



مکانیک کوانتومی

جلد دوم

کلود کوهن - تانوجی

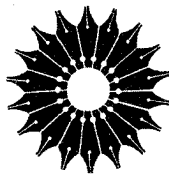
برنارد دیو

فرانک لالوئه

ترجمه عبدالرحیم اشعری

محمد فرهاد رحیمی

محسن سربیشه‌ای



مکانیک کوانتومی

جلد دوم

کلود کوهن - تانوجی، برنارد دیو، فرانک لالوئه

ترجمه

عبدالرحیم اشعری، محمدفرهاد رحیمی، محسن سرپیشه‌ای

مرکز نشر دانشگاهی

فهرست

صفحه	عنوان
۱	پیشگفتار
۲	راهنمای استفاده از کتاب
۳	مقدمه
۷	۴ کاربرد اصول موضوع در موردهای ساده: اسپین $1/2$ و دستگاههای دوترازه
۸	فهرست مطالب فصل ۴
۹	۱-۴ ذره با اسپین $1/2$: کوانتش تکانه زاویه‌ای
۱۹	۲-۴ توضیح اصول موضوع در مورد اسپین $1/2$
۳۲	۳-۴ مطالعه کلی از دستگاههای دوترازه
۴۶	مکملهای فصل ۴
۴۷	مکمل ۱ ماتریسهای پاؤلی
۵۲	مکمل ۲ قطری کردن یک ماتریس هرمیتی 2×2
۵۸	مکمل ۳ اسپین خیالی $1/2$ وابسته به یک دستگاه دوترازه
۶۵	مکمل ۴ دستگاه با دو اسپین $1/2$
۷۴	مکمل ۵ ماتریس چگالی اسپین $1/2$
	مکمل ۶ اسپین $1/2$ در یک میدان: مغناطیسی ایستا و یک میدان چرخان:
۸۱	تشدید مغناطیسی
۹۷	مکمل ۷ مطالعه مولکول آمونیاک به کمک یک مدل ساده
۱۱۶	مکمل ۸ اثرهای جفتدگی میان یک حالت پایدار و یک حالت ناپایدار
۱۲۴	مکمل ۹ تمرینات

۱۳۱	۵ نوسانگر هماهنگ یک بعدی
۱۳۲	فهرست مطالب فصل ۵
۱۳۳	۱-۵ پیشگفتار
۱۳۹	۲-۵ ویژه مقدرهای هامیلتونی
۱۵۰	۳-۵ ویژه حالت‌های هامیلتونی
۱۵۹	۴-۵ بحث فیزیکی
۱۶۷	مکمل‌های فصل ۵
۱۶۹	مکمل ۱ مطالعه چند مثال فیزیکی از نوسانگرهای هماهنگ
۱۹۲	مکمل ۲ مطالعه حالت‌های مانا در نمایش $\{ x\rangle \}$ چند جمله‌ای‌های هرمیت
۲۰۱	مکمل ۳ حل معادله ویژه مقدار نوسانگر هماهنگ به روش چند جمله‌ای
۲۱۱	مکمل ۴ مطالعه حالت‌های مانا در نمایش $\{ p\rangle \}$
۲۱۸	مکمل ۵ نوسانگر هماهنگ همسانگرد سه بعدی
۲۲۵	مکمل ۶ نوسانگر هماهنگ باردار در یک میدان الکتریکی یکنواخت
۲۳۵	مکمل ۷ حالت‌های همدوس "شبه کلاسیک" نوسانگر هماهنگ
۲۵۶	مکمل ۸ مدهای طبیعی ارتعاشی دو نوسانگر هماهنگ جفتیده
۲۷۰	مکمل ۹ مدهای ارتعاشی یک زنجیره خطی نامحدود از نوسانگرهای هماهنگ جفتیده؛ فونونها
۲۹۵	مکمل ۱۰ مدهای ارتعاشی یک دستگاه فیزیکی پیوسته. کاربرد در تابش؛ فوتونها
۳۱۶	مکمل ۱۱ نوسانگر هماهنگ یک بعدی در تراز مندی ترمودینامیکی در دمای T
۳۳۴	مکمل ۱۲ تمرینات
۳۴۱	۶ خواص عمومی تکانه زاویه‌ای در مکانیک کوانتومی
۳۴۲	فهرست مطالب فصل ۶
۳۴۳	۱-۶ مقدمه: اهمیت تکانه زاویه‌ای
۳۴۴	۲-۶ روابط جابه‌جایی مشخصه تکانه‌های زاویه‌ای
۳۴۸	۳-۶ نظریه عمومی تکانه زاویه‌ای
۳۶۷	۴-۶ کاربرد در تکانه زاویه‌ای مدار

۳۹۰	مکملهای فصل ۶
۳۹۲	مکمل ۱ هماهنگهای کروی
۴۰۸	مکمل ۲ تکانه زاویه‌ای و دور آنها
۴۳۸	مکمل ۳ دوران مولکولهای دواتمی
۴۵۷	مکمل ۴ تکانه زاویه‌ای حالت‌های مانای نوسانگر هماهنگ دویعدی
۴۷۷	مکمل ۵ ذره باردار در یک میدان مغناطیسی: ترازهای لانداؤ
۵۰۷	مکمل ۶ تمرینات
۵۱۹	۷ ذره در پتانسیل مرکزی. اتم هیدروژن
۵۲۰	فهرست مطالب فصل ۷
۵۲۲	۷-۱ حالت‌های مانای یک ذره در پتانسیل مرکزی
۵۳۲	۷-۲ حرکت مرکز جرم و حرکت نسبی برای دستگاهی از دو ذره برهم‌کنش‌دار
۵۴۰	۷-۳ اتم هیدروژن
۵۵۸	مکملهای فصل ۷
۵۶۰	مکمل ۱ دستگاه‌های هیدروژن‌گونه
	مکمل ۲ یک مثال قابل حل از پتانسیل مرکزی: نوسانگر هماهنگ سه‌بعدی
۵۷۱	همسانگرد
۵۸۴	مکمل ۳ جریانهای احتمال وابسته به حالت‌های مانای اتم هیدروژن
	مکمل ۴ اتم هیدروژن واقع در میدان مغناطیسی یکنواخت. پارامغناطیس و
۵۸۹	دیامغناطیس. اثر زیمان
۶۰۶	مکمل ۵ مطالعه برخی اوربیتال‌های اتمی. اوربیتال‌های هیبریدی
۶۲۵	مکمل ۶ ترازهای ارتعاشی-دورانی مولکولهای دواتمی
۶۴۲	مکمل ۷ تمرینات
۶۴۴	پیوست الف سری فوریه و تبدیلات فوریه
۶۵۶	پیوست ب "تابع" δ ی دیراک

پیوست ج لاگراژی و هامیلتونی در مکانیک کلاسیک

۶۷۲

کتابنامه

۶۹۳

فهرست راهنما

۷۱۰

پیشگفتار

این کتاب (متن انگلیسی) اساساً ترجمه‌ای است از نسخهٔ فرانسهٔ آن که در پایان سال ۱۹۷۳ منتشر شد. در این متن تغییراتی اعمال شده است که مهمترین آنها اضافه‌شدن یک کتابشناسی مفصل در پایان هر یک از فصلها یا مکملهاست.

این کتاب در اصل برای دانشجویان فرانسوی که تحصیلات دورهٔ لیسانس خود را به پایان می‌رسانند یا کار تحقیقاتی خود را آغاز می‌کنند تدوین شده است. با این همه، به‌نظر ما ساختار این کتاب (جداکردن کتاب به فصلها و مکملها) باید آن‌را برای سایر گروهها نیز مناسب ساخته باشد. به‌عنوان مثال، برای یک درس مکانیک کوانتومی مقدماتی، ما استفاده از مهمترین فصلها را همراه با ساده‌ترین مکملهای آنها توصیه می‌کنیم. برای یک درس پیشرفته‌تر، می‌توان فصلهای باقیمانده و مکملهای مشکلتر را مطالعه کرد. امید است که بعضی از مکملهای پیشرفته‌تر برای دانشجویانی که پس از مطالعهٔ این درس به موضوعات تحقیقاتی جدید در زمینه‌های مختلف فیزیک می‌پردازند مفید باشد.

ک. کوهن-تانوجی

ب. دیو

ف. لالوته

راهنمای استفاده از کتاب

این کتاب از چندین فصل و مکملهای مربوط به آنها تشکیل شده است: فصلها شامل مفاهیم اساسی اند و مطالب آنها، به استثنای بعضی تغییرات و اضافات، منطبق بر درسی هستند که معمولاً در سال آخر برنامه دوره لیسانس فیزیک ارائه می شود. این چهارده فصل به خودی خود کامل اند و می توان آنها را مستقل از مکملهایشان مطالعه کرد. مکملها به دنبال هر فصل می آیند، و به صورت راهنمای مطالعه، نکات مشکل و مهم هر فصل را مورد بحث قرار می دهند.*

مکملها متفاوت اند: برخی به منظور بررسی گسترده تر مطالب فصل یا بحث مفصلتر پیرامون بعضی نکات آمده اند؛ بعضی دیگر به توصیف مثالهای مشخصی می پردازند یا مفاهیم فیزیکی گوناگونی را مطرح می کنند. معمولاً آخرین مکمل هر فصل مجموعه ای از تمرینهاست. سطح مطالب مکملها نیز متفاوت است. برخی از آنها مثالهای خیلی ساده یا ادامه مطالب فصل اند، بعضی مشکلترند (و در مواردی در سطحی بالاتر از مطالب دوره لیسانس ارائه شده اند)؛ به هر حال، خواننده باید پیش از استفاده از مکملها، مطالب هر فصل را خوانده باشد. دانشجوی نباید الزاماً تمام مکملهای یک فصل را در دور اول بخواند. بلکه باید بنابه هدف و علاقه ای که دارد، چندتایی از آنها (مثلاً، دو یا سه تا) را به اضافه تعدادی تمرین انتخاب کند؛ سایر مکملها را می توان برای مطالعات بعدی گذاشت. دیگر اینکه بعضی از قسمتهای کتاب با حروف ریز چاپ شده اند و می توان آنها را در دور اول مطالعه، کنار گذاشت.

