتاب به‌وجود آمده است.

در ویرایش بازنگری شده، این موضوع تا حدی بازآرایی شده است، نتایج بنیادینی که قبلاً به‌دست آمد هنوز در متن اصلی آمده است در حالی که جزییات ریاضیاتی اینک در پیوست ج. ۱ و ج. ۲ آمده است.

غالب این موضوع، به‌شکل گسترده‌تر در کتاب گاتفرید (گاتفرید ۱۹۶۶، صفحه‌ی ۱۵۳-۱۴۸) آمده است و در این جا از نمادگذاری آن کتاب، استفاده شده است. بررسی موج‌های پاره‌ای کولنی، بحث اصلی است. بحثی که در این جا ارائه می‌شود و در مورد پراکندگی کولنی است با بحث استاندارد (برای مثال بوهم ۱۹۵۱ و شیف ۱۹۶۸ را ببینید) که مستقیماً از شکل‌های مجانبی به‌دست می‌آید متفاوت است. معادله‌ی دیفرانسیل (۷-۱۳-۷) شکل استاندارد است که با جداسازی متغیرها در مختصات سه‌وی نیز به‌دست می‌آید.

می‌توان این معادله را به‌عنوان معادله‌ی دیفرانسیل برای تابع فوق هندسی همشار در نظر گرفت.^۱ و به این ترتیب خصوصیات این تابع (از جمله شکل‌های مجانبی) می‌تواند برای آنالیز این مورد استفاده شود. اما رهیافت متفاوتی که در این جا ارائه می‌شود می‌تواند با بهره‌گیری از تبدیلات لاپلاس و روش‌های متغیرهای مختلط مستقیماً ما را به حد مجانبی برساند. (پیوست، ج. ۱ و ج. ۲ را ببینید). و بنابراین از در نظر گرفتن جزئیات خواص تابع فوق هندسی همشار اجتناب می‌شود. پیداست که این رهیافت ساده‌تر، بدون در نظر گرفتن مطالبی که خارج از حد این کتاب است، فهمیده می‌شود. اما اطلاعاتی را درباره‌ی تابع موج پراکنده شده‌ی اصلی از دست می‌دهد. بنابراین، به‌عنوان مثال، می‌توانیم در مورد عامل گامو^۲ حرفی بزنیم. این عامل برای مطالعه‌ی نرخ بسیاری از برهم کنش‌های هسته‌ای لازم است. بنابراین خوانندگان علاقه‌مند می‌توانند با مطالعه‌ی کتاب‌های دیگر (مثلاً شیف ۱۹۶۸) اطلاعات خود را در این زمینه کامل کنند. این کتاب‌ها رفتار تابع موج کولنی را در مبدأ توسط بسط سری‌های توانی تابع فوق هندسی همشار، بررسی می‌کنند.

جواب‌های پراکندگی برای هامیلتونی برهم کنشی کولنی

با معادله‌ی شرودینگر سه‌بعدی با پتانسیل کولنی

$$V(r) = \frac{-Z_1 Z_2 e^2}{r} \quad (۱-۱۳-۷)$$

شروع می‌کنیم که برای برخورد بین ذرات باردار $Z_1 e$ و $-Z_2 e$ به‌شکل زیر نوشته می‌شود:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \right) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}), \quad E > 0 \quad (۲-۱۳-۷ \text{ الف})$$

یا

$$\left(\nabla^2 + k^2 + \frac{2\gamma k}{r} \right) \psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (۲-۱۳-۷ \text{ ب})$$

که m جرم کاهش یافته‌ی $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ برای ذرات $Z_1 e$ و $-Z_2 e$ است. γk در (۲-۱۳-۷) (ب) با عبارت زیر داده می‌شود:

$$\gamma k = \frac{Z_1 Z_2 e^2 m}{\hbar^2} \quad \text{or} \quad \gamma = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v} = \frac{\alpha Z_1 Z_2 c}{v}, \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137.03608} \quad (۴-۱۳-۷)$$

^۱ برای مثال ای. تی. ویناکر و جی. ان واتسن، "بحنی درباره‌ی آنالیز مدرن" را ببینید.

^۲ Gamow, Z.phys. Vol. 51, no. 2e4 (1928), R.W.Gurney, phys.Rev. vol 33, no. 122 (1929)

دقت کنید که $\gamma > 0$ متناظر با جذب است. تا زمانی که یک میدان کولنی خالص داریم، نوشتن جواب $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ در (۷-۱۳-۲) به شکل

$$\begin{aligned}\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\chi(u) \\ u &= ikr(1 - \cos\theta) = ik(r - z) = ikw \\ \mathbf{k}\cdot\mathbf{r} &= kz\end{aligned}\quad (۷-۱۳-۴)$$

ممکن است. جداسازی متغیرها برای $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ در (۷-۱۳-۴) در شرایطی محتمل است که تشخیص بدهیم اولاً به خاطر تقارن محوری مسأله، جواب شامل زاویه‌ی سمتی ϕ نیست و ثانیاً از آنجا که $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ تابع موج کولنی کاملی (موج فرودی به علاوه‌ی موج پراکنده شده) را ارائه می‌دهد، باید در محدوده‌ی شکل مجانبی $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ و $r^{-1}e^{ikr}$ وجود داشته باشد. به زودی نشان می‌دهیم [معادلات (۷-۱۳-۹ الف) و (۷-۱۳-۱۳) (۷-۱۴-۱۳) را ببینید] که با انتخاب متغیرهای مستقلی، که در آستانه ساخت آن‌ها هستیم، این مسأله اتفاق خواهد افتاد. (دلیل دیگری برای انتخاب ویژه‌ی ما از متغیرها توسط گاتفرید ۱۹۶۶، صفحه‌ی ۱۴۸ ارائه شده است.)

بیاید تا متغیرهای مستقل (z, w, λ) را در نظر بگیریم که $w = r - z$ و λ را می‌توان همان ϕ در نظر گرفت به طوری که جواب $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ به آن وابسته نیست. در تغییر مختصات دکارتی (x, y, z) به (z, w, λ) به عنوان مثال از عباراتی همچون

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial w}{\partial x} \frac{\partial}{\partial w} + \frac{\partial z}{\partial x} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial \lambda}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \lambda} \\ &= \frac{x}{r} \frac{\partial}{\partial w} + \frac{\partial \lambda}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \lambda}\end{aligned}\quad (۷-۱۳-۵)$$

استفاده می‌کنیم. دقت کنید، از آنجا که $e^{ikz}\chi(u)$ مستقل از λ است، عملگر $\partial/\partial\lambda$ سهمی نخواهد داشت. خواننده به سرعت می‌تواند تحقیق که برای عمل روی $e^{ikz}\chi(u)$ داریم:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2}{\partial x^2} &= \frac{x^2}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial w^2} + \left(\frac{1}{r} - \frac{x^2}{r^3}\right) \frac{\partial}{\partial w} \\ \frac{\partial^2}{\partial y^2} &= \frac{y^2}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial w^2} + \left(\frac{1}{r} - \frac{y^2}{r^3}\right) \frac{\partial}{\partial w} \\ \frac{\partial^2}{\partial z^2} &= \frac{w^2}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial w^2} + \left(\frac{w}{r^2} - \frac{w^2}{r^3}\right) \frac{\partial}{\partial w} - \frac{2w}{r} \frac{\partial^2}{\partial z \partial w} + \frac{w}{r^2} \frac{\partial}{\partial w} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\end{aligned}$$

با قرار دادن (۷-۱۳-۷) تا (۶-۱۳-۷) در (۲-۱۳-۷) داریم:

$$\left[u \frac{d^2}{du^2} + (1-u) \frac{d}{du} - i\gamma \right] \chi(u) = 0 \quad (7-13-7)$$

نخستین قدم برای حل (۷-۱۳-۷) بررسی رفتار مجانبی آن، یعنی به دست آوردن جواب‌ها برای $r-z$ بزرگ است (به غیر از جهت رو به جلو، چون برای $\theta=0$ داریم: $(r-z = r(1-\cos\theta)) = 0$). اجازه دهید تا دو نوع جواب $\chi \sim u^\lambda$ و $\chi \sim e^u$ را بیازماییم.

الزام اولین جواب این است که:

$$(-\lambda - i\gamma)u^\lambda = 0, \quad \text{یا} \quad \lambda = -i\gamma \quad (8-13-7)$$

و بنابراین:

$$\chi(u) \sim u^{-i\gamma} \sim e^{-i\gamma \ln k(r-z)} \quad (9-13-7 \text{ الف})$$

$$\psi_k(\mathbf{r}) \sim e^{i[k \cdot \mathbf{r} - \gamma \ln k(r-z)]} \quad (9-13-7 \text{ ب})$$

پیدا است که معادله‌ی (۷-۱۳-۷) ب) قطعه‌ی موج تخت ورودی را نشان می‌دهد. دومین جواب یعنی $\chi \sim e^u$ به‌طور آشکار در $u(d^2\chi/du^2) - u(d\chi/du) = 0$ صدق می‌کند. بنابراین به‌طور غیرمستدل جوابی را از ضرب دو جواب به‌شکل زیر می‌سازیم:

$$\chi(u) \sim u^\lambda e^u \quad (10-13-7)$$

و در (۷-۱۳-۷) جایگذاری می‌کنیم. پیدا است که ضریب $u^{\lambda+1}e^u$ صفر می‌شود در حالی که ضریب جمله‌ی $u^\lambda e^u$ به رابطه‌ی زیر منجر می‌شود:

$$2\lambda + (1 - \lambda) - i\gamma = 0, \quad \text{یا} \quad \lambda = -1 + i\gamma \quad (11-13-7)$$

بنابراین:

$$\chi(u) = \frac{u^{i\gamma} e^u}{u} = \frac{e^{ik(r-z)}}{k(r-z)} e^{i\gamma \ln k(r-z)} \quad (12-13-7)$$

$$\psi(\mathbf{r}) \sim \frac{e^{i[kr + \gamma \ln k(r-z)]}}{r-z} \quad (13-13-7)$$

همان‌طور که پیداست این یک موج کروی بیرون رونده است. با روی هم گذاشتن دو جواب داده شده توسط (۷-۱۳-۹) و (۷-۱۳-۱۳) به‌طور خطی و توجه به این که $r-z=r(1-\cos\theta)=2r\sin^2(\theta/2)$ در حالی که $\ln[2kr\sin^2(\theta/2)]=\ln(2kr)+2\ln\sin(\theta/2)$ تابع موج بهنجار شده را به‌شکل زیر می‌نویسیم:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \xrightarrow{|\mathbf{r}|\rightarrow\infty} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left\{ e^{i[\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\gamma\ln(kr-\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})]} + \frac{f_c(k, \theta)e^{i(kr+\gamma\ln 2kr)}}{r} \right\} \quad (14-13-7)$$

اثرات فاز اضافی در r بزرگ وجود دارد که منجر به برهم کنش کولنی بلند برد می‌شود.