* هر فصل توسط یک حرف متعاقب با یک زیرنویس برجسب زده می شود که عدد فصل متناظر را می دهد (برای مثال، مکملهای فصل پنجم (V) به ترتیب عبارتند از AV، BV، CV، و ...). مکملها سریعاً توسط نماد • که در سر هر کدام از صفحاتش ظاهر می شود، مشخص می گردند.

مقدمه

ساختار و سطح کتاب

اهمیت مکانیک کوانتومی در فیزیک و شیمی نوین کاملاً روشن است. برنامه‌های درسی اخیر دانشگاهها طبیعتاً این اهمیت را منعکس می‌سازند. مثلاً در دانشگاههای فرانسه، در سال دوم دوره لیسانس مقدمه‌ای بر مفاهیم اساسی مکانیک کوانتومی به صورت کیفی ارائه می‌شود و در سال آخر لیسانس، مکانیک کوانتومی مقدماتی و مهمترین کاربردهای آن مفصلاً مورد مطالعه قرار می‌گیرد.

این کتاب نتیجه تجربیات چندین سال تدریس مکانیک کوانتومی در سال آخر برنامه دوره لیسانس است، که نخست در دانشکده علوم پاریس و سپس در دانشگاههای پاریس ۶ و پاریس ۷ ارائه شده است. ما لزوم آن را دریافتیم که در ساختار این کتاب باید دو جنبه متفاوت ولی مکمل یکدیگر (متن اصلی درس و گفتگوهای مربوط به آن) را کاملاً از هم متمایز کنیم (نگاه کنید به "راهنمای استفاده" در آغاز کتاب). مباحث فصلها مبتنی بر مطالبی است که در کلاسهای دوره لیسانس تدریس کرده‌ایم. ما پیش از نوشتن متن نهایی، یادداشتهای درسی خود را با هم مقایسه کرده و گسترش داده‌ایم. "مکملها" از دل پرسش و پاسخها، تمرینها و مسائل ارائه شده به دانشجویان، و گزارشهای دانشجویی بیرون آمده است. مفاهیمی نیز از درسهای مشابهی که در سطوح دیگر (مثلاً از درسهای فوق لیسانس) تدریس می‌شوند آورده‌ایم. همان طور که در "راهنمای استفاده" اشاره کرده‌ایم، فصلها به طور کلی شامل مطالبی هستند که دانشجویان سال چهارم یا هم‌تراز آن* باید کم و بیش آنها را مطالعه کنند، ولی لزومی ندارد که همه مکملها در یک سال بررسی شوند. خواننده، مدرس یا دانشجو، باید از میان آنها قسمتهایی را طبق علاقه، سلیقه، یا هدفهایش انتخاب کند.

در این کتاب، مخاطبان اصلی ما دانشجویان رشته فیزیک هستند، یعنی همانهایی که آموزششان

* در فرانسه دوره لیسانس سه سال است و سال چهارم گرایشی می‌شود که هم‌تراز دوره فوق لیسانس ما می‌باشد. مترجمین.

را در چند سال گذشته به عهده داشته‌ایم. جز در تعداد کمی از مکملها، ما از این حد تجاوز نکرده‌ایم. علاوه بر این، سعی کرده‌ایم که مشکلات دانشجویان را در ادراک و جذب مکانیک کوانتومی، و نیز پرسشهای آنان را در نظر بگیریم. البته، امیدواریم که این کتاب برای سایر خوانندگان، نظیر دانشجویان دوره فوق لیسانس، پژوهشگران تازه کار و دبیران دبیرستانها نیز قابل استفاده باشد.

خواننده این کتاب لزومی ندارد که از قبل با فیزیک کوانتومی آشنا باشد: در کلاسهای ما هم فقط معدودی از دانشجویان آشنا بودند. با این همه، ما معتقدیم که درس مکانیک کوانتومی پیشنهادی ما باید با درسهای توصیفی‌تر و کاربردی‌تری، نظیر فیزیک اتمی، تکمیل شود.

روش کلی

احساس ما این است که بهترین راه آشنایی با مکانیک کوانتومی، پرداختن به حل مسائل مشخص است. بنابراین ما اصول موضوع مکانیک کوانتومی را خیلی زود (در فصل سوم) معرفی می‌کنیم تا بتوانیم آنها را در قسمتهای بعدی کتاب به‌کار ببریم. تجربه تدریس ما نشان داده است که بهتر است تمام اصول موضوع را یکباره با هم در ابتدا معرفی کنیم تا در مراحل متعدد. همچنین، فضاهای حالت و نمادگذاری دیراک را از همان ابتدا به‌کار برده‌ایم تا از تکرار بیهوده‌ای که از موکول کردن آن به بعد از مکانیک موجی برحسب تابع موجها ناشی می‌شود، اجتناب کنیم. علاوه بر این، یک تغییر دیر هنگام در نمادگذاری ممکن است دانشجو را گیج کند و موجب بروز تردید در مفاهیمی شود که او تازه با آنها آشنا شده و هنوز کاملاً جذبشان نکرده است.

پس از یک فصل در معرفی کیفی مفاهیم مکانیک کوانتومی، که برای آشناساختن خواننده با آنها از شباهتهای ساده اپتیکی استفاده کرده‌ایم، با یک روش سیستماتیک ابتدا ابزار ریاضی (فصل دوم)، و بعد اصول موضوع مکانیک کوانتومی را همراه با بحثی پیرامون محتوای فیزیکی آنها ارائه می‌کنیم (فصل سوم). این کار به خواننده امکان می‌دهد که از ابتدا یک دید کلی از پیامدهای فیزیکی اصول موضوع جدید داشته باشد. از مکملهای فصل سوم به بعد، به بحث پیرامون کاربردها می‌پردازیم؛ از ساده‌ترین آنها (سیستمهای دوترازه، نوسانگر هماهنگ و غیره) شروع می‌کنیم و به تدریج به موضوعهای پیچیده‌تر (اتم هیدروژن، روشهای تقریبی، و غیره) می‌رسیم. هدف ما این است که نمودهایی از مکانیک کوانتومی را با ارائه مثالهای متعددی در زمینه‌های متفاوت مانند فیزیک اتمی، فیزیک مولکولی، و فیزیک حالت جامد به دست بدهیم. در این مثالها عمدتاً به جنبه‌های کوانتومی پدیده‌ها توجه می‌کنیم، و غالباً از جزئیات خاصی که در کتابهای تخصصیتر بررسی می‌شوند چشمپوشی خواهیم کرد. هرگاه ممکن باشد، نتایج کوانتومی را با نتایج کلاسیک مقایسه می‌کنیم تا خواننده بتواند ادراک خود را از آثار کوانتومی عمیقتر کند.

این دیدگاه اساساً قیاسی موجب شده است که ما از تکیه کردن بر معرفی تاریخی ایده‌های

مکانیک کوانتومی، یعنی ارائه و بحث واقعیت‌های تجربی‌ای که به رد ایده‌های کلاسیک انجامیده‌اند، خودداری کنیم. بنابراین ناگزیر بوده‌ایم که از روش استقرایی صرف‌نظر کنیم. البته ما هم معتقدیم که در توصیف فیزیک به‌عنوان علمی که به‌خاطر مواجهه دائم با واقعیت‌های تجربی دائماً در حال تکامل است، استفاده از روش استقرایی اهمیت دارد، اما به‌نظر می‌رسد چنین روشی برای یک کتاب درسی فیزیک اتمی یا یک درس مقدماتی فیزیک کوانتومی در سطح پایینتر، مناسبتر باشد. همچنین، ما تماماً از هرگونه اشارات و تعبیرهای فلسفی که درباره مکانیک کوانتومی مطرح شده‌اند خودداری کرده‌ایم. این‌گونه بحثها با آنکه خیلی جالب‌اند (بخش ۵ از کتابشناسی)، به‌نظر ما به‌سطح دیگری تعلق دارند. ما احساس می‌کنیم که پرداختن به این نوع بحثها فقط پس از احاطه بر نظریه "پذیرفته‌شده" مکانیک کوانتومی (که موفقیت‌های آن در تمام زمینه‌های فیزیک و شیمی این پذیرش را ایجاب کرده است) مفید خواهد بود.