اکنون دامنه‌ی پراکندگی کولنی $f_c(k, \theta)$ را پیدا می‌کنیم. جدا از ضریب γ/k ، دامنه تنها وابسته به $(r-z): (1/2k\sin^2\theta/2)$ است که در شکل مجانبی (۷-۱۳-۱۳) ظاهر می‌شود. اما برای به‌دست آوردن آن باید کار سختی را انجام دهیم! از آن‌جا که جزییات در این‌جا، بحثی کاملاً ریاضیاتی است (پیوست ج. ۱)، بهتر است خواننده برای نخستین بار تنها روی نتیجه‌ی نهایی که در زیر آمده است، تمرکز کند. بنیان فیزیکی این نتایج بعداً در همین فصل مورد بحث قرار می‌گیرد:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \sim \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{i[kz-\gamma\ln k(r-z)]} + \frac{g_1^*(\gamma)}{g_1(\gamma)} \frac{\gamma}{2k\sin^2(\theta/2)} \frac{e^{i[kr+\gamma\ln k(r-z)]}}{r} \right] \quad (15-13-7)$$

این عبارت به‌طور صریح فازهای وابسته به k و r را در بر می‌گیرد و از برابر گرفتن آن با (۷-۱۳-۱۴) به‌دست می‌آید:

$$f_c(k, \theta) = \frac{\gamma e^{i[\theta(\gamma)+2\gamma\ln\sin(\theta/2)]}}{2k\sin^2(\theta/2)}$$

$$e^{i\theta(\gamma)} = \frac{g_1^*(\gamma)}{g_1(\gamma)} \quad (16-13-7)$$

در نتیجه بنابر (۷-۱-۳۶)، سطح مقطع دیفرانسیلی برابر است با:

$$\frac{d\sigma_c(k, \theta)}{d\Omega} = |f_c(k, \theta)|^2 = \frac{\gamma^2}{4k^2\sin^4(\theta/2)} \quad (17-13-7)$$

که در آن γ با (۷-۱۳-۳) داده شده است و به فرمول رادرفورد (۷-۲-۱۱) بازخواهیم گشت. فرمول هنکل را به خواننده یادآوری می‌کنیم:

$$\int_{C_1} e^s s^{-z} ds = \frac{2\pi i}{\Gamma(z)} \quad (18-13-7)$$

(که می‌توان آن را برای $z = 1$ و $\Gamma(1) = 0! = 1$ آزمود). بنابراین:

$$g_1(\gamma) = \frac{1}{\Gamma(1 - i\gamma)}, \quad e^{i\theta(\gamma)} = \frac{\Gamma(1 - i\gamma)}{\Gamma(1 + i\gamma)} \quad (۱۹-۱۳-۷)$$

آنالیز موج پاره‌ای برای مورد کولنی

می‌توان $\psi(\mathbf{r})$ را از (۴-۱۳-۷) و (۵-۱-۵) به صورت زیر نوشت:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \chi(u) \\ &= A e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \int_C e^{ut} t^{i\gamma-1} (1-t)^{-i\gamma} dt \end{aligned} \quad (۲۰-۱۳-۷)$$

$$= A \int_C e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} e^{ik(r-z)t} (1-t) d(t, \gamma) dt$$

$$= A \int_C e^{ikrt} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}(1-t)} (1-t) d(t, \gamma) dt$$

که در آن داریم:

$$d(t, \gamma) = t^{i\gamma-1} (1-t)^{-i\gamma-1} \quad (۲۱-۱۳-۷)$$

بسط موج پاره‌ای موج تخت، همانند (۷-۵-۱۸) به شکل زیر است:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l P_l(\cos \theta) A_l(kr) \quad (۲۲-۱۳-۷)$$

که در آن داریم:

$$A_l(kr) = A \int_C e^{ikrt} j_l[kr(1-t)] (1-t) d(t, \gamma) dt \quad (۲۳-۱۳-۷)$$

حال، $j_l = \frac{1}{2}(h_l^{(1)} + h_l^{(1)*})$ است که در آن تابع هنکل کرووی است (پیوست الف و کتاب ویتاگر

و واتسن ۱۹۳۵ را ببینید). $h_l(\rho) = E_l(\rho) e^{i\rho} / \rho$.

l	0	1	2
$E_l(\rho)$	$-i$	$-\left(1 + \frac{i}{\rho}\right)$	$i\left(1 + \frac{3i}{\rho} - \frac{3}{\rho^2}\right)$

(۲۴-۱۳-۷)

و به طور مجانبی $E_l(\rho) = (-i)^{l+1} + 0(\rho^{-1})$ است. بنابراین می‌نویسیم:

$$A_l(kr) = A_l^{(1)}(kr) + A_l^{(2)}(kr) \quad (۲۵-۱۳-۷)$$

که در آن $A_l^{(1)}$ و $A_l^{(2)}$ به ترتیب متناظر با h_l و h_l^* هستند.

محاسبه‌ی صریح $A_l^{(1)}(kr)$ و $A_l^{(2)}(kr)$ در پیوست ج-۲ آورده شده است و منجر به نتایج زیر می‌شود:

$$A_l^{(1)}(kr) = 0 \quad (۲۶-۱۳-۷)$$

و

$$A_l^{(2)}(kr) \approx -\frac{Ae^{\pi\gamma/2}}{2ikr} [2\pi ig_1(\gamma)] \\ \times \{e^{-i[kr-(l\pi/2)+\gamma \ln 2kr]} - e^{2i\eta_l(k)} e^{i[kr-(l\pi/2)+\gamma \ln 2kr]}\} \quad (۲۷-۱۳-۷)$$

که در آن به‌طور خوشبینانه‌ای فاز حقیقی $\eta_l(k)$ را به‌شکل

$$e^{2i\eta_l(k)} = \frac{g_3(\gamma)}{g_1(\gamma)} = \Gamma(1 - i\gamma)g_3(\gamma) \quad (۲۸-۱۳-۷)$$

در نظر گرفته‌ایم. دقت کنید به این علت $\eta_l(k)$ نوشتیم که γ وابسته به k است [۳-۱۳-۷] را ببینید.]

بیاید تا به‌طور خلاصه به چند مثال ساده بنگریم که مشخص می‌کنند $\eta_l(k)$ در حقیقت یک فاز حقیقی است. برای $l=0$:

$$E_0^* = i, \quad 2\pi ig_3(\gamma) = \int_{C_1} e^s s^{-i\gamma-1} ds = 2\pi ig_1^*(\gamma) = \frac{2\pi i}{\Gamma(1 + i\gamma)}$$

$$e^{2i\eta_0} = \frac{\Gamma(1 - i\gamma)}{\Gamma(1 + i\gamma)}$$

(۲۹-۱۳-۷)

برای $l=1$ داریم:

$$E_1^*(\rho) = -\left(1 - \frac{i}{\rho}\right), \quad E_1^*\left(\frac{-s}{2i}\right) = -\left(1 - \frac{i}{-s/2i}\right) = -\left(1 - \frac{2}{s}\right)$$

$$2\pi ig_3(\gamma) = -\int_{C_1} e^s s^{-i\gamma-1} \left(1 - \frac{2}{s}\right) ds = -2\pi i \left[\frac{1}{\Gamma(1 + i\gamma)} - \frac{2}{\Gamma(2 + i\gamma)} \right]$$

$$= \frac{-2\pi i}{\Gamma(2 + i\gamma)} [(1 + i\gamma) - 2] = \frac{2\pi i(1 - i\gamma)}{\Gamma(2 + i\gamma)}$$

$$e^{2i\eta_1} = \frac{g_3(\gamma)}{g_1(\gamma)} = \frac{(1 - i\gamma)\Gamma(1 - i\gamma)}{\Gamma(2 + i\gamma)} = \frac{\Gamma(2 - i\gamma)}{\Gamma(2 + i\gamma)}$$

(۳۰-۱۳-۷)

برای $l = 2, 3, \dots$ الگوهای یکسانی تکرار می‌شود بنابراین برای l در حالت کلی داریم:

$$e^{2im_l} = \frac{\Gamma(1 + l - iy)}{\Gamma(1 + l + iy)} \quad (۳۱-۱۳-۷)$$

به‌عنوان خلاصه‌ی نهایی، خاطر نشان می‌کنیم که تفاوت مورد پراکندگی موج پاره‌ای کولنی با مورد موج پاره‌ای کلی (بخش ۷-۶ را ببینید) تنها در اصلاحات زیر است:

$$-\frac{1}{2} h_l^{(1)}(kr) \cong -\frac{e^{i(kr - (l\pi/2))}}{2ikr} \rightarrow -\frac{e^{i(kr - (l\pi/2) + \gamma \ln 2kr)}}{2ikr}$$

$$e^{2i\delta_l} \rightarrow e^{2im_l} = \frac{\Gamma(1 + l - iy)}{\Gamma(1 + l + iy)} \quad (۳۲-۱۳-۷)$$

بگذارید به‌شکل مجانبی تابع موج پراکندگی کولنی، معادله‌ی (۱۵-۱۳-۷)، توجه کنیم که از آن‌چه در معادله‌ی (۳۳-۱-۷) ظاهر می‌شود متفاوت است (۳۳-۱-۷) برای r های بزرگ

$$\psi \rightarrow e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (۳۳-۱۳-۷)$$

است. شکل اخیر تنها برای نیروهای کوتاه برد معتبر است، در حالی که نیروی کولنی یک نیروی بلند برد است. شکل (۳۳-۱-۷) باید به طریق زیر برای برهم کنشی کولنی تصحیح شود: اولین جمله در سمت راست (۱۵-۱۳-۷) نه تنها شامل e^{ikz} (همانند (۳۳-۱۳-۷) است، بلکه باید به‌طور وابسته به مختصات در عامل فاز $e^{-iy \ln k(r-z)}$ نیز ضرب شود. بنابراین تابع موج فرودی کمی مختل می‌شود، این مسأله جدا از این است که ذره چقدر از مبدأ دور باشد. به‌طور مشابه، دومین جمله در سمت راست (۱۵-۱۳-۷)، متناظر با موج کروی بیرون رونده، شامل عامل فاز وابسته به r ، یعنی $e^{iy \ln 2kr}$ است. جدا از این اثرات بلند برد که منجر به عامل‌های فازی می‌شود که با فاصله تغییر می‌کند، هنوز می‌توانیم یک سطح مقطع پراکندگی برای نیروهای کوتاه برد پیدا کنیم چون جملات مختل‌کننده، اگرچه کمیت‌های مشاهده‌پذیر فیزیکی را تغییر می‌دهند (مثل میانگین جریان)، منجر به دگرگونی‌هایی می‌شوند که به‌ازای r به‌سمت بی‌نهایت، صفر می‌گردند.