مؤلفان

۴

کاربرد اصول موضوع در موردهای ساده:
اسپین ۱/۲ و دستگاههای دوترازه

۱-۴ ذره با اسپین $1/2$: کوانتش
تکانه زاویه‌ای

۱-۱-۴ نمایش تجربی

- الف) دستگاه اشترن-گرلاخ
ب) محاسبه کلاسیکی انحراف
ج) نتایج و نتیجه‌گیریها

۲-۱-۴ توصیف نظری

- الف) مشاهده پذیر S_z و فضای حالت‌های اسپین
ب) مشاهده‌پذیرهای دیگر اسپین

۲-۴ توضیح اصول موضوع در
مورد اسپین $1/2$

- ۱-۲-۴ تهیه واقعی حالت‌های مختلف اسپین
الف) تهیه حالت‌های $|+\rangle$ و $|-\rangle$
ب) تهیه حالت‌های $|z, \pm\rangle$ ، $|y, \pm\rangle$ و
 $|x, \pm\rangle$

ج) تهیه کلی‌ترین حالت

۲-۲-۴ اندازه‌گیرهای اسپین

- الف) نخستین آزمایش
ب) آزمایش دوم
ج) آزمایش سوم
د) اندازه‌های میانگین

۳-۲-۴ تحول اسپین $1/2$ در یک میدان مغناطیسی
یکنواخت

- الف) هامیلتونی برهم‌کنش و معادله شرودینگر
ب) حرکت تقدیمی لارمور

۳-۴ مطالعه کلی از دستگاه‌های
دوترازه

۱-۳-۴ طرح مسئله

الف) نمادگذاری

ب) نتایج جفتیدگی

۲-۳-۴ سیمای ایستا: اثر جفتیدگی روی حالت‌های
مانای دستگاه

الف) عبارت ویژه‌حالت‌ها و ویژه‌مقدارهای H
ب) بحث

ج) کاربرد مهم: پدیده‌های شدید کوانتومی

۳-۳-۴ سیمای ایستا: نوسان دستگاه میان دو حالت
ناپریشیده

الف) تحول بردار حالت

ب) محاسبه $\rho_{12}(t)$ ، فرمول رابی

ج) بحث

د) مثالی واقعی از نوسان میان دو حالت

در این فصل می‌خواهیم اصول موضوع مکانیک کوانتومی را که در فصل سوم (جلد اول ترجمه فارسی همین کتاب) مطرح و توصیف کردیم، توضیح دهیم. ما آنها را در موارد واقعی ساده‌ای که فضای حالتها دارای ابعاد محدود (برابر با دو) است، به‌کار خواهیم بست. سودمندی این مثالها به سادگی ریاضی آنها، که امکان می‌دهد اصول موضوع و نتایج آنها را بهتر درک کنیم، محدود نمی‌شود. این سودمندی دارای اهمیت فیزیکی نیز هست. ما اثرهای نوعاً کوانتومی را توضیح می‌دهیم که می‌توان درستی آنها را به‌طور تجربی تحقیق کرد.

در بخشهای ۱-۴ و ۲-۴، مورد اسپین ۱/۲ را مطالعه خواهیم کرد (که در فصل ۹ به‌طور کاملتر از نو بدان خواهیم پرداخت). نخست یک آزمایش بنیادی را (بخش ۱-۴ تا ۱-۱) توصیف می‌کنیم که امکان داده است تا کوانتش یک کمیت فیزیکی ساده یعنی تکانه زاویه‌ای را آشکار کنیم. خواهیم دید که مؤلفه تکانه زاویه‌ای (یا گشتاور مغناطیسی) یک اتم خنثای پارامغناطیسی در راستای Oz تنها برخی از اندازه‌هایی را می‌پذیرد که به یک مجموعه گسسته تعلق دارند. بدین ترتیب برای یک اتم نقره در حالت پایه، تنها دو مقدار ممکن ($+\hbar/2$ و $-\hbar/2$) برای مؤلفه S_z تکانه زاویه‌ای وجود دارد. می‌گوییم که اتم نقره در حالت پایه ذره‌ای با اسپین ۱/۲ است. سپس (در بخش ۱-۴ تا ۲-۱) مشخص می‌کنیم که مکانیک کوانتومی چگونه "متغیرهای اسپین" چنین ذره‌ای را توصیف می‌کند. در وضعیتهایی که می‌توان از بررسی کوانتومی "متغیرهای خارجی" r و p صرف‌نظر کرد، فضای حالت‌های ذره ("فضای حالت‌های اسپین") تنها دارای دو بعد است. آنگاه می‌توانیم (بخش ۲-۴)، اصول موضوع مکانیک کوانتومی را در این مورد به‌ویژه ساده توضیح داده و بحث کنیم: ابتدا خواهیم دید که چگونه می‌توان، در یک آزمایش واقعی، اتمهای نقره‌ای را تهیه کرد که از پیش دارای حالت اسپین دلخواه از پیش معینی باشند. سپس نشان خواهیم داد که چگونه اندازه‌گیری کمیتهای فیزیکی اسپین بر روی چنان اتمهای نقره امکان می‌دهد تا به‌طور تجربی اصول موضوع مکانیک کوانتومی را تحقیق کرد. سرانجام، با حل معادله شرودینگر متناظر، تحول یک اسپین ۱/۲ را در یک میدان مغناطیسی یکنواخت (حرکت تقدیمی لارمور) مطالعه خواهیم کرد. در پایان ما در بخش ۳-۴ به مطالعه دستگاههای دوترازه خواهیم پرداخت. هرچند این دستگاهها، عموماً دارای اسپین ۱/۲ نیستند، مطالعه آنها به محاسباتی می‌انجامد که به محاسباتی که در بخشهای ۱-۴ و ۲-۴ ارائه شدند، بسیار نزدیک هستند. ما اثریک برپیشیدگی خارجی را بر روی حالت‌های مانای یک دستگاه دوترازه به تفصیل بررسی خواهیم کرد و با این مدل بسیار ساده، اثرهای فیزیکی مهمی را توضیح خواهیم داد.

۱-۴ ذره با اسپین ۱/۲: کوانتش تکانه زاویه‌ای

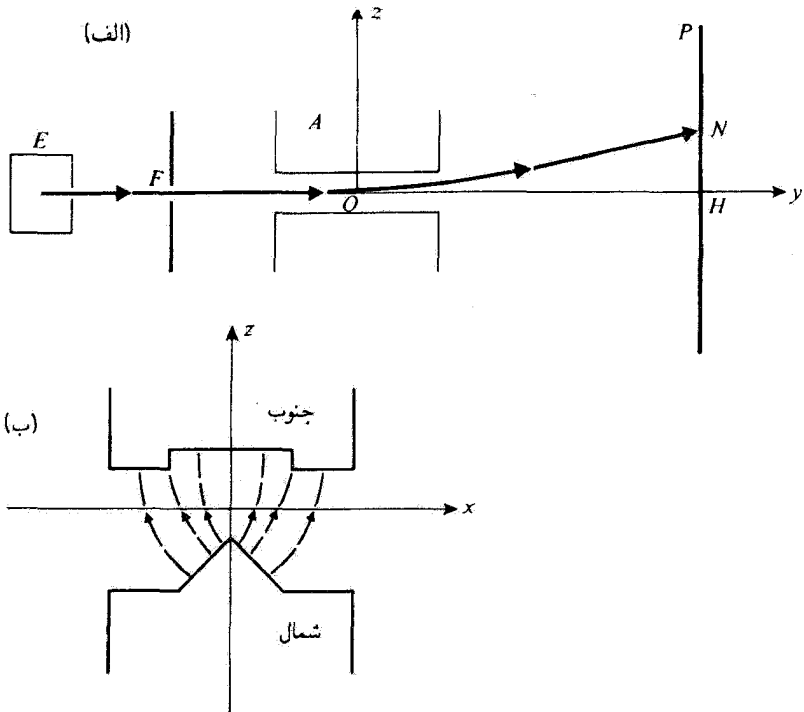
۱-۱-۴ نمایش تجربی

قبل از هر چیز، به توضیح و تحلیل آزمایش اشترن-گرلاخ می‌پردازیم که کوانتش مؤلفه‌های یک

تکانه زاویه‌ای را (که گاهی 'کوانتس فضایی' نامیده می‌شود) نشان می‌دهد.

الف) دستگاه اشترن-گرلاخ

آزمایش عبارت است از بررسی انحراف باریکه‌ای از اتمهای خنثای پارامغناطیسی (در این مورد اتمهای نقره) در یک میدان مغناطیسی به شدت ناهمگن. دستگاههای به کار رفته به طور طرحوار در شکل ۱-۴ نشان داده شده است.^۱



شکل ۱-۴ طرح آزمایش اشترن-گرلاخ. در شکل (الف)، مسیر یک اتم نقره که از محفظه E با دمای بالا گسیل شده، نشان داده شده است. این اتم به وسیله گرادیان میدان مغناطیسی حاصل از آهنربای الکتریکی A منحرف می‌شود و سپس در نقطه N بر روی صفحه P متراکم می‌شود. شکل (ب) برشی از آهنربای الکتریکی را در صفحه xOz نشان می‌دهد. خطوط نیروی مغناطیسی با منحنی خط‌چین نشان داده شده است. B_z مثبت و $\partial B_z / \partial z$ منفی فرض شده است و در نتیجه مسیر روی شکل (الف) متناظر است با یک مؤلفه منفی γ_z . گشتاور مغناطیسی، یعنی با یک مؤلفه مثبت γ_z (برای اتم نقره γ منفی است).

۱. در اینجا فقط مهمترین مشخصه‌های این دستگاهها داده می‌شود. شرح تفصیلی روش تجربی را می‌توان در یک کتاب راجع به فیزیک اتمی یافت.

اتمهای نقره موجود در محفظه E که تا دمای زیاد گرم شده است، از روزه باریکی خارج شده، سپس در خلا ششیدی که در داخل دستگاه حکمفرماست به خط مستقیم منتشر می‌شوند. یک شکاف محدودکننده F اتمهایی را انتخاب می‌کند که سرعت آنها در راستای مشخصی باشد که ما در اینجا محور Oy گرفته‌ایم. باریکه اتمی که بدینسان پدید آمده، پیش از تراکم روی صفحه P ، از میان دو قطب آهنربای الکتریکی A می‌گذرد.

اکنون ویژگیهای میدان مغناطیسی B پدید آمده توسط آهنربای الکتریکی A را مشخص می‌کنیم. این میدان مغناطیسی دارای یک صفحه تقارن (که با Oz نشان می‌دهیم) است که شامل راستای آغازی باریکه اتمی Oy می‌باشد و در میان دو قطب در همه نقاط واقع بر روی هر خط موازی با Oy یکسان است (لبه‌های آهنربا با Oy موازی است و از اثرهای لبه‌ها صرف‌نظر می‌کنیم). B در راستای Oy دارای مؤلفه‌ای نیست. بزرگترین مؤلفه آن در راستای Oz است و با z به شدت تغییر می‌کند. در روی شکل ۱-۴ (ب)، خطوط میدان در نزدیکی قطب شمال فشرده‌تر از نزدیکی قطب جنوب آهنربا هستند. البته چون شار میدان مغناطیسی پایسته است ($\text{div} B = 0$)، باید در راستای Ox نیز دارای مؤلفه‌ای باشد که با فاصله x از صفحه تقارن تغییر می‌کند.

ب) محاسبه کلاسیکی انحراف^۱

قبل از هر چیز باید توجه داشت که اتمهای نقره، به علت خنثی بودن، از نیروی لورنتس متأثر نمی‌شوند. برعکس این اتمها دارای گشتاور مغناطیسی دائمی \mathcal{M} هستند (اینها اتمهای پارامغناطیسی هستند). نیروهای حاصل از این گشتاور، از انرژی پتانسیل زیر مشتق می‌شوند

$$W = -\mathcal{M} \cdot B \quad (1-4)$$

در یک اتم، برای گشتاور مغناطیسی الکترونی \mathcal{M} و تکانه زاویه‌ای \mathcal{L} ، دو منشأ وجود دارد: یکی حرکت الکترونها به دور هسته (که چرخش بارهای مربوط موجب پیدایش گشتاور مغناطیسی مداری است) و دیگری تکانه زاویه‌ای ذاتی با اسپین الکترونها (فصل ۹ را ببینید) که بدان نیز یک گشتاور مغناطیسی اسپین وابسته است. می‌توان نشان داد (و در اینجا بدون اثبات می‌پذیریم) که

۱. در اینجا به ذکر خطوط اصلی این محاسبه بسنده می‌کنیم. خوانندگان می‌توانند برای جزئیات بیشتر به کتابی دربارهٔ فیزیک اتمی مراجعه کنند.

در یک تراز اتمی معین، \mathcal{M} و \mathcal{L} متناسب هستند^۱.

$$\mathcal{M} = \gamma \mathcal{L} \quad (۲-۴)$$

ضریب تناسب γ نسبت ژيرو مغناطیسی تراز مورد نظر نام دارد.

جهت‌گیری گشتاورهای مغناطیسی اتمهای نقره باریکه اتمی، قبل از عبور از آهنربای الکتریکی، کتره‌ای (و همسانگرد) است. اثر میدان مغناطیسی روی یکی از این اتمها را که گشتاور مغناطیسی \mathcal{M} آن هنگام وارد شدن به میان دو قطب دارای راستای معینی است، مطالعه می‌کنیم. از عبارت (۱-۴) انرژی پتانسیل به سادگی چنین برمی‌آید که نیروهای وارد بر اتم دارای برابندی هستند چون

$$\mathbf{F} = \nabla(\mathcal{M} \cdot \mathbf{B}) \quad (۳-۴)$$

(این برابند در صورتی صفر است که میدان \mathbf{B} یکنواخت باشد). گشتاور کل این نیروها نسبت به مکان اتم عبارت است از

$$\mathbf{\Gamma} = \mathcal{M} \times \mathbf{B} \quad (۴-۴)$$

قضیه تکانه زاویه‌ای چنین نوشته می‌شود

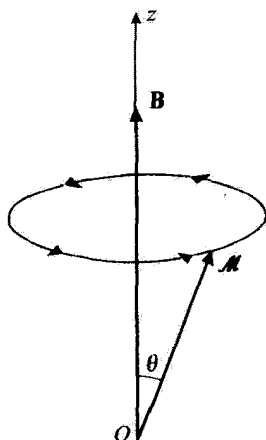
$$\frac{d\mathcal{L}}{dt} = \mathbf{\Gamma} \quad (۵-۴)$$

یعنی

$$\frac{d\mathcal{L}}{dt} = \gamma \mathcal{L} \times \mathbf{B} \quad (۶-۴)$$

بنابراین اتم همانند یک ژيروسکوپ عمل می‌کند (شکل ۲-۴). $d\mathcal{L}/dt$ بر \mathcal{L} عمود است و تکانه زاویه‌ای به دور میدان مغناطیسی به گونه‌ای می‌چرخد که θ زاویه میان \mathcal{L} و \mathbf{B} ثابت می‌ماند.

۱. در مورد اتمهای نقره در حالت پایه‌ای (مانند مورد باریکه اتمی)، تکانه زاویه‌ای \mathcal{L} برابر است با اسپین الکترون خارجی و بنابراین به تنهایی مسؤو وجود گشتاور مغناطیسی \mathcal{M} است. در حقیقت، این الکترون خارجی دارای تکانه زاویه‌ای مداری صفر است. به اضافه، تکانه‌های زاویه‌ای مداری و اسپین مجموعه الکترونهاي داخلی نیز صفر هستند. و سرانجام، شرایط تجربی موجود در عمل به گونه‌ای است که اثرهای مربوط به اسپین هسته ناچیز هستند. از این رو اتم نقره در حالت پایه مانند الکترون، دارای اسپین $1/2$ است.



شکل ۲-۴ اتم نقره دارای یک گشتاور مغناطیسی M و یک تکانه زاویه‌ای \mathcal{L} است که با یکدیگر متناسب‌اند. در نتیجه اثر یک میدان مغناطیسی یکنواخت B عبارت است از چرخاندن M به دور B با سرعت زاویه‌ای ثابت (حرکت تقدیمی لارمور).

سرعت زاویه‌ای چرخش برابر است با حاصلضرب نسبت ژيرو مغناطیسی γ در قدرمطلق میدان مغناطیسی. بنابراین، مؤلفه‌های M عمود بر میدان مغناطیسی پیرامون صفر نوسان می‌کنند، در حالی که مؤلفه موازی با B ثابت می‌ماند.

برای محاسبه نیروی F [رابطه (۳-۴)]، می‌توان با تقریب خوبی در عبارت مربوط به W از جمله‌های متناسب با M_x و M_y صرف‌نظر کرد و M_z را ثابت گرفت. در واقع بسامد نوسان ناشی از چرخش M بزرگتر از آن است که M_x و M_y بتوانند جز با میانگین زمانیشان، که صفر است، نقشی داشته باشند. بنابراین در عمل چنان است که گویی اتم تحت تأثیر تنها نیرویی بدین شکل قرار می‌گیرد

$$F' = \nabla(M_z B_z) = M_z \nabla B_z \quad (7-4)$$

از طرف دیگر، مؤلفه‌های ∇B_z در راستاهای Ox و Oy صفرند: $\partial B_z / \partial y = 0$ زیرا میدان مغناطیسی مستقل از y است (بخش ۱-۴) و در همه نقاط صفحه تقارن Oz ، $\partial B_z / \partial x = 0$ است. بنابراین نیرویی که بر اتم وارد می‌شود موازی با Oz و متناسب با M_z است. چون این نیروست که انحراف HN اتم را به وجود می‌آورد (شکل ۱-۴)، HN با M_z و همچنین با \mathcal{L}_z متناسب است. در نتیجه، اندازه‌گیری HN به اندازه‌گیری M_z و \mathcal{L}_z تبدیل می‌شود.

چون در ورودی میان دو قطب آهنربا، گشتاورهای اتمهای گوناگون به‌طور همسانگرد توزیع

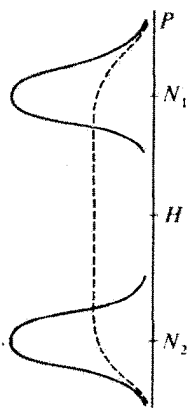
شده‌اند (همه اندازه‌های M_z میان $|M|$ و $|M| -$ وجود دارد)، انتظار می‌رود که باریکه بر روی صفحه P لکه متقارنی نسبت به H بسازد. حدهای بالایی N_1 و پایینی N_2 از این لکه اصولاً با اندازه‌های ماکزیموم $|M|$ و مینیموم $|M| -$ کمیت M_z متناظر هستند. در واقع، پاشیدگی سرعتها و پهناهای محدود شکاف F سبب می‌شود تا اتمهایی که دارای M_z معینی هستند در یک نقطه تمرکز نیابند، بلکه لکه‌ای پیرامون انحراف متناظر با سرعت میانگین پدید آورند.

ج) نتایج و نتیجه‌گیریها

نتایج آزمایش (که برای نخستین بار در ۱۹۲۲ به وسیله اشترن-گرلاخ انجام شد) با پیش‌بینیهای یاد شده در تناقض کامل است.

به جای یک لکه تنهای متمرکز در H ، دو لکه (شکل ۳-۴) متمرکز در N_1 و N_2 متقارن نسبت به H مشاهده می‌شود (پهنای این دو لکه مربوط است به پاشیدگی سرعتها و پهناهای شکاف F). بدین ترتیب، تجربه، ناتوانی پیش‌بینیهای مکانیک کلاسیک را نشان می‌دهد.