مسائل

۱- فرمول بندی لیمن- شوینگر را می توان بر مسأله ی یک بعدی عبور- بازتاب با گستره ی پتانسیل محدود، $V(x) \neq 0$ برای $0 < |x| < a$ اعمال کرد.

الف) فرض کنید که یک موج فرودی داریم که از سمت چپ می آید: $\langle x|\phi\rangle = e^{ikx}/\sqrt{2\pi}$. اگر بخواهیم تنها برای $x > a$ یک موج عبوری و برای $x < -a$ یک موج بازتابی و موج اصلی را داشته باشیم، علمگر تکینه ی $1/(E - H_0)$ را چگونه باید به کار ببریم؟ عبارتی برای تابع گرین مناسب به دست آورید و یک معادله ی انتگرالی برای $\langle x|\psi^{(+)}\rangle$ بنویسید.

ب) در حالت خاص یک پتانسیل جاذب تابع δ را در نظر بگیرید:

$$V = -\left(\frac{\gamma\hbar^2}{2m}\right)\delta(x) \quad (\gamma > 0)$$

برای به دست آوردن دامنه های گذار و بازتاب، معادله ی انتگرالی را حل کنید.

صحت نتایج خود را با گاتفرید ۱۹۶۶، صفحه ی ۵۲ بسنجید.

ج) پتانسیل تابع دلتای یک بعدی با $\gamma > 0$ برای هر مقدار γ یک (و تنها یک) حالت مقید دارد. نشان دهید وقتی که k به عنوان یک متغیر مختلط در نظر گرفته شود، دامنه های بازتاب و عبوری که محاسبه کرده اید قطب های حالت مقید را در مکان های مورد انتظار دارند.

۲- به دو روش زیر نشان دهید که:

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{m^2}{\pi\hbar^4} \int d^3x \int d^3x' V(r)V(r') \frac{\sin^2 k|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}{k^2|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^2}$$

الف) با استفاده از انتگرال گیری از سطح مقطع دیفرانسیلی محاسبه شده از طریق تقریب مرتبه اول بورن.

ب) با اعمال قضیه ی اپتیکی دامنه ی پراکندگی جلوسو در تقریب مرتبه دوم بورن (دقت کنید که $f(0)$ در صورتی حقیقی است که تقریب مرتبه اول بورن به کار برده شود).

۳- پتانسیل

$$V = 0 \text{ برای } r > R, \quad V = V_0 = \text{ثابت} \text{ برای } r < R$$

را در نظر بگیرید که V_0 می تواند مثبت یا منفی باشد. با استفاده از روش موج های پاره ای، نشان دهید که برای $|V_0| \ll E = \hbar^2 k^2 / 2m$ و $kR \ll 1$ ، سطح مقطع دیفرانسیلی همسانگرد است و سطح مقطع کل با رابطه ی

$$\sigma_{\text{tot}} = \left(\frac{16\pi}{9} \right) \frac{m^2 V_0^2 R^6}{\hbar^4}$$

داده می شود. فرض کنید که انرژی کمی بالا می رود. نشان دهید که در نتیجه می توان توزیع زاویه ای را به شکل

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = A + B \cos \theta$$

نوشت. یک عبارت تقریبی برای B/A به دست آورید.

۴- یک ذره ی بدون اسپین با پتانسیل یوکاوا

$$V = \frac{V_0 e^{-\mu r}}{\mu r}$$

پراکنده می شود که $\mu > 0$ است اما V_0 می تواند مثبت و یا منفی باشد. در متن نشان داده شده است که دامنه ی مرتبه اول بورن با

$$f^{(1)}(\theta) = - \frac{2mV_0}{\hbar^2 \mu} \frac{1}{[2k^2(1 - \cos \theta) + \mu^2]}$$

داده می شود.

الف) با استفاده از $f^{(1)}(\theta)$ و فرض گرفتن $|\delta_l| \ll 1$ ، یک عبارت تقریبی برای δ_l برحسب تابع لژاندر نوع دوم

$$Q_l(\xi) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{P_l(\xi')}{\xi - \xi'} d\xi'$$

بنویسید.

(ب) با استفاده از فرمول بسط

$$Q_l(\xi) = \frac{l!}{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2l+1)} \\ \times \left\{ \frac{1}{\xi^{l+1}} + \frac{(l+1)(l+2)}{2(2l+3)} \frac{1}{\xi^{l+3}} \right. \\ \left. + \frac{(l+1)(l+2)(l+3)(l+4)}{2 \cdot 4 \cdot (2l+3)(2l+5)} \frac{1}{\xi^{l+5}} + \cdots \right\} \quad (|\xi| > 1)$$

فرض‌های زیر را ثابت کنید:

(i) وقتی که پتانسیل دافع (یا جاذب) است، δ_l منفی (یا مثبت) است.

(ii) وقتی که طول موج دوبروی بسیار بلندتر از گستره‌ی پتانسیل است، δ_l متناسب با k^{2l+1} است.

ثابت این تناسب را پیدا کنید.

۵- برای حالت پایه‌ی ذره‌ای که در داخل یک کره‌ی سخت: $x = p_x$ ، $V = \infty$ برای $r > a$ و $V = 0$ برای $r < a$ ، محسوس است، رابطه‌ی عدم قطعیت را به شکل صریح بیابید. (راهنمایی: از مزیت تقارن کروی سود ببرید).

۶- پراکندگی ذره‌ای را با کره‌ی نفوذناپذیر

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{برای } r > a \\ \infty & \text{برای } r < a \end{cases}$$

در نظر بگیرید.

الف) عبارتی برای انتقال فاز موج s ($l=0$) به دست آورید. (برای این مسأله‌ی ساده به جزییات خواص تابع بسل کروی نیاز ندارید!)

ب) سطح مقطع کل $\sigma = \int (d\sigma/d\Omega) d\Omega$ در حد انرژی‌های پایین $k \rightarrow 0$ کدام است؟ جواب خود را با سطح مقطع هندسی πa^2 مقایسه کنید. بدون اثبات می‌توانید فرض کنید که:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 \\ f(\theta) = \left(\frac{1}{k} \right) \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta)$$

۷- با استفاده از $\delta_l = \Delta(b)|_{b=l/k}$ جابه‌جایی فاز δ_l را برای پراکندگی در انرژی‌های بالا توسط الف) پتانسیل گاوسی، $V = V_0 \exp(-r^2/a^2)$ و ب) پتانسیل یوکاوا $V = V_0 \exp(-\mu r)/\mu r$ بیابید. این فرض را که برای $l \gg kR$ با افزایش l (k ثابت)، δ_l به سرعت به سمت صفر می‌رود، تحقیق کنید.

R گستره‌ی پتانسیل است. [فرمول $\Delta(b)$ در (۷-۴-۱۴) داده شده است].

۸- الف) اثبات کنید که:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \langle \mathbf{x} | \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} | \mathbf{x}' \rangle = -ik \sum_l \sum_m Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}) Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{r}}') j_l(kr_<) h_l^{(1)}(kr_>)$$

که در آن $r_<$ (یا $r_>$) نشان‌دهنده‌ی کوچک‌تر (یا بزرگ‌تر) بین r و r' است.

ب) برای پتانسیل‌های متقارن، معادله‌ی لیمن-شونگر را می‌توان برای موج‌های کروی نوشت:

$$|Elm(+)\rangle = |Elm\rangle + \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V |Elm(+)\rangle$$

با استفاده از قسمت الف)، نشان دهید که این معادله، که در نمایش \mathbf{x} نوشته شده است، به معادله‌ای برای تابع شعاعی، $A_l(k; r)$ می‌انجامد که به شکل زیر است:

$$A_l(k; r) = j_l(kr) - \frac{2mik}{\hbar^2} \times \int_0^\infty j_l(kr_<) h_l^{(1)}(kr_>) V(r') A_l(k; r') r'^2 dr'$$

همچنین با گرفتن r خیلی بزرگ، به دست می‌آوریم:

$$f_l(k) = e^{i\delta_l} \frac{\sin \delta_l}{k} = - \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) \int_0^\infty j_l(kr) A_l(k; r) V(r) r^2 dr$$

۹- پراکندگی از یک پتانسیل پوسته‌ی δ دافع به شکل

$$\left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) V(r) = \gamma \delta(r - R), \quad (\gamma > 0)$$

را در نظر بگیرید.

الف) معادله‌ای بنویسید که جابه‌جایی فاز موج s ، δ_0 را به شکل تابعی از k مشخص کند $(E = \hbar^2 k^2 / 2m)$.

ب) حال فرض کنید که γ خیلی بزرگ است

$$(E = \hbar^2 k^2 / 2m)$$

نشان دهید که اگر kR نزدیک به صفر نباشد، جابه‌جایی فاز موج δ نظیر نتیجه‌ی کوهی سخت است که در متن مورد بحث قرار گرفت. همچنین نشان دهید که برای $\tan kR$ نزدیک به (و دقیقاً برابر با) صفر، رفتار تشدیدی مثبت است. یعنی $\cot \delta_0$ وقتی که k افزایش می‌یابد، از سمت مثبت به صفر میل می‌کند. به‌طور تقریبی مکان تشدیدها را تا مرتبه‌ی $1/\gamma$ معین کنید. نتایج خود را با حالتی که یک ذره در داخل دیواره‌های کروی به شعاع

$$V = 0, \quad r < R; \quad V = \infty, \quad r > R$$

محبوس است مقایسه کنید. همچنین یک عبارت تقریبی برای پهنای تشدید Γ که با

$$\Gamma = \frac{-2}{[d(\cot \delta_0)/dE]|_{E=E_r}}$$

تعریف می‌شود، به‌دست آورید. توجه کنید، در حالت خاصی که γ بزرگ می‌شود، تشدید بی‌نهایت تیز می‌شود. (توجه: برای دیدن یک رهیافت متفاوت و خوش‌پرداخت‌تر در این مسأله کتاب گاتفرید ۱۹۶۶ صفحات ۱۴۱-۱۳۱ را ببینید که در مورد خواص تحلیلی تابع D_l که با $A_l = j_l/D_l$ تعریف می‌شود، بحث می‌کند.)