اکنون ببینیم چگونه می‌توان این نتایج را تعبیر کرد. در میان کمیتهای فیزیکی وابسته به اتم نقره، از طرفی آنهایی را که با درجه‌های آزادی خارجیشان متناظرند (یعنی تابعی از مکان \mathbf{r} و تکانه



شکل ۳-۴ لکه‌های مشاهده شده در روی صفحه P در آزمایش اشترن-گرلاخ. چون گشتاورهای مغناطیسی M اتمهایی که از محفظه E گسیل می‌شوند به‌طور کتره‌ای در همه راستاهای فضا توزیع می‌شوند، مکانیک کلاسیک پیش‌بینی می‌کند که یک اندازه‌گیری M_z می‌تواند همه اندازه‌های محدود میان $|M|$ و $|M| -$ را با یک احتمال به دست دهد. بنابراین باید تنها یک لکه مشاهده شود (منحنی خط‌چین). در حقیقت، نتایج تجربه کاملاً به گونه دیگری است: دو لکه متمرکز در N_1 و N_2 دیده می‌شود، بدین معنی که یک اندازه‌گیری M_z تنها دو نتیجه ممکن به دست می‌دهد (کوانتومی بودن نتیجه اندازه‌گیری).

ذره با اسپین $1/2$: کوانتش تکانه زاویه‌ای ۱۵

خطی p هستند) و از طرف دیگر آنهایی را که با درجه‌های آزادی داخلیشان (به نام درجه‌های آزادی اسپین) M یا \mathcal{L} متناظرند، می‌توان تمیز داد.

نخست نشان می‌دهیم که در شرایط انجام آزمایش، لازم نیست درجه‌های آزادی خارجی به‌طور کوانتومی بررسی شوند. برای این کار، نشان خواهیم داد که برای توصیف حرکت اتمهای نقره، می‌توان بسته موجهایی ساخت که پهنای Δz و پاشیدگی تکانه Δp_z آنها کاملاً ناچیز باشد. Δz و Δp_z باید در رابطهٔ عدم قطعیت صدق کنند

$$\Delta z \times \Delta p_z \gtrsim \hbar \quad (۸-۴)$$

به‌طور عددی، جرم M یک اتم نقره 10^{-25} kg 1.8×10^{-25} است و از این رو Δz و عدم قطعیت بر روی سرعت $\Delta v_z = \Delta p_z / M$ باید به‌گونه‌ای باشد که

$$\Delta z \times \Delta v_z \gtrsim \frac{\hbar}{M} \simeq 10^{-1} \text{ MKSA} \quad (۹-۴)$$

اکنون ببینیم چه طولها و سرعتهایی در این مسئله وارد می‌شوند؟ پهنای شکاف F حدود 1 mm و جدایی $N_1 N_2$ میان دو لکه حدود چند میلیمتر است. فاصله‌ای که در آن میدان مغناطیسی به‌طور قابل ملاحظه‌ای تغییر می‌کند را می‌توان از اندازه‌های میدان در وسط گاف هوا ($B \simeq 10^4 \text{ G}$) و گرادیان آن ($\partial B / \partial z \simeq 10^5 \text{ G/cm}$) نتیجه گرفت که می‌دهد $B / \partial B / \partial z \simeq 1 \text{ mm}$. از طرف دیگر، سرعت اتمهای نقره‌ای که از کوره در دمای مطلق 1000 K خارج می‌شوند حدود 500 m/s است. هر اندازه باریکه به‌طور دقیق تعریف شده باشد، پاشیدگی سرعت در راستای Oz خیلی کمتر از چند متر بر ثانیه نخواهد بود. سرانجام به‌سادگی می‌توان یافت که عدم قطعیت‌های Δz و Δv_z ، ضمن پیروی از رابطهٔ (۹-۴)، در مقیاس آزمایشی که در نظر می‌گیریم، ناچیز هستند. بنابراین تا آنجا که به متغیرهای خارجی \mathbf{r} و \mathbf{p} هر اتم مربوط است، لزومی ندارد که در اینجا از مکانیک کوانتومی استمداد جست و می‌توان بر پایهٔ بسته‌های موج نقطه‌ای مانند که در طول مسیرهای کلاسیک جابه‌جا می‌شوند استدلال کرد. در نتیجه تأیید اینکه اندازه‌گیری انحراف HN ، یک نوع اندازه‌گیری M_z و \mathcal{L}_z است، تأیید درستی است.

در این صورت، نتایج آزمایش الزاماً ما را به نتیجه‌گیری زیر راهنمایی می‌کند: اگر مؤلفهٔ \mathcal{L}_z تکانهٔ زاویه‌ای ذاتی یک اتم نقره در حالت پایه اندازه‌گیری شود، فقط یکی از اندازه‌های متناظر با انحرافهای HN_1 و HN_2 را می‌توان به‌دست آورد. بنابراین ناگزیر باید تصویر کلاسیک یک بردار \mathcal{L} را، که θ زاویهٔ آن با میدان مغناطیسی می‌تواند هر اندازه‌ای را بپذیرد، به کنار گذارد. \mathcal{L}_z یک کمیت فیزیکی کوانتیده است که طیف گسستهٔ آن تنها شامل دو ویژه‌مقدار است. هنگامی که نظریهٔ

کوانتومی تکانه زاویه‌ای را مطالعه می‌کنیم (فصل ۶ را ببینید)، خواهیم دید که این ویژه‌مقدارها $+\hbar/2$ و $-\hbar/2$ هستند. در اینجا این واقعیت را می‌پذیریم و می‌گوییم که اسپین اتم نقره در حالت پایه برابر $1/2$ است.

۴-۲ توصیف نظری

اکنون مشخص می‌کنیم که چگونه مکانیک کوانتومی درجه‌های آزادی یک اتم نقره، یعنی ذره‌ای با اسپین $1/2$ را توصیف می‌کند.

ما هنوز عناصر لازم برای عرضه کردن یک نظریه قیاسی و دقیق برای اسپین $1/2$ در اختیار نداریم. چنین بررسی در فصل ۹، در چارچوب نظریه عمومی تکانه زاویه‌ای انجام خواهد شد. بنابراین در اینجا ناگزیر هستیم تعداد اندکی از نتایج را، که در فصل ۹ ثابت خواهد شد، بدون استدلال بپذیریم. چنین دیدگاهی توسط این واقعیت توجیه می‌شود که هدف اساسی این فصل آموزش به‌کار بردن صورتبندی مکانیک کوانتومی در موردی ساده و ملموس است نه تأکید بر سیمای تکانه زاویه‌ای اسپین $1/2$. منظور ارائه مثالهای دقیقی از کتها و مشاهده‌پذیرهاست، و نشان دادن اینکه چگونه پیش‌بینیهای فیزیکی از آنها به‌دست می‌آید، و آموختن اینکه چگونه مرحله‌های مختلف یک آزمایش (تهیه، تحول، اندازه‌گیری) را از یکدیگر به‌خوبی تمیز دهیم.

در فصل سوم (جلد اول ترجمه فارسی همین کتاب) دیدیم که به هر کمیت فیزیکی قابل اندازه‌گیری، در مکانیک کوانتومی یک مشاهده‌پذیر، یعنی یک عملگر هرمیتی، وابسته است که ویژه‌بردارهای آن می‌توانند در فضای حالتها، یک پایه تشکیل دهند. بنابراین، باید مشخص کنیم که فضای حالتها چیست و مشاهده‌پذیرهای متناظر یا مؤلفه‌های \mathcal{L} (\mathcal{L}_x ، \mathcal{L}_y ، \mathcal{L}_z) و به‌طور کلی $\mathcal{L} \cdot \mathbf{u} = \mathcal{L}_u$ که در آن \mathbf{u} بردار یکه دلخواهی است) که بنابر بخش ۴-۱ می‌دانیم قابل اندازه‌گیری هستند، کدام‌اند.

الف) مشاهده‌پذیر S_z و فضای حالتهای اسپین

به \mathcal{L}_z باید یک مشاهده‌پذیر S_z نسبت داد، که بنابر نتایج آزمایش مشروح در بخش ۴-۱ دارای دو ویژه‌مقدار $+\hbar/2$ و $-\hbar/2$ است. می‌توان پذیرفت (فصل ۹ را ببینید) که این دو ویژه‌مقدار واکن نیستند. ما ویژه‌بردارهای راست‌هنجار متناظر آنها را با $|+\rangle$ و $|-\rangle$ نشان می‌دهیم

$$\begin{cases} S_z |+\rangle = +\frac{\hbar}{2} |+\rangle \\ S_z |-\rangle = -\frac{\hbar}{2} |-\rangle \end{cases} \quad (10-4)$$

$$\begin{cases} \langle + | + \rangle = \langle - | - \rangle = 1 \\ \langle + | - \rangle = 0 \end{cases} \quad (11-4)$$

پس S_z به تنهایی یک مجموعه کامل مشاهده‌پذیر جابه‌جایی‌پذیر تشکیل می‌دهد و فضای حالت‌های اسپین، فضای دوبعدی \mathcal{E}_S است که توسط ویژه‌بردارهای $|+\rangle$ و $|-\rangle$ بیان می‌شود. این واقعیت که این دو بردار در \mathcal{E}_S تشکیل یک پایه می‌دهند، با رابطه بستاری زیر بیان می‌شود

$$|+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -| = \mathbb{1} \quad (12-4)$$

کلی‌ترین بردار (به‌نجار شده) \mathcal{E}_S یک برهم‌نهی خطی از $|+\rangle$ و $|-\rangle$ است

$$|\psi\rangle = \alpha |+\rangle + \beta |-\rangle \quad (13-4)$$

با

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (14-4)$$

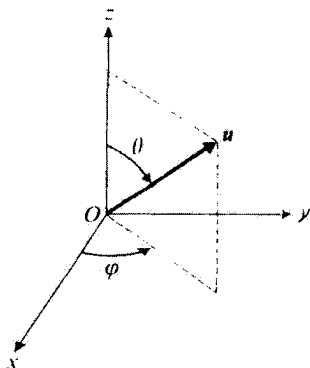
روشن است که ماتریس نماینده S_z در پایه $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ قطری است و چنین نوشته می‌شود

$$(S_z) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (15-4)$$

ب) مشاهده‌پذیرهای دیگر اسپین

به مؤلفه‌های L_x و L_y از \mathcal{L} مشاهده‌پذیرهای S_x و S_y وابسته هستند. عملگرهای S_x و S_y باید در پایه $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ با ماتریسهای هرمیتی 2×2 نمایش داده شوند.