۱۰- ذره‌ی بدون اسپینی با پتانسیل وابسته به زمان

$$\mathcal{V}(\mathbf{r}, t) = V(\mathbf{r}) \cos \omega t$$

پراکنده می‌شود. نشان دهید که اگر پتانسیل تا مرتبه‌ی اول دامنه‌ی گذار در نظر گرفته شود، انرژی ذره‌ی پراکنده شده به‌اندازه‌ی $\hbar\omega$ افزایش یا کاهش می‌یابد. $d\sigma/d\Omega$ را به‌دست آورید. به‌طور کمی بحث کنید که اگر جملات مرتبه بالاتر را به حساب بیاوریم. چه اتفاقی می‌افتد؟

۱۱- نشان دهید که سطح مقطع دیفرانسیلی برای پراکندگی کشسان یک الکترون سریع به‌وسیله‌ی حالت پایه‌ی اتم هیدورژن با عبارت

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{4m^2 e^4}{\hbar^4 q^4} \right) \left\{ 1 - \frac{16}{[4 + (qa_0)^2]^2} \right\}^2$$

وارد می‌شود. (اثر همسانی را نادیده بگیرید.)

۱۲- انرژی یک ذره‌ی متحرک در یک میدان مرکزی را $E(J_1, J_2, J_3)$ در نظر بگیرید که (J_1, J_2, J_3) در این جا سه متغیرهای کنش هستند. شکل تابع E در حالت خاص پتانسیل کولنی چگونه است؟ با استفاده از روش زاویه-کنش، تبهگنی میدان مرکزی و مسأله‌ی کولنی را با هم مقایسه کنید و آن را به بردار \mathbf{A} ارتباط دهید.

اگر هامیلتونی برابر با

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + V(r) + F(\mathbf{A}^2)$$

باشد، چه تغییری در نتایج به وجود می‌آید؟

تبهگنی‌های متناظر با میدان مرکزی و مسأله‌های کولنی در نظریه‌ی کوانتومی را با اعداد کوانتومی معمولی (n, l, m) با هم مقایسه کنید و همچنین این مقایسه را به وسیله‌ی اعداد کوانتومی (k, m, n) نیز انجام دهید. در این جا مجموعه‌ی دوم یعنی (k, m, n) ، بر حسب‌های تابع موج $\mathcal{D}_{mn}^k(\alpha\beta\gamma)$ هستند.

توابع موج $\mathcal{D}_{mn}^k(\alpha\beta\gamma)$ به چه شکلی با توابع لاگور بر حسب هماهنگ‌های کروی وابسته هستند؟

پیوست‌ها

پیوست الف

خلاصه‌ای از جواب‌های مقدماتی معادله‌ی موج شرودینگر

در این‌جا به‌طور خلاصه به روش‌های حل ساده، برای معادله‌های موج شرودینگری که پتانسیل‌های قابل حل دارند می‌پردازیم.

الف ۱- ذرات آزاد ($V=0$)

موج تخت، یا ویژه توابع تکانه به شکل:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - i\omega t} \quad (\text{الف ۱-۱})$$

هستند، که در آن:

$$\mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}, \quad \omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar \mathbf{k}^2}{2m} \quad (\text{الف ۱-۲})$$

است و بهنجارش به شکل

$$\int \psi_{\mathbf{k}'}^* \psi_{\mathbf{k}} d^3x = \delta^{(3)}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (\text{الف ۱-۳})$$

است. برهم‌نهی امواج خطی به توصیف بسته موجی می‌انجامد. در حالت یک‌بعدی داریم:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk A(k) e^{i(kx - \omega t)} \quad \left(\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \right) \quad (\text{الف ۱-۴})$$

برای $|A(k)|$ در نزدیکی $k = k_0$ قله‌ی تیزی وجود دارد. بسته موج با سرعت گروه

$$v_g = \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} = \frac{\hbar k_0}{m} \quad (\text{الف ۵-۱})$$

حرکت می‌کند. تحول زمانی یک کمینه‌ی بسته موج با رابطه‌ی

$$\psi(x, t) = \left[\frac{(\Delta x)_0^2}{2\pi^3} \right]^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\Delta x)_0^2 (k-k_0)^2 + ikx - i\omega(k)t} dk, \quad \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (\text{الف ۶-۱})$$

توصیف می‌شود، که در آن:

$$|\psi(x, t)|^2 = \left\{ \frac{1}{2\pi(\Delta x)_0^2 [1 + (\hbar^2 t^2 / 4m^2)(\Delta x)_0^{-4}]} \right\}^{1/2} \times \exp \left\{ -\frac{(x - \hbar k_0 t / m)^2}{2(\Delta x)_0^2 [1 + (\hbar^2 t^2 / 4m^2)(\Delta x)_0^{-4}]} \right\} \quad (\text{الف ۷-۱})$$

بنابراین عرض بسته موج به شکل زیر گسترش می‌یابد:

$$(\Delta x)_0 \quad \text{at } t = 0 \rightarrow (\Delta x)_0 \left[1 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2} (\Delta x)_0^{-4} \right]^{1/2} \quad \text{at } t > 0 \quad (\text{الف ۸-۱})$$

الف ۲- پتانسیل‌های قطعه‌ای ثابت در یک بعد

جواب‌های اصلی عبارتند از:

$$E > V = V_0: \quad \psi_E(x) = c_+ e^{ikx} + c_- e^{-ikx}, \quad k = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} \quad (\text{الف ۱-۲})$$

$E < V = V_0$ (منطقه‌ی ممنوع کلاسیکی)

$$\psi_E(x) = c_+ e^{\kappa x} + c_- e^{-\kappa x}, \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad (\text{الف ۲-۲})$$

(اگر $x = \pm \infty$ در محدوده‌ی مورد بحث قرار گیرد، c_{\pm} باید برابر با صفر گردد).

پتانسیل دیوار صلب (جعبه‌ی یک‌بعدی)

در این جا پتانسیل عبارت است از:

$$V = \begin{cases} 0 & \text{برای } 0 < x < L, \\ \infty & \text{سایر جاها} \end{cases} \quad (\text{الف ۲-۳})$$

تابع موج و ویژه حالت‌های انرژی برابرند با:

$$\psi_E(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$E = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL^2} \quad (\text{الف ۲-۴})$$

پتانسیل چاه مربعی

پتانسیل V برابر است با:

$$V = \begin{cases} 0 & \text{برای } |x| > a \\ -V_0 & \text{برای } |x| < a \quad (V_0 > 0) \end{cases} \quad (\text{الف ۲-۵})$$

جواب حالت مقید ($E < 0$) عبارت است از:

$$\psi_E \sim \begin{cases} e^{-\kappa|x|} & \text{برای } |x| > a, \\ \left. \begin{array}{l} \cos kx \\ \sin kx \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{(پاریمته‌ی زوج)} \\ \text{(پاریمته‌ی فرد)} \end{array} & \text{برای } |x| < a, \end{cases} \quad (\text{الف ۲-۶})$$

که در آن

$$k = \sqrt{\frac{2m(-|E| + V_0)}{\hbar^2}}, \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} \quad (\text{الف ۲-۷})$$

است. مقادیر مجاز انرژی $E = -\hbar^2\kappa^2/2m$ با حل روابط زیر به دست می‌آیند:

$$\begin{aligned} ka \tan ka &= \kappa a && \text{(پارتهی زوج)} \\ ka \cot ka &= -\kappa a && \text{(پارتهی فرد)} \end{aligned} \quad \text{(الف ۲-۸)}$$

همچنین توجه کنید که κ و k با رابطه‌ی زیر به هم مربوط هستند:

$$\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} = (k^2 + \kappa^2)a^2 \quad \text{(الف ۲-۹)}$$

الف ۳- مسأله‌های عبور و بازتاب

در این بحث، ضریب گذار T را تعریف می‌کنیم، که برابر با نسبت شار موج گذر کرده به کل موج فرودی است. این مثال‌های ساده را در نظر می‌گیریم:

چاه مربعی ($V = 0$ برای $|x| > a$, $V = -V_0$ برای $|x| < a$.)

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{\left\{1 + \left[\frac{(k'^2 - k^2)^2}{4k^2k'^2}\right] \sin^2 2k'a\right\}} \\ &= \frac{1}{\left\{1 + \left[V_0^2/4E(E + V_0)\right] \sin^2\left(2a\sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar\right)\right\}} \end{aligned} \quad \text{(الف ۳-۱)}$$

که در آن:

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad k' = \sqrt{\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}} \quad \text{(الف ۳-۲)}$$

است. دقت کنید، تشدید زمانی رخ می‌دهد که داشته باشیم:

$$2a\sqrt{\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}} = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad \text{(الف ۳-۳)}$$

سد پتانسیل ($V = 0$ برای $|x| > a$, $V = V_0 > 0$ برای $|x| < a$.)

مورد ۱: $E < V_0$

$$T = \frac{1}{\left\{ 1 + \left[(k^2 + \kappa^2)^2 / 4k^2\kappa^2 \right] \sinh^2 2\kappa a \right\}}$$

$$= \frac{1}{\left\{ 1 + \left[V_0^2 / 4E(V_0 - E) \right] \sinh^2 \left(2a\sqrt{2m(V_0 - E)} / \hbar \right) \right\}} \quad (\text{الف ۴-۳})$$

مورد ۲: $E > V_0$. این مورد، شبیه به مورد چاه مربعی است، با این تفاوت که به جای $-V_0$ باید V_0 قرار گیرد.

پله پتانسیل ($E > V_0$ ، و $V = 0$ برای $x < 0$ ، $V = V_0$ برای $x > 0$.)

$$T = \frac{4kk'}{(k + k')^2} = \frac{4\sqrt{(E - V_0)E}}{(\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0})^2} \quad (\text{الف ۵-۳})$$

با

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad k' = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} \quad (\text{الف ۶-۳})$$

سد پتانسیل کلی تر $[a, b]$ $V(x) > E$ برای $a < x < b$ ، $V(x) < E$ بیرون از محدوده $[a, b]$

جواب تقریبی JWKB برای T عبارت است از:

$$T \approx \exp \left\{ -2 \int_a^b dx \sqrt{\frac{2m[V(x) - E]}{\hbar^2}} \right\} \quad (\text{الف ۷-۳})$$

که در آن a و b نقاط بازگشت کلاسیکی هستند.