در فصل ۶ خواهیم دید که در مکانیک کوانتومی، سه مؤلفه تکانه زاویه‌ای با یکدیگر جابه‌جا نمی‌شوند، ولی از روابط جابه‌جایی معینی پیروی می‌کنند. این موضوع امکان خواهد داد تا نشان دهیم که در مورد اسپین ۱/۲ که در اینجا مورد توجه ماست، ماتریسهای نماینده S_x و S_y در پایه



شکل ۴-۴ تعریف زاویه‌های قطبی θ و φ که بردار یکه \mathbf{u} را مشخص می‌کند.

ویژه بردارهای $(+)$ و $(-)$ مربوط به S_z ، عبارت‌اند از

$$(S_x) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (16-4)$$

$$(S_y) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (17-4)$$

این نتیجه را در وضع حاضر می‌پذیریم.

مؤلفه \mathcal{L}_u بردار \mathcal{L} در راستای یک بردار یکه \mathbf{u} که با زاویه‌های قطبی θ و φ مشخص می‌شود (شکل ۴-۴) چنین نوشته می‌شود

$$\mathcal{L}_u = \mathcal{L} \cdot \mathbf{u} = \mathcal{L}_x \sin \theta \cos \varphi + \mathcal{L}_y \sin \theta \sin \varphi + \mathcal{L}_z \cos \theta \quad (18-4)$$

با به‌کار بردن (۱۵-۴)، (۱۶-۴)، و (۱۷-۴)، به‌سادگی ماتریس نماینده مشاهده‌پذیر متناظر $S_u = \mathbf{S} \cdot \mathbf{u}$ در پایه $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ به‌دست می‌آید

$$\begin{aligned} (S_u) &= (S_x) \sin \theta \cos \varphi + (S_y) \sin \theta \sin \varphi + (S_z) \cos \theta \\ &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (19-4)$$

در ادامه بحث نیاز خواهیم داشت که ویژه‌مقادیرها و ویژه‌بردارهای مشاهده‌پذیرهای S_y ، S_x ، و

S_u را بشناسیم. محاسبه‌هایی که امکان می‌دهد آنها را از ماتریسهای (۴-۱۶)، (۴-۱۷)، و (۴-۱۹) به دست آوریم، با مشکلاتی همراه نیستند و ما در اینجا تنها نتایج آنها را می‌دهیم.

عملگرهای S_x ، S_y ، و S_u همانند S_z دارای ویژه‌مقدارهای $+\hbar/2$ و $-\hbar/2$ هستند. این نتیجه از نظر فیزیکی قانع‌کننده است. در حقیقت می‌توان مجموعه دستگاه اشترن-گِراخ را به گونه‌ای چرخاند تا محوری که به وسیله میدان مغناطیسی تعریف می‌شود، با Ox ، Oy ، و یا u موازی باشد. چون همه راستاها در فضا دارای خواص یکسانی هستند، پدیده‌های مشاهده شده روی صفحه دستگاه باید در چنین چرخشهایی بی‌تغییر بمانند. بنابراین اندازه‌گیری S_x ، S_y ، یا S_u نمی‌تواند جزئیکی از نتایج $+\hbar/2$ و $-\hbar/2$ را به دست دهد.

اما در مورد ویژه‌بردارهای عملگرهای S_x ، S_y ، و S_u ، آنها را به ترتیب با $|\pm\rangle_x$ ، $|\pm\rangle_y$ ، و $|\pm\rangle_u$ نشان می‌دهیم (علامت داخل کت همان علامت ویژه‌مقدار متناظر است). بسط آنها بر روی پایه ویژه‌بردارهای $|\pm\rangle$ عملگر S_z چنین نوشته می‌شود

$$|\pm\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+\rangle \pm |-\rangle] \quad (۴-۲۰)$$

$$|\pm\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+\rangle \pm i|-\rangle] \quad (۴-۲۱)$$

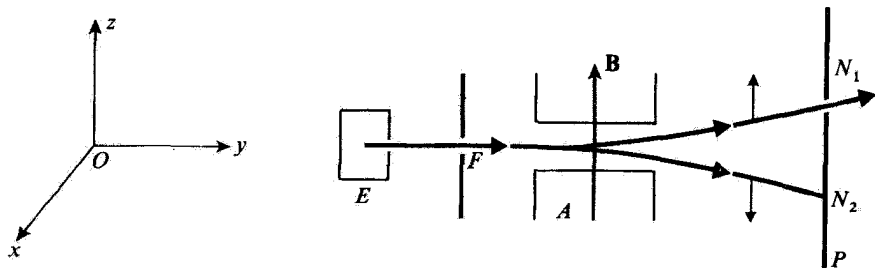
$$\begin{cases} |+\rangle_u = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} |-\rangle & (۴-۲۲ \text{ الف}) \\ |-\rangle_u = -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} |+\rangle + \cos \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} |-\rangle & (۴-۲۲ \text{ ب}) \end{cases}$$

۴-۲ توضیح اصول موضوع در مورد اسپین ۱/۲

با استفاده از صورتبندی که اندکی پیش شرح داده شد، اکنون اصول موضوع مکانیک کوانتومی را در مورد تعدادی آزمایش بر روی اتم نقره با دستگاه اشترن-گِراخ که واقعاً انجام‌پذیر هستند، به کار خواهیم بست. بدینسان خواهیم توانست پیامدهای این اصول را در موردی ملموس بحث کنیم.

۴-۲-۱ تهیه واقعی حالت‌های مختلف اسپین

برای آنکه بتوان درباره نتایج یک اندازه‌گیری پیش‌بینی‌هایی کرد، لازم است حالت دستگاه (در اینجا اسپین اتم نقره) را درست پیش از اندازه‌گیری بشناسیم. خواهیم دید چگونه می‌توان واقعاً باریکه‌ای از اتمهای نقره تهیه کرد که همگی آنها در یک حالت اسپین معین باشند.



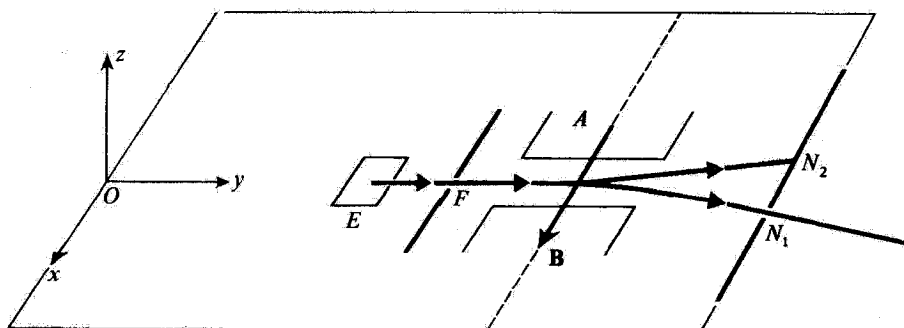
شکل ۴-۵ هنگامی که سوراخی در صفحه P در محل لکه N_1 تعبیه می‌شود، اتمهایی که از این سوراخ عبور می‌کنند همه در حالت اسپین (+) قرار دارند. دستگاه اشترن-گرلاخ در این صورت مانند یک قطبی‌کننده عمل می‌کند.

الف) تهیه حالت‌های (+) و (-)

فرض کنیم در صفحه P دستگاهی که در شکل ۴-۱ (الف) نشان داده شده است، سوراخی در محل لکه متمرکز در N_1 (شکل ۴-۳) تعبیه شود. اتمهایی که به طرف پایین منحرف می‌شوند همچنان اطراف N_2 متمرکز می‌شوند، در حالی که برخی از آنها که به طرف بالا منحرف شده‌اند از صفحه P عبور می‌کنند (شکل ۴-۵). هریک از اتمهای باریکه که به طرف راست صفحه می‌رود، یک دستگاه فیزیکی است که بر روی آن یک اندازه‌گیری از مشاهده‌پذیر S_z انجام شده و نتیجه آن $+\hbar/2$ است. بنابر پنجمین اصل موضوع فصل سوم (جلد اول ترجمه فارسی همین کتاب)، این اتم در ویژه‌حالت متناظر با این نتیجه، یعنی در حالت (+) قرار دارد (چون S_z به تهایبی یک مجموعه کامل مشاهده‌پذیر جابه‌جایی‌پذیر تشکیل می‌دهد، نتیجه اندازه‌گیری برای تعیین حالت دستگاه پس از اندازه‌گیری کافی است). پس دستگاه شکل ۴-۵ یک باریکه از اتمهایی را به دست می‌دهد که همه در حالت اسپین (+) هستند. این دستگاه همانند یک "قطبی‌کننده اتمی" عمل می‌کند، زیرا کار آن بر روی اتمها همانند عمل یک قطبی‌کننده معمولی بر روی فوتونهاست. روشن است برای به دست آوردن باریکه‌ای که همه اتمهایش در حالت اسپین (-) باشند، کافی است سوراخ روی صفحه به جای N_1 در حوالی N_2 تعبیه شود.