الف ۴- نوسان گر هماهنگ ساده

در این جا پتانسیل برابر است با:

$$V(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad (\text{الف ۴-۱})$$

و یک متغیر بدون بُعد را معرفی می کنیم:

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad (\text{الف ۴-۲})$$

ویژه تابع انرژی برابر است با:

$$\psi_E = (2^n n!)^{-1/2} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) \quad (\text{الف ۴-۳})$$

و ترازهای انرژی برابرند با:

$$E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{الف ۴-۴})$$

چند جمله‌ای‌های هرمیت دارای خواص زیر هستند:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} e^{-\xi^2}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi) H_m(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = \pi^{1/2} 2^n n! \delta_{nm}$$

$$\frac{d^2}{d\xi^2} H_n - 2\xi \frac{dH_n}{d\xi} + 2nH_n = 0$$

$$H_0(\xi) = 1, \quad H_1(\xi) = 2\xi$$

$$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2, \quad H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi$$

$$H_4(\xi) = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12 \quad (\text{الف ۴-۵})$$

الف ۵- مسئله‌های نیروی مرکزی [پتانسیل متقارن کروی $V = V(r)$]

در این جا معادله‌ی دیفرانسیل اساسی عبارت است از:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi_E}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi_E}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi_E}{\partial \phi^2} \right] + V(r) \psi_E = E \psi_E \quad (\text{الف ۵-۱})$$

که در آن پتانسیل متقارن کروی $V(r)$ در رابطه‌ی

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^2 V(r) \rightarrow 0 \quad (\text{الف ۵-۲})$$

صدق می‌کند. روش جداسازی متغیرها

$$\Psi_E(\mathbf{x}) = R(\hat{x}) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (\text{الف ۵-۳})$$

اجازه می‌دهد تا معادله‌ی زاویه‌ای به شکل زیر نوشته شود:

$$-\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] Y_l^m = l(l+1) Y_l^m \quad (\text{الف ۵-۴})$$

که در آن هماهنگ‌های کروی

$$Y_l^m(\theta, \phi), \quad l = 0, 1, 2, \dots, m = -l, -l+1, \dots, +l \quad (\text{الف ۵-۵})$$

در رابطه‌ی

$$-i \frac{\partial}{\partial \phi} Y_l^m = m Y_l^m \quad (\text{الف ۵-۶})$$

صدق می کنند و $Y_l^m(\theta, \phi)$ دارای خواص زیر است:

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}$$

برای $m \geq 0$

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^{|m|} Y_l^{|m|*}(\theta, \phi) \text{ برای } m < 0,$$

$$P_l^m(\cos \theta) = (1 - \cos^2 \theta)^{m/2} \frac{d^m}{d(\cos \theta)^m} P_l(\cos \theta) \text{ برای } m \geq 0.$$

$$P_l(\cos \theta) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \frac{d^l (1 - \cos^2 \theta)^l}{d(\cos \theta)^l}$$

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

$$Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (\sin \theta) e^{\pm i\phi}$$

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

$$Y_2^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} (\sin \theta \cos \theta) e^{\pm i\phi}$$

$$Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} (\sin^2 \theta) e^{\pm 2i\phi}$$

$$\int Y_l^{m*}(\theta, \phi) Y_l^m(\theta, \phi) d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \left[\int d\Omega = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{+1} d(\cos \theta) \right]$$

(الف ۷-۵)

بگذارید تا برای قسمت شعاعی (الف ۵-۳)، تعریف زیر را انجام دهیم:

$$u_E(r) = rR(r) \quad (\text{الف ۸-۵})$$

آنگاه معادله شعاعی به یک مساله ی معادل یک بعدی به صورت

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_E}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] u_E = E u_E$$

کاهش می یابد. داریم:

$$u_E(r)|_{r=0} = 0 \quad (\text{الف ۹-۵})$$

برای مورد ذره‌ی آزاد $[V(r) = 0]$ در مختصات کروی، داریم:

$$R(r) = c_1 j_l(\rho) + c_2 n_l(\rho) \quad (\text{الف ۵-۱۰}) \quad (c_2 = 0, \text{ اگر مبدأ به حساب آید.})$$

که در آن ρ یک متغیر بدون بُعد است:

$$\rho \equiv kr, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (\text{الف ۵-۱۱})$$

باید آن دسته از خصوصیت‌های توابع بسل و بسل کروی و توابع هنکل را که بیشتر مورد استفاده قرار می‌گیرند، عنوان کنیم. توابع بسل کروی عبارتند از:

$$\begin{aligned} j_l(\rho) &= \left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{1/2} J_{l+1/2}(\rho), \\ n_l(\rho) &= (-1)^{l+1} \left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{1/2} J_{-l-1/2}(\rho), \\ j_0(\rho) &= \frac{\sin \rho}{\rho}, & n_0(\rho) &= -\frac{\cos \rho}{\rho}, \\ j_1(\rho) &= \frac{\sin \rho}{\rho^2} - \frac{\cos \rho}{\rho}, & n_1(\rho) &= -\frac{\cos \rho}{\rho^2} - \frac{\sin \rho}{\rho}, \\ j_2(\rho) &= \left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho}\right) \sin \rho - \frac{3}{\rho^2} \cos \rho, \\ n_2(\rho) &= -\left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho}\right) \cos \rho - \frac{3}{\rho^2} \sin \rho. \end{aligned} \quad (\text{الف ۵-۱۲})$$

برای $\rho \rightarrow 0$ جمله‌ی به دست آمده عبارت است از:

$$j_l(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} \frac{\rho^l}{(2l+1)!!}, \quad n_l(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} -\frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+1}} \quad (\text{الف ۵-۱۳})$$

که در آن

$$(2l+1)!! \equiv (2l+1)(2l-1) \cdots 5 \cdot 3 \cdot 1 \quad (\text{الف ۵-۱۴})$$

است. در حد مجانبی ρ بزرگ، داریم:

$$\begin{aligned} j_l(\rho) &\xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \frac{1}{\rho} \cos \left[\rho - \frac{(l+1)\pi}{2} \right] \\ n_l(\rho) &\xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \frac{1}{\rho} \sin \left[\rho - \frac{(l+1)\pi}{2} \right] \end{aligned} \quad (\text{الف ۵-۱۵})$$

به خاطر قیدهای (الف ۵-۸) و (الف ۵-۹)، $R(r)$ باید در $r = 0$ کراندار باشد. از (الف ۵-۱۰) و (الف ۵-۱۳) درمی یابیم که جمله‌ی $n_l(\rho)$ باید حذف شود. چون این جمله به ازای $\rho \rightarrow 0$ رفتار تکیه دارد. بنابراین $R(r) = c_l j_l(\rho)$ (یا بر حسب نمادگذاری فصل ۷، بخش ۷-۶: $R(r) = A_l(r)$). برای چاه پتانسیل مربعی سه بعدی؛ $V = -V_0$ برای $r < R$ (با $V_0 > 0$)، جواب دلخواه عبارت است از:

$$R(r) = A_l(r) = \text{ثابت} \quad j_l(\alpha r) \quad (\text{الف ۵-۱۶})$$

که در آن

$$\alpha = \left[\frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2} \right]^{1/2}, \quad r < R \quad (\text{الف ۵-۱۷})$$

است. همان طور که در (۷-۶-۳۰) بحث کردیم، جواب خارجی برای $r > R$ که در آن پتانسیل برابر با صفر است، می تواند به شکل یک ترکیب خطی از توابع هنکل کروی نوشته شود. این توابع به صورت زیر تعریف می شوند:

$$\begin{aligned} h_l^{(1)}(\rho) &= j_l(\rho) + in_l(\rho) \\ h_l^{(1)*}(\rho) &= h_l^{(2)}(\rho) = j_l(\rho) - in_l(\rho) \end{aligned} \quad (\text{الف ۵-۱۸})$$

که از (الف ۵-۱۵) شکل مجانبی برای $\rho \rightarrow \infty$ به شکل زیر است:

$$\begin{aligned} h_l^{(1)}(\rho) &\xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \frac{1}{\rho} e^{i[\rho - (l+1)\pi/2]} \\ h_l^{(1)*}(\rho) &= h_l^{(2)}(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \frac{1}{\rho} e^{-i[\rho - (l+1)\pi/2]} \end{aligned} \quad (\text{الف ۵-۱۹})$$

اگر بخواهیم ترازهای انرژی حالت مقید پتانسیل چاه مربعی سه بعدی را به دست آوریم (که در آن

$r > R$ و $V(r) = 0$ است)، داریم:

$$u_l(r) = rA_l(r) = \text{constant } e^{-\kappa r} \left(\frac{1}{\kappa r} \right)$$

$$\kappa = \left(\frac{2m|E|}{\hbar^2} \right)^{1/2} \quad (\text{الف ۵-۲۰})$$

بسط‌های مجانبی، که در (الف ۵-۱۹) نشان داده شد، شامل جملات نمایی با علامت مخالف آن‌چه داده

شده نیستند، بنابراین برای $r > R$ جواب‌های مطلوب از (الف ۵-۲۰) عبارتند از:

$$A_l(r) = \text{ثابت } h_l^{(1)}(i\kappa r) = \text{ثابت } [j_l(i\kappa r) + in_l(i\kappa r)] \quad (\text{الف ۵-۲۱})$$

که در آن سه جمله‌ی اول از این تابع عبارتند از:

$$h_0^{(1)}(i\kappa r) = -\frac{1}{\kappa r} e^{-\kappa r}$$

$$h_1^{(1)}(i\kappa r) = i \left(\frac{1}{\kappa r} + \frac{1}{\kappa^2 r^2} \right) e^{-\kappa r}$$

$$h_2^{(1)}(i\kappa r) = \left(\frac{1}{\kappa r} + \frac{3}{\kappa^2 r^2} + \frac{3}{\kappa^3 r^3} \right) e^{-\kappa r} \quad (\text{الف ۵-۲۲})$$

در پایان، به جابه‌جایی حالت پتانسیل ثابت $V(r) = V_0$ ، نسبت به پتانسیل ذره‌ی آزاد می‌پردازیم. برای

این منظور، تنها باید E که جواب ذره‌ی آزاد ظاهر شد [الف ۵-۱۰] و [الف ۵-۱۱] را ببینید] را با $E - V_0$

عوض کنیم. دقت کنید، اگر $E < V_0$ باشد، آنگاه $h_l^{(1,2)}(i\kappa r)$ با $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$ به کار برده

می‌شود.