ب) تهیه حالت‌های $S_x = \pm \hbar/2$ ، $S_y = \pm \hbar/2$ و $S_z = \pm \hbar/2$

مشاهده‌پذیر S_x نیز یک مجموعه کامل مشاهده‌پذیر جابه‌جایی‌پذیر است، زیرا که هیچ‌یک از ویژه‌مقدارهای آن واگن نیست. بنابراین برای تهیه یکی از ویژه‌حالت‌های آن کافی است بعد از یک اندازه‌گیری S_x ، اتمهایی را انتخاب کنیم که این اندازه‌گیری برای آنها ویژه‌مقدار متناظر را داده است. در عمل اگر بر روی دستگاه شکل ۴-۵ چرخشی برابر با $\pi/2$ به دور محور Oy انجام دهیم، یک باریکه اتمی به دست خواهیم آورد که حالت اسپین آن $S_x = +\hbar/2$ خواهد بود (شکل ۴-۶).



شکل ۴-۶ با چرخاندن دستگاه شکل ۴-۵ به اندازه 90° به دور محور Oy ، یک قطبی‌کننده به دست می‌آید که اتمها را در حالت اسپین u $|+\rangle$ آماده می‌سازد.

این روش را می‌توان بی‌درنگ تعمیم داد: با قرار دادن دستگاه اشترن-گرلاخ به گونه‌ای که محور میدان مغناطیسی با یک بردار یکه u دلخواه موازی باشد و با سوراخ کردن صفحه خواه در N_1 و خواه در N_2 ، اتمهای نقره‌ای در حالت اسپین u $|+\rangle$ یا u $|-\rangle$ به دست می‌آید.^۱

ج) تهیه کلی‌ترین حالت

پیش از این دیدیم که عمومی‌ترین کیت (بهنجار شده) فضای حالت‌های اسپین بدین شکل است

$$|\psi\rangle = \alpha |+\rangle + \beta |-\rangle \quad (۲۳-۴)$$

با

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (۲۴-۴)$$

آیا می‌توان اتمهایی را تهیه کرد که حالت اسپین آنها با کیت $|\psi\rangle$ متناظر توصیف شود؟ نشان خواهیم داد که $|\psi\rangle$ هر چه باشد، همواره یک بردار یکه u به گونه‌ای وجود دارد که $|\psi\rangle$ با u $|+\psi\rangle$ هم‌راستا باشد. بنابراین دو عدد مختلط α و β برمی‌گزینیم که در رابطه (۲۴-۴) صدق می‌کنند ولی از هر نظر دیگر دلخواه هستند. با در نظر گرفتن (۲۴-۴)، ناگزیر یک زاویه θ

۱. راستای باریکه اتمی دیگر الزاماً محور Oy نیست، ولی این مسئله در ارتباط با آنچه که در اینجا مورد نظر است دارای هیچ‌گونه اهمیتی نیست.

به گونه‌ای وجود دارد که

$$\begin{cases} \cos \frac{\theta}{\varphi} = |\alpha| \\ \sin \frac{\theta}{\varphi} = |\beta| \end{cases} \quad (25-4)$$

اگر اضافه بر این θ را چنین مقید کنیم

$$0 \leq \theta \leq \pi \quad (26-4)$$

معادله $|\beta/\alpha| = \tan \theta/2$ زاویه θ را به گونه‌ای یکتا، مشخص می‌کند. از پیش می‌دانیم که فازهای α و β تنها توسط تفاضل خود در پیش‌بینیهای فیزیکی دخالت دارند. از این رو قرار می‌دهیم

$$\varphi = \text{Arg} \beta - \text{Arg} \alpha \quad (27-4)$$

$$\chi = \text{Arg} \beta + \text{Arg} \alpha \quad (28-4)$$

در این صورت داریم

$$\begin{aligned} \text{Arg} \beta &= \frac{1}{\varphi} \chi + \frac{1}{\varphi} \varphi \\ \text{Arg} \alpha &= \frac{1}{\varphi} \chi - \frac{1}{\varphi} \varphi \end{aligned} \quad (29-4)$$

با این نمادگذاریها، $|\psi\rangle$ چنین نوشته می‌شود

$$|\psi\rangle = e^{i\chi/2} \left[\cos \frac{\theta}{\varphi} e^{-i\varphi/2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{\varphi} e^{i\varphi/2} |-\rangle \right] \quad (30-4)$$

اگر این عبارت را با رابطه (۲۲-۴) الف) مقایسه کنیم، دیده می‌شود که $|\psi\rangle$ ، جز در ضریب $e^{i\chi/2}$ که بدون معنی فیزیکی است، با کیت $|+\rangle$ (مربوط به بردار یکه u که توسط زاویه‌های θ و φ مشخص می‌شود) اختلافی ندارد.

در نتیجه برای تهیه اتمهای نقره در حالت $|\psi\rangle$ ، کافی است دستگاه اشترن-گرلاخ (با صفحه سوراخ شده در N_1) را چنان قرار دهیم که محور آن در راستای بردار u که زاویه‌های قطبی α و β آن با رابطه‌های (۲۵-۴) و (۲۷-۴) تعیین می‌شوند، باشد.

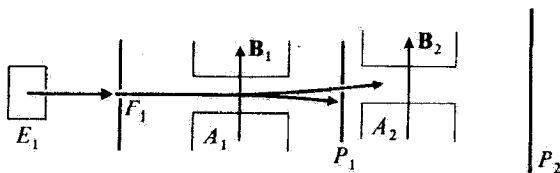
۴-۲-۲ اندازه‌گیری‌های اسپین

در بخش ۱-۴ دیده شد که به‌کمک یک دستگاه اشترن-گرلاخ می‌توان مؤلفهٔ تکانهٔ زاویه‌ای S_z اتمهای نقره را روی یک محور داده شده، اندازه‌گیری کرد. در بخش ۴-۲-۱ یادآوری شد که دستگاهی از این نوع را می‌توان برای تهیهٔ یک باریکهٔ اتمی در حالت اسپین داده شده‌ای، به‌کار برد. در نتیجه با قرار دادن دو آهنربای اشترن-گرلاخ به دنبال یکدیگر می‌توان پیش‌بینی‌های حاصل از اصول موضوع را، به‌طور تجربی تحقیق کرد. نخستین دستگاه به‌صورت "قطبی‌کننده" عمل می‌کند: باریکه‌ای که از آن خارج می‌شود از تعداد زیادی اتمهای نقره تشکیل شده است که همگی در یک حالت اسپین قرار دارند. این باریکه سپس به دستگاه دوم که برای اندازه‌گیری یک مؤلفهٔ معین تکانهٔ زاویه‌ای S_z به‌کار می‌رود، داده می‌شود: این دستگاه به گونه‌ای "تجزیه‌گر" است [به تشابه آن با آزمایش اپتیکی که در بخش A-۳ فصل اول (جلد اول ترجمهٔ فارسی همین کتاب) شرح داده شد، توجه کنید]. در این بخش فرض خواهد شد که حالت اسپین اتمها در فاصلهٔ بین خروج از "قطبی‌کننده" و ورود به "تجزیه‌گر" یعنی بین تهیه و اندازه‌گیری، تحولی نمی‌یابد. به‌سادگی می‌توان از این فرض در گذشت، کافی است معادلهٔ شرودینگر را برای تعیین تحول اسپین، میان لحظه‌های تهیه و اندازه‌گیری به کار برد (بخش ۴-۲-۳).

الف) نخستین آزمایش

محورهای دو دستگاه را موازی با Oz اختیار می‌کنیم (شکل ۴-۷)، نخستین دستگاه اتمها را به حالت $(+)$ می‌برد و دومی S_z را اندازه‌گیری می‌کند. بر روی صفحهٔ دستگاه دوم چه دیده می‌شود؟

چون حالتی که دستگاه مورد مطالعه در آن قرار دارد یک ویژه‌حالت مشاهده‌پذیر S_z است که اندازه‌گیری آن مورد نظر است، اصول موضوع بیان می‌کنند که نتیجهٔ اندازه‌گیری قطعی است: با



شکل ۴-۷. دستگاه اول (قطبی‌کننده شامل کوره E_1 ، شکاف F_1 ، آهنربای A_1 و صفحهٔ سوراخ‌دار P_1) اتمها را در حالت $(+)$ می‌برد. دستگاه دوم (تجزیه‌گر شامل آهنربای A_2 و صفحهٔ P_2) S_z را اندازه‌گیری می‌کند. نتیجهٔ به‌دست آمده $(+1/2)$ قطعی است.

اطمینان ویژه مقدار متناظر $(+\hbar/2)$ به دست خواهد آمد. در نتیجه، تمام اتمهای باریکه باید روی صفحه دستگاه دوم، به صورت تنها یک لکه، یعنی لکه مربوط به $+\hbar/2$ ، متراکم شوند. این درست همان است که به طور تجربی دیده می شود. همه اتمها با صفحه دوم در اطراف N_1 برخورد می کنند و هیچ کدام به نزدیکی N_2 نمی رسد.