الف-۶- اتم هیدروژن

در این جا پتانسیل برابر است با:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad (\text{الف-۶-۱})$$

و متغیر بدون بُعد زیر را تعریف می کنیم:

$$\rho = \left(\frac{8m_e |E|}{\hbar^2} \right)^{1/2} r \quad (\text{الف-۶-۲})$$

ویژه توابع انرژی و ویژه مقدارها (ترازهای انرژی) عبارتند از:

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi)$$

$$R_{nl}(r) = - \left\{ \left(\frac{2Z}{na_0} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right\}^{1/2} e^{-\rho/2} \rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$$

$$E_n = \frac{-Z^2 e^2}{2n^2 a_0} \quad (\text{مستقل از } l \text{ و } m)$$

$$a_0 = \text{شعاع بوهر} = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$$

$$n \geq l+1, \quad \rho = \frac{2Zr}{na_0} \quad (\text{الف-۶-۳})$$

چند جمله ای های لاگور تعمیم یافته به شکل زیر تعریف می شوند:

$$L_p^q(\rho) = \frac{d^q}{d\rho^q} L_p(\rho) \quad (\text{الف-۶-۴})$$

که در آن

$$L_p(\rho) = e^\rho \frac{d^p}{d\rho^p} (\rho^p e^{-\rho}) \quad (\text{الف-۶-۵})$$

و انتگرال بهنجارش در رابطه‌ی زیر صدق می‌کند:

$$\int e^{-\rho} \rho^{2l} [L_{n+l}^{2l+1}(\rho)]^2 \rho^2 d\rho = \frac{2n[(n+l)!]^3}{(n-l-1)!} \quad (\text{الف ۶-۶})$$

توابع شعاعی برای n کوچک عبارتند از:

$$R_{10}(r) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} 2e^{-Zr/a_0}$$

$$R_{20}(r) = \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} (2 - Zr/a_0) e^{-Zr/2a_0}$$

$$R_{21}(r) = \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \frac{Zr}{\sqrt{3} a_0} e^{-Zr/2a_0} \quad (\text{الف ۶-۷})$$

انتگرال‌های شعاعی به شکل زیر هستند:

$$\langle r^k \rangle \equiv \int_0^\infty dr r^{2+k} [R_{nl}(r)]^2$$

$$\langle r \rangle = \left(\frac{a_0}{2Z}\right) [3n^2 - l(l+1)]$$

$$\langle r^2 \rangle = \left(\frac{a_0^2 n^2}{2Z^2}\right) [5n^2 + 1 - 3l(l+1)]$$

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{Z}{n^2 a_0}$$

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{Z^2}{[n^3 a_0^2 (l + \frac{1}{2})]}$$

(الف ۶-۸)

پیوست ب

اثبات قانون جمع تکانه‌ی زاویه‌ای در معادله‌ی (۳-۷-۳۸)

پرداختن به مسأله‌ی جمع تکانه‌ی زاویه‌ای از نقطه نظر مکانیک کوانتومی می‌تواند آموزنده باشد. بگذارید تا تکانه‌ی زاویه‌ای را طوری برچسب بزنیم که، $j_1 \geq j_2$ باشد. همواره می‌توانیم این کار را انجام دهیم. از معادله‌ی (۳-۷-۳۵) مقدار بیشینه‌ی m ، یا همان m^{\max} برابر است با:

$$m^{\max} = m_1^{\max} + m_2^{\max} = j_1 + j_2 \quad (\text{ب-۱-۱})$$

تنها یک کت متناظر با ویژه مقدار m^{\max} وجود دارد که بنا به انتخاب‌های ما یا باید برحسب $\langle j_1 j_2; m_1 m_2 \rangle$ باشد و یا برحسب $\langle j_1 j_2; j m \rangle$ نوشته شود. به عبارت دیگر با برابر قرار دادن عامل فاز با ۱، داریم:

$$\langle j_1 j_2; j_1 j_2 \rangle = \langle j_1 j_2; j_1 + j_2, j_1 + j_2 \rangle \quad (\text{ب-۱-۲})$$

در پایه‌های $\langle j_1 j_2; m_1 m_2 \rangle$ دو کت متناظر با ویژه مقدار m که برابر با $m^{\max} - 1$ باشد، وجود دارد. یکی با $m_1 = m_1^{\max} - 1$ و $m_2 = m_2^{\max}$ و دیگری با $m_1 = m_1^{\max}$ و $m_2 = m_2^{\max} - 1$. بنابراین در این پایه تبهگنی دوگانه وجود دارد. به همین صورت در پایه‌های $\langle j_1 j_2; j m \rangle$ نیز باید تبهگنی دوگانه برقرار باشد. این تبهگنی از کجا به وجود می‌آید؟ پیداست که $m^{\max} - 1$ یک مقدار ممکن m برای $j = j_1 + j_2$ است. این مقدار، همچنین برای $j = j_1 + j_2 - 1$ نیز یک مقدار ممکن m به شمار می‌رود (در واقع برای این j این مقدار بیشینه‌ی m است). بنابراین برای به دست آوردن j می‌توان j_1 و j_2 را به صورت $j_1 + j_2 - 1$ با هم جمع کرد.

می‌توانیم به همین روش ادامه دهیم، اما پیداست که تبهگنی نمی‌تواند به طور نامحدود افزایش یابد. در واقع برای $m^{\min} = -j_1 - j_2$ دوباره‌ی یک کت یگانه وجود دارد. حداکثر تبهگنی ممکن $(2j_2 + 1)$ گانه است. همان طور که در جدول ب-۱ آمده است. جدول ب-۱ برای دو مثال خاص نوشته شده است: برای $j_1 = 2, j_2 = 1$ و برای $j_1 = 2, j_2 = \frac{1}{2}$. این تبهگنی $(2j_2 + 1)$ گانه باید $(2j_2 + 1)$ حالت j وابسته باشد:

$$j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, j_1 - j_2 \quad (\text{ب-۱-۳})$$

اگر قید $j_1 \geq j_2$ را حذف کنیم، (۳-۷-۳۸) را به دست می آوریم.

جدول ب-۱: مثال‌های خاصی از مقدارهای m و m_1 و m_2 به ترتیب برای دو حالت $j_1 = 2, j_2 = 1$ و

$$j_1 = 2, j_2 = \frac{1}{2}$$

$j_1 = 2, j_2 = 1$ m	3	2	1	0	-1	-2	-3
(m_1, m_2)	(2,1)	(1,1) (2,0)	(0,1) (1,0) (2,-1)	(-1,1) (0,0) (1,-1)	(-2,1) (-1,0) (0,-1)	(-2,0) (-1,-1)	(-2,-1)
تعداد حالات	1	2	3	3	3	2	1
$j_1 = 2, j_2 = \frac{1}{2}$ m	$\frac{5}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{3}{2}$	$-\frac{5}{2}$	
(m_1, m_2)	(2, $\frac{1}{2}$)	(1, $\frac{1}{2}$) (2, $-\frac{1}{2}$)	(0, $\frac{1}{2}$) (1, $-\frac{1}{2}$)	(-1, $\frac{1}{2}$) (0, $-\frac{1}{2}$)	(-2, $\frac{1}{2}$) (-1, $-\frac{1}{2}$)	(-2, $-\frac{1}{2}$)	
تعداد حالات	1	2	2	2	2	1	

پیوست ج

جزییات ریاضیاتی فرمول بندی پراکندگی کوئی

ج-۱ دامنه پراکندگی کوئی

بگذارید تا به معادله دیفرانسیل (۷-۱۳-۷) بازگردیم. نظریه‌ی معادلات دیفرانسیل به ما می‌گوید که تنها تکنیکی در صفحه‌ی کراندار u در $u = 0$ رخ می‌دهد (ما به دنبال جواب‌هایی هستیم که در $u = 0$ منظم باشند). $\chi(u)$ را در فضای تبدیل لاپلاس t می‌آزماییم:

$$\chi(u) = \int_{t_1}^{t_2} e^{ut} f(t) dt \quad (\text{ج ۱-۱})$$

که در آن مسیر انتگرال گیری $t_1 \rightarrow t_2$ در صفحه‌ی مختلط t بعداً مشخص می‌شود. اگر $\chi(u)$ را که از (ج ۱-۱) به دست می‌آید، در (۷-۱۳-۷) جایگذاری کنیم، داریم:

$$\begin{aligned} & \int_{t_1}^{t_2} [ut^2 + (1-u)t - i\gamma] f e^{ut} dt \\ &= \int_{t_1}^{t_2} f \left[(t - i\gamma) + t(t-1) \frac{d}{dt} \right] e^{ut} dt \\ &= t(t-1) e^{ut} f \Big|_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} \left\{ (t - i\gamma) f - \frac{d}{dt} [t(t-1)f(t)] \right\} e^{ut} dt = 0 \quad (\text{ج ۲-۱}) \end{aligned}$$

که در آن از انتگرال گیری جزء به جزء استفاده کرده‌ایم. اگر فرض کنیم که جملات سطحی صفر باشند، داریم:

$$(t - i\gamma)f(t) - \frac{d}{dt} [t(t-1)f(t)] = 0 \quad (\text{ج ۳-۱})$$

و به سادگی می‌توانیم جواب $f(t)$ را به دست آوریم:

$$f = A t^{i\gamma-1} (1-t)^{-i\gamma} \quad (\text{ج ۴-۱})$$

که در آن A یک ثابت است. به طور موقتی و به شکل خلاصه می نویسیم [از (ج ۱-۱)]:

$$\chi(u) = A \int_C e^{ut} t^{\gamma-1} (1-t)^{-\gamma} dt, \int_{t_1}^{t_2} \rightarrow \int_C \quad (\text{ج ۱-۵})$$

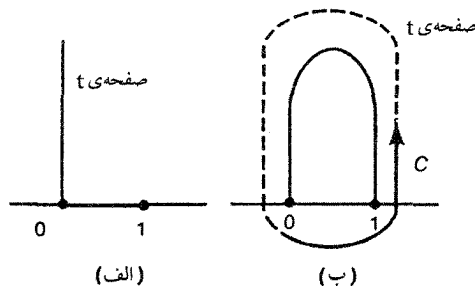
اکنون باید C را انتخاب کنیم. توجه می کنیم که انتگرالده در رابطه‌ی (ج ۱-۵) در صفحه‌ی مختلط t به ازای $t = 0, 1$ نقاط شاخه‌ای دارد. شکل ج-۱ را ببینید. برای این که جمله‌ی سطحی در (ج ۱-۲) صفر شود، باید t در نقاط نهایی‌شان یک قسمت موهومی باشد که به سمت $+\infty$ برود. به این خاطر که

$$u = ik(r-z) = ikr(1-\cos\theta) \equiv ik$$

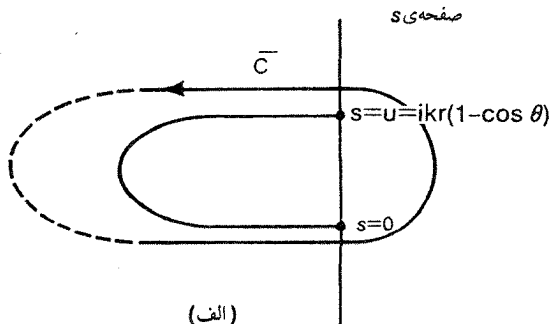
و $k > 0$ بنابراین:

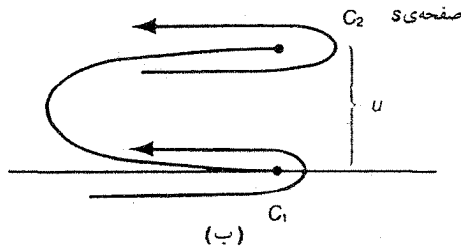
$$e^{ut} \rightarrow e^{ikt} \xrightarrow{t \rightarrow a+i\infty} 0$$

و جمله‌ی سطحی صفر می شود. اما راه‌های بسیار زیادی برای دست یافتن به $t = a + j\infty$ وجود دارد! همان طور که محاسبات عملی نشان می دهند [(ج ۱-۱۰) را ببینید]، انتخاب C که در شکل ج-۱ الف نشان داده شده است، رفتار مجانبی درستی را ارائه می دهد و ما این پربند خاص را برمی گزینیم.



شکل ج-۱: (الف) نقاط شاخه‌ای در $t = 0, 1$ و خط برش مستقیم ساده بین $(0, 1)$ در صفحه‌ی t قطع می شود. (ب) خط برش بین $(0, 1)$ و پربند ممکن C برای (ج ۱-۵).





شکل ج-۲: الف) پربند \bar{C} برای معادله‌ی (ج-۱-۶) (ب) پربند خمیده‌ی \bar{C} در C_1 به علاوه‌ی C_2 .

فرص کنید $s = ut$ باشد. آنگاه (ج-۱-۵) می‌شود:

$$\begin{aligned}\chi(u) &= A \int_{\bar{C}} \frac{ds}{u} e^s \left(\frac{s}{u}\right)^{i\gamma-1} \left(\frac{u-s}{u}\right)^{-i\gamma} \\ &= A \int_{\bar{C}} ds e^s s^{i\gamma-1} (u-s)^{-i\gamma}\end{aligned}\quad (\text{ج-۱-۶})$$

که در آن \bar{C} پربند مشخص شده در شکل ج-۲-الف است. لازم است که $\chi(u)$ در $u = 0$ منظم باشد. در واقع داریم:

$$\chi(0) = (-1)^{-i\gamma} A \int_{\bar{C}} \frac{e^s}{s} ds = (-1)^{-i\gamma} A 2\pi i \quad (\text{ج-۱-۷})$$

اکنون (ج-۱-۶) را برای $u \rightarrow \infty$ (حد مجانبی) محاسبه می‌کنیم و نشان می‌دهیم که شکل صحیح به دست آمده است. برای منحنی C_1 در شکل ج-۲-ب و برای یک s ثابت، داریم: $s = -(s_0 \pm i\varepsilon)$ و $s/u = -(s_0 \pm i\varepsilon)/i\kappa$ ، اما این برای $\kappa \rightarrow \infty$ کوچک است. بنابراین $(u-s)$ را برحسب توان‌های s/u بسط می‌دهیم. برای منحنی C_2 در شکل ج-۲-ب داریم: $s = -s_0 + i(\kappa \pm \varepsilon)$. بنابراین $s/u \rightarrow 1 - (s_0 \pm i\varepsilon)/\kappa$ ، در نتیجه نمی‌توانیم بسط را برحسب توان‌های s/u بنویسیم. اگر تغییر متغیر $s' = s - u$ را انجام دهیم، آنگاه بسط پیرامون s'/u ممکن می‌شود. بنابراین دیگر پربند \bar{C} با پربند شکل ج-۲-ب تعویض می‌شود و $s' \rightarrow s$ منجر به $C_1 \rightarrow C_2$ می‌گردد:

$$\int_{\bar{C}} ds \equiv \int_{C_1} ds + \int_{C_2} ds = \int_{C_1} ds + \int_{C_1} ds'$$

\uparrow
 $s = s' + u$

(ج ۸-۱)

و

$$\chi(u) = A \int_{C_1} \{ [e^s s^{i\gamma-1} (u-s)^{-i\gamma}] ds + [e^{s'+u} (s'+u)^{i\gamma-1} (-s')^{-i\gamma}] ds' \}$$

(ج ۹-۱)

در این جا پیدا است که $(s'+u)^{i\gamma-1}$ بر حسب s'/u قابل بسط است و می توانیم (ج ۹-۱) را به شکل کامل تر به صورت زیر بنویسیم (چون s' متغیر انتگرال گیری ظاهری برای پربند C_1 است):

$$\chi(u) = A \left\{ u^{-i\gamma} \int_{C_1} e^s s^{i\gamma-1} \left(1 - \left(\frac{s}{u} \right) \right)^{-i\gamma} ds + e^u u^{i\gamma-1} (-1)^{-i\gamma} \int_{C_1} e^s \left(1 + \left(\frac{s}{u} \right) \right)^{i\gamma-1} s^{-i\gamma} ds \right\}$$

(ج ۱۰-۱)

دقت کنید که ضرایب دو انتگرال در (ج ۱۰-۱)، $u^{-i\gamma}$ و $e^u u^{i\gamma-1} (-1)^{-i\gamma}$ ، برای پراکنندگی کولنی رفتار درستی دارند [(ج ۹-۱۳-۷) و (ج ۱۲-۱۳-۷) و (ج ۱۴-۱۳-۷) را ببینید].

وقتی $s/u \rightarrow 0$ را قرار دهیم، جملات نهایی در (ج ۱۰-۱) به دست می آیند؛ آنگاه:

$$\chi(u) \sim 2\pi i A [u^{-i\gamma} g_1(\gamma) - (-u)^{i\gamma-1} e^u g_2(\gamma)]$$

$$2\pi i g_1(\gamma) = \int_{C_1} e^s s^{i\gamma-1} ds$$

$$2\pi i g_2(\gamma) = \int_{C_1} e^s s^{-i\gamma} ds$$

(ج ۱۱-۱)

با انتگرال گیری جزء به جزء برای $2\pi i g_2(\gamma)$ ، داریم:

$$2\pi i g_2(\gamma) = \int_{C_1} e^s s^{-i\gamma} ds = e^s s^{-i\gamma} \Big|_{-\infty-i\epsilon}^{-\infty+i\epsilon} - (-i\gamma) \int_{C_1} e^s s^{-i\gamma-1} ds$$

$$= + i\gamma g_1^*(\gamma) 2\pi i.$$

(ج ۱۲-۱)

دقت کنید که $u = u^* - u$ است، درمی یابیم:

$$\begin{aligned}\chi(u) &\equiv 2\pi i A u^{-i\gamma} g_1(\gamma) \left[1 + \frac{(u^*)^{+i\gamma} g_1^*(\gamma)}{u^{-i\gamma} g_1(\gamma)} i\gamma \frac{e^u}{u} \right] \\ &= 2\pi i A u^{-i\gamma} g_1(\gamma) \left[1 + e^{i\phi(k,u,\gamma)} i\gamma \frac{e^u}{u} \right]\end{aligned}\quad (\text{ج } ۱۳-۱)$$

که در آن داریم:

$$\frac{(u^*)^{+i\gamma} g_1^*(\gamma)}{u^{-i\gamma} g_1(\gamma)} = \frac{[u^{-i\gamma} g_1(\gamma)]^*}{[u^{-i\gamma} g_1(\gamma)]} = e^{i\phi(k,u,\gamma)} \quad (\text{ج } ۱۴-۱)$$

برای رفتن از $\chi \rightarrow \psi$ از

$$\begin{aligned}(u^*)^{i\gamma} &= (-i)^{i\gamma} [k(r-z)]^{i\gamma} = e^{+\gamma\pi/2} e^{i\gamma \ln k(r-z)} \\ (u)^{-i\gamma} &= (i)^{-i\gamma} [k(r-z)]^{-i\gamma} = e^{+\gamma\pi/2} e^{-i\gamma \ln k(r-z)}\end{aligned}\quad (\text{ج } ۱۵-۱)$$

استفاده می کنیم [همانند (۷-۱۳-۴) با ضریب e^{ikz}] و مجانبی بهنجار $\psi_k(\mathbf{r})$ را که با معادله‌ی

(۷-۱۳-۱۵) داده شده است، به دست می آوریم.

ج-۲ محاسبه‌ی $A_l^{(2)}(kr)$ و $A_l^{(1)}(kr)$ لازم برای آنالیزهای موج پاره‌ای پراکندگی کولنی

دقت کنید که:

$$\begin{aligned}e^{ikrt} e^{ikr(1-t)} &= e^{ikr}, \\ e^{ikrt} e^{-ikr(1-t)} &= e^{-ikr} e^{2ikrt}\end{aligned}\quad (\text{ج } ۱-۲)$$

بنابراین:

$$A_l^{(1)}(kr) = \frac{Ae^{ikr}}{2kr} \int_C E_l[kr(1-t)] d(t, \gamma) dt \quad (\text{ج } ۲-۲)$$

از آن جا که برای $|t|$ های بزرگ، $d(t, \gamma) \sim t^{-2}$ و $E_l \sim t^0 \sim 1$ است و تنها تکینگی‌ها برای نقاط شاخه‌ای $t = 0, 1$ و قطب‌های ممکن E_l (وقتی که آرگومان آن $kr(1-t)$ صفر شود) هستند، پربند را به صورتی که در شکل ج-۱-ب نشان داده شده است می‌بندیم. این منجر می‌شود به:

$$A_l^{(1)}(kr) = 0 \quad (\text{ج } ۳-۲)$$

چون می‌توان پربند C را به‌ازای محیط پیرامون بیرونی در نظر گرفت که هیچ قطبی را در بر نمی‌گیرد.

برای $A_l^{(2)}(kr)$ داریم:

$$A_l^{(2)}(kr) = \frac{Ae^{-ikr}}{2kr} \int_C E_l^* [kr(1-t)] e^{2ikrt} d(t, \gamma) dt \quad (\text{ج } ۴-۲)$$

همین کار را بین (ج ۵-۱) و (ج ۶-۱) انجام می‌دهیم. قرار می‌دهیم: $\bar{s} = \bar{u}t$ که در آن $\bar{u} = 2ikr$ است.

آنگاه $t = \bar{s}/\bar{u}$ و $1-t = (\bar{u} - \bar{s})/\bar{u}$ بنابراین:

$$A_l^{(2)}(kr) = \frac{iAe^{-\bar{u}i/2}}{\bar{u}} \int_{\bar{C}} e^{\bar{s}} (\bar{s}/\bar{u})^{i\gamma-1} \left(\frac{\bar{u}-\bar{s}}{\bar{u}}\right)^{-i\gamma-1} E_l^* \left(\frac{\bar{u}-\bar{s}}{2i}\right) \frac{d\bar{s}}{\bar{u}}, \quad (\text{ج } ۵-۲)$$

که در آن \bar{C} همانند شکل ج-۲-الف است به جز این که انتهای نقاط شاخه‌ای در صفحه‌ی \bar{s} برابر با

$$\bar{s} = 0 \text{ و } \bar{s} = 2ikr \text{ است. یادآوری می‌کنیم که } \bar{u}^* = -\bar{u} \text{ و بنابراین:}$$

$$\begin{aligned}
 A_l^{(2)}(kr) &= iAe^{-\bar{u}/2} \int_{\bar{c}} e^{\bar{s}} \bar{s}^{i\gamma-1} (\bar{u} - \bar{s})^{-i\gamma-1} E_l^* \left(\frac{\bar{u} - \bar{s}}{2i} \right) d\bar{s} \\
 &= iAe^{-\bar{u}/2} \int_{c_1} \left[e^s s^{i\gamma-1} (\bar{u} - s)^{-i\gamma-1} E_l^* \left(\frac{\bar{u} - s}{2i} \right) \right. \\
 &\quad \left. + e^{s+\bar{u}} (s + \bar{u})^{i\gamma-1} (-s)^{-i\gamma-1} E_l^* \left(\frac{-s}{2i} \right) \right] ds \\
 &\cong \frac{iA}{\bar{u}} \left[e^{-\bar{u}/2} \bar{u}^{-i\gamma} \int_{c_1} e^s s^{i\gamma-1} E_l^* \left(\frac{\bar{u}}{2i} \right) ds \right. \\
 &\quad \left. + e^{\bar{u}/2} \bar{u}^{i\gamma} \int_{c_1} e^s (-s)^{-i\gamma-1} E_l^* \left(\frac{-s}{2i} \right) ds \right] \\
 &\cong \frac{A}{2kr} \left[e^{-\bar{u}/2} \bar{u}^{-i\gamma} \int_{c_1} e^s s^{i\gamma-1} \frac{1}{(-i)^{l+1}} ds \right. \\
 &\quad \left. - (e^{-\bar{u}/2} \bar{u}^{-i\gamma})^* \int_{c_1} e^s s^{-i\gamma-1} E_l^* \left(\frac{-s}{2i} \right) ds \right], \tag{۶-۲}
 \end{aligned}$$

که در آخرین معادله از رفتار مجانبی \bar{u} برای $E_l^* (\bar{u}/2i)$ که در (۷-۱۳-۲۴) آمده است، استفاده کردیم. سپس توجه کنید که $e^{-\bar{u}/2} \bar{u}^{-i\gamma} = e^{\pi\gamma/2} e^{-i(kr + \gamma \ln 2kr)}$ بنابراین (ج ۶-۲) می‌دهد:

$$\begin{aligned}
 A_l^{(2)}(kr) &= -\frac{Ae^{\pi\gamma/2}}{2ikr} \{ e^{-i[kr - (l\pi/2) + \gamma \ln 2kr]} 2\pi i g_1(\gamma) \\
 &\quad - e^{i[kr - (l\pi/2) + \gamma \ln 2kr]} 2\pi i g_3(\gamma) \}, \tag{۷-۲}
 \end{aligned}$$

که در آن

$$\begin{aligned}
 2\pi i g_1(\gamma) &= \int_{c_1} e^s s^{i\gamma-1} ds = \frac{2\pi i}{\Gamma(1 - i\gamma)} \\
 2\pi i g_3(\gamma) &= i^{l-1} \int_{c_1} e^s s^{-i\gamma-1} E_l^* \left(\frac{-s}{2i} \right) ds. \tag{۸-۲}
 \end{aligned}$$

است. دقت کنید که $g_1(\gamma)$ و $g_3(\gamma)$ در معادله‌ی (۷-۱۳-۲۸) به کار رفتند و منجر به یک فاز حقیقی $\eta_l(k)$

کتابشناسی

- Baym, G. *Lectures on Quantum Mechanics*, New York: W. A. Benjamin, 1969.
- Bethe, H. A., and R. W. Jackiw. *Intermediate Quantum Mechanics*, 2nd ed., New York: W. A. Benjamin, 1968.
- Biedenharn, L. C., and H. Van Dam. (eds) *Quantum Theory of Angular Momentum*, New York: Academic Press, 1965.
- Bjorken, J. D., and S. D. Drell, *Relativistic Quantum Fields*, New York; McGraw-Hill, 1965.
- Bohm, D. *Quantum Theory*, Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 1951.
- Dirac, P. A. M. *Quantum Mechanics*, 4th ed., London: Oxford Univ. Press, 1958.
- Dirac, P. A. M. *Quantum Mechanics*, 4th ed., London: Oxford Univ. Press, 1958.
- Edmonds, A. R. *Angular Momentum in Quantum Mechanics*, Princeton, NJ: Princeton University Press, 1960.
- Fermi, E. *Nuclear Physics*, Chicago: University of Chicago Press, 1950.
- Feynman, R. P., and A. R. Hibbs. *Quantum Mechanics and Path Integrals*, New York: McGraw-Hill, 1964.
- Finkelstein, R. J. *Nonrelativistic Mechanics*, Reading, MA: W. A. Benjamin, 1973.
- Frauenfelder, H., and E. M. Henley. *Subatomic Physics*, Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 1974.
- French, A. P., and E. F. Taylor. *An Introduction to Quantum Physics*, New York: W. W. Norton, 1978.
- Goldberger, M. L., and K. M. Watson. *Collision Theory*, New York: Wiley, 1964.
- Goldstein, H. *Classical Mechanics*, 2nd ed., Reading, MA: Addison-Wesley, 1980.
- Gottfried, K. *Quantum Mechanics*, vol. I, New York: W. A. Benjamin, 1966.
- Jackson, J. D. *Classical Electrodynamics*, 2nd ed., New York: Wiley, 1975.
- Landau, L. D.; and E. M. Lifschitz. *Quantum Mechanics*, Reading, MA: Addison-Wesley, 1958.
- Merzbacher, E. *Quantum Mechanics*, 2nd ed., New York: Wiley, 1970.
- Messiah, A. *Quantum Mechanics*, New York: Interscience, 1961.
- Morse, P. M., and H. Feshbach. *Methods of Theoretical Physics*, (2 vols.), New York: McGraw-Hill, 1953.
- Newton, R. G. *Scattering Theory of Waves and Particles*, 2nd ed., New York: McGraw-Hill, 1982.
- Preston, M. *Physics of the Nucleus*, Reading, MA: Addison-Wesley, 1962.
- Sakurai, J. J. *Advanced Quantum Mechanics*, Reading, MA: Addison-Wesley, 1967.
- Sargent III, M., M. O. Scully, and W. E. Lamb, Jr. *Laser Physics*, Reading, MA: Addison-Wesley, 1974.
- Saxon, D. S. *Elementary Quantum Mechanics*. San Francisco: Holden-Day, 1968.
- Schiff, L. *Quantum Mechanics*, 3rd ed., New York: McGraw-Hill, 1968.
- Tomanaga, S. *Quantum Mechanics I*, Amsterdam: North-Holland, 1962.
- Whittaker, E. T., and G. N. Watson. *A Course of Modern Analysis*, New York: Cambridge University Press, 1965.

پیش‌نیازهای برای این کتاب

Dicke, R. H., and J. P. Wittke, *Introduction to Quantum Mechanics*, Reading, MA: Addison-Wesley, 1960.

این کتاب، بسیار خواندنی است و در سطوح مقدماتی بسیار خلاصه است. این کتاب در مورد عنوان‌های کمی به بحث می‌پردازد. بیشتر توجه نگارنده آن به کوانتوم آماری بوده است، به طوری که دیگر کتاب‌ها تا این حد به این مطلب نپرداخته‌اند.

Feynman, R. P., R. B. Leighton, and M. Sands, *The Feynman Lectures on Physics*, vol. 3, *Quantum Mechanics*, Reading, MA: Addison-Wesley, 1965.

این کتاب مقدمه‌ای بر مکانیک کوانتومی است که از رهیافت بردارهای حالت به مسائل می‌پردازد. در این کتاب بسیاری از مسأله‌های جالب (نظیر آزمایش اشترن-گرلاخ) با حداقل فرمول‌نویسی مورد بحث قرار گرفته است.

Gasiorowicz, S. *Quantum Physics*, New York: Wiley 1974.

این کتاب از نظر سطح با کتاب Dicke و Wittke که در سال ۱۹۶۰ نگاشته شده است، قابل مقایسه است. گاسیورویچ به عنوان یک معلم بسیار پرکار، مشهور است. او مفاهیم بسیار مشکل (حتی در حوزه‌ی مطالعات پیشرفته‌ی نظریه‌ی ذرات) را به سادگی و روانی بیان می‌کند. بنابراین عجیب نیست که کتاب مکانیک کوانتومی او، هدف او را نمایان می‌کند. این هدف تسهیل در امر ساده خواندن کتاب است.

Mandl, F. *Quantum Mechanics*, London: Butterworths Scientific Publications, 1957.

این کتاب شامل یک ارائه‌ی فشرده و واضح از مفاهیم و یافته‌های ریاضیاتی مکانیک موجی است. این کتاب از نظر سطح با کتاب گاسیورویچ قابل مقایسه است.

Matthews, P. T. *Introduction to Quantum Mechanics*, 3rd ed., London: McGraw-Hill, 1974.

ویرایش سوم این کتاب، واضح، مختصر، کامل و قابل فهم برای دانشجوی دوره‌ی کارشناسی است. این کتاب به‌طور ریاضیاتی به معرفی مکانیک ماتریسی و موجی می‌پردازد که این مکانیک، بر مبنای اصول موضوعه‌ی تعریف شده است.

Mott, N. F. *Elements of Wave Mechanics*, London: Cambridge University Press, 1952.

یک بحث کوتاه اما دلپذیر درباره‌ی مکانیک موجی در سطح نظری مقدماتی، توسط یکی از پیشگامان.

Park, D. *Introduction to the Quantum Theory*, 2nd. ed., New York: McGraw-Hill, 1974.

این کتاب برای دانشجویان ممتاز دوره‌ی کارشناسی قابل فهم است. این کتاب جذاب که توسط یک آموزگار برجسته نگاشته شده است، به مقدمه‌ای کلی درباره‌ی نظریه‌ی کوانتومی می‌پردازد و سپس به کاربردهای این نظریه در شاخه‌های مختلف فیزیک می‌پردازد و به این ترتیب جنبه‌های مختلف این نظریه را روشن می‌کند. این کاربردها مطالعه‌ی کمی نیاز دارد، بنابراین این کتاب می‌تواند به‌عنوان منبعی برای دانشجویان مفید باشد.

Pauling, L., and E. B. Wilson, *Introduction to Quantum Mechanics*, New York: McGraw-Hill, 1935.

اگرچه این کتاب، یکی از قدیمی‌ترین متون است، اما هنوز ارزش‌های زیادی برای مطالعه دارد. در این کتاب یک بحث خیره‌کننده درباره‌ی اتم هیدروژن و نوسان‌گر هماهنگ وجود دارد که از نقطه نظر مکانیک موجی به موضوع پرداخته است.

Rojansky, V. *Introductory Quantum Mechanics*, Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 1938.

با وجود این که این کتاب یک متن کلاسیکی به حساب می‌آید، اما به‌خاطر پرداخت پرتفصیل آن به مفاهیم بنیادی موج و مکانیک ماتریسی، ارزش خاصی دارد.