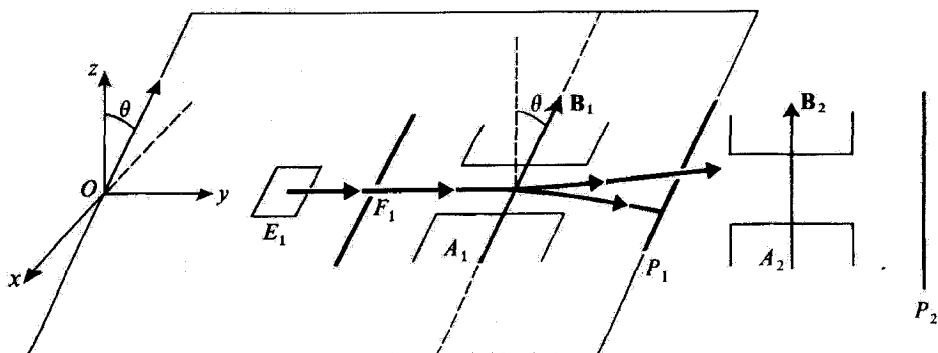
(ب) آزمایش دوم

اکنون محور دستگاه نخست را در راستای بردار یکه \mathbf{u} با زاویه های قطبی θ و $\varphi = 0$ قرار می دهیم (پس \mathbf{u} در صفحه xOz است). محور دستگاه دوم در راستای Oz باقی می ماند (شکل ۴-۸). بنابر (۴-۲۲ الف)، حالت اسپین اتمها در خروجی "قطبی کننده" چنین است

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle \quad (4-31)$$

"تجزیه گر" \mathcal{L}_z این اتمها را اندازه گیری می کند. نتایج به چه صورتی است؟

این بار دیده می شود که، هر چند همگی اتمها به یک طریق تهیه شده اند، برخی از آنها در N_1 و برخی در N_2 متراکم می شوند. به هنگام فرایند اندازه گیری، در رفتار هر یک از اتمها که جدا جدا در نظر گرفته شوند عدم قطعیت وجود دارد. اصل موضوع تجزیه طیفی تنها می تواند احتمالی را که هر اتم برای رسیدن به N_1 یا N_2 داراست، پیش بینی کند. چون (۴-۳۱) گسترش حالت اسپین یک اتم را برحسب حالت های مشاهده پذیری که اندازه می گیریم به دست می دهد، بی درنگ محاسبه نشان می دهد که این احتمالها به ترتیب برابرند با $\cos^2 \theta/2$ و $\sin^2 \theta/2$. در واقع، هنگامی که



شکل ۴-۸ دستگاه نخست اسپینها را در حالت $|+\rangle$ می برد (\mathbf{u} بردار یکه در صفحه xOz است که با Oz دارای زاویه θ است)، و دستگاه دوم \mathcal{L}_z را اندازه می گیرد. نتایج ممکن عبارتند از $+\hbar/2$ (با احتمال $\cos^2 \theta/2$) و $-\hbar/2$ (با احتمال $\sin^2 \theta/2$).

تعداد کافی اتم روی صفحه متراکم شود، دیده می‌شود که شدت در لکه‌های N_1 و N_2 متناظر با تعداد اتمهاست که به ترتیب با $\cos^2 \theta/2$ و $\sin^2 \theta/2$ متناسب‌اند.

یادداشت:

بنابراین اندازه زاویه θ هر چه باشد (جز درست 0° یا π)، در جریان یک اندازه‌گیری S_z ، همواره می‌توان به دو نتیجه $+\hbar/2$ و $-\hbar/2$ دست یافت. این پیش‌بینی می‌تواند تا حدی تناقض‌آمیز به نظر رسد. برای مثال اگر θ خیلی کوچک باشد، اسپین در خروجی دستگاه نخست در راستایی که عملاً همان Oz است واقع می‌شود. با وجود این، به هنگام یک اندازه‌گیری S_z می‌توان $-\hbar/2$ را درست به مانند $+\hbar/2$ به دست آورد (در حالی که بنابر مکانیک کلاسیک، نتیجه اندازه‌گیری $+\hbar/2 \cos \theta \simeq \hbar/2$ است). با این همه، هرچه θ کوچکتر باشد احتمال به دست آوردن $-\hbar/2$ کمتر است. به اضافه، بعد خواهیم دید [رابطه (۴-۳۳)] که اندازه میانگین نتایجی که از شمار زیادی آزمایش یکسان به دست می‌آید، برابر $\langle S_z \rangle = \hbar/2 \cos \theta$ است که به خوبی با نتایج کلاسیک متناظر است.

ج) آزمایش سوم

یک "قطبی‌کننده" را که، همانند قسمت ب اتمها را به حالت (۴-۳۱) می‌برد در نظر می‌گیریم و "تجزیه‌گر" را چنان می‌چرخانیم که محور آن در راستای Ox قرار گیرد، یعنی به ترتیبی که مؤلفه S_x تکانه زاویه‌ای را اندازه بگیرد.

برای محاسبه پیش‌بینی‌هایی که اصول موضوع در این مورد عرضه می‌کنند، باید حالت (۴-۳۱) را روی ویژه‌حالت‌های مشاهده‌پذیر S_x [رابطه (۴-۲۰)] بسط داد. به آسانی نتیجه می‌گیریم

$$\begin{cases} {}_x\langle + | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\cos \frac{\theta}{2} + \sin \frac{\theta}{2} \right) = \cos \left(\frac{\pi}{4} - \frac{\theta}{2} \right) \\ {}_x\langle - | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\cos \frac{\theta}{2} - \sin \frac{\theta}{2} \right) = \sin \left(\frac{\pi}{4} - \frac{\theta}{2} \right) \end{cases} \quad (۴-۳۲)$$

بنابراین احتمال یافتن اندازه $+\hbar/2$ برای مؤلفه S_x برابر $\cos^2(\pi/4 - \theta/2)$ و احتمال یافتن $-\hbar/2$ برابر $\sin^2(\pi/4 - \theta/2)$ است.

با اندازه‌گیری شدت دو لکه روی صفحه واقع در خروجی دستگاه دوم اشترن-گرلاخ، در عمل می‌توان این پیش‌بینیها را تحقیق کرد.

یادداشت:

این واقعیت که در اینجا زاویه $(\pi/4 - \theta/2)$ وارد می‌شود، تعجب‌آور نیست: در قسمت ب

زاویهٔ محورهای دو دستگاه برابر θ بود که بعد از چرخش دستگاه دوم برابر $(\pi/2 - \theta)$ شده است.

د) اندازه‌های میانگین

در شرایط قسمت ب، به‌طور تجربی درمی‌یابیم که در مورد تعداد زیاد \mathcal{N} اتم، $\mathcal{N} \cos^2 \theta/2$ اتم به نقطه N_1 و $\mathcal{N} \sin^2 \theta/2$ اتم به نقطه N_2 می‌رسد. بنابراین، اندازه‌گیری \mathcal{L}_z برای هریک از اتمهای نخست $+\hbar/2$ و برای هریک از اتمهای دیگر $-\hbar/2$ را به‌دست می‌دهد. اگر اندازهٔ میانگین این نتایج را حساب کنیم، چنین به‌دست می‌آید

$$\begin{aligned} \langle S_z \rangle &= \frac{1}{\mathcal{N}} \left[\frac{\hbar}{2} \times \mathcal{N} \cos^2 \frac{\theta}{2} - \frac{\hbar}{2} \times \mathcal{N} \sin^2 \frac{\theta}{2} \right] \\ &= \frac{\hbar}{2} \cos \theta \end{aligned} \quad (۳۳-۴)$$

به‌سادگی می‌توان به کمک رابطه‌های (۳۱-۴) و (۱۰-۴) تحقیق کرد که این درست اندازهٔ عنصر ماتریس $\langle \psi | S_z | \psi \rangle$ است.

به همین‌گونه، میانگین نتایج اندازه‌گیری آزمایش قسمت ج عبارت است از

$$\begin{aligned} \langle S_x \rangle &= \frac{1}{\mathcal{N}} \left[\frac{\hbar}{2} \times \mathcal{N} \cos^2 \left(\frac{\pi}{4} - \frac{\theta}{2} \right) - \frac{\hbar}{2} \times \mathcal{N} \sin^2 \left(\frac{\pi}{4} - \frac{\theta}{2} \right) \right] \\ &= \frac{\hbar}{2} \sin \theta \end{aligned} \quad (۳۴-۴)$$

برای محاسبهٔ عنصر ماتریس $\langle \psi | S_x | \psi \rangle$ ، می‌توان ماتریس (۱۶-۴)، نمایندهٔ S_x در پایه $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ را به‌کار برد. در این پایه، کت $|\psi\rangle$ با بردار ستونی $\begin{pmatrix} \cos \theta/2 \\ \sin \theta/2 \end{pmatrix}$ و برای $|\psi\rangle$ با بردار ستوری متناظر نمایش داده می‌شود. بنابراین خواهیم داشت

$$\begin{aligned} \langle \psi | S_x | \psi \rangle &= \frac{\hbar}{2} (\cos \theta/2 \quad \sin \theta/2) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta/2 \\ \sin \theta/2 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2} \sin \theta \end{aligned} \quad (۳۵-۴)$$

اندازهٔ میانگین \mathcal{L}_x در واقع برابر با عنصر ماتریس مشاهده‌پذیر S_x وابسته در حالت $|\psi\rangle$ است.

باید یادآور شد که اگر تکانه زاویه‌ای کلاسیک با قدرمطلق $\hbar/2$ در راستای محور "قطبی‌کننده" مورد نظر باشد مؤلفه‌های آن در راستای Ox و Oz دقیقاً $\hbar/2 \sin \theta$ و $\hbar/2 \cos \theta$ خواهد بود. به‌طور کلی‌تر، اگر اندازه‌های میانگین S_x ، S_y و S_z در حالت $|u\rangle$ [با همان روش مذکور در (۴-۳۵)] محاسبه شود [رابطه (۴-۲۲ الف)]، چنین به‌دست خواهد آمد

$$\begin{aligned} \langle u | S_x | u \rangle &= \frac{\hbar}{2} \sin \theta \cos \varphi \\ \langle u | S_y | u \rangle &= \frac{\hbar}{2} \sin \theta \sin \varphi \\ \langle u | S_z | u \rangle &= \frac{\hbar}{2} \cos \theta \end{aligned} \quad (۴-۳۶)$$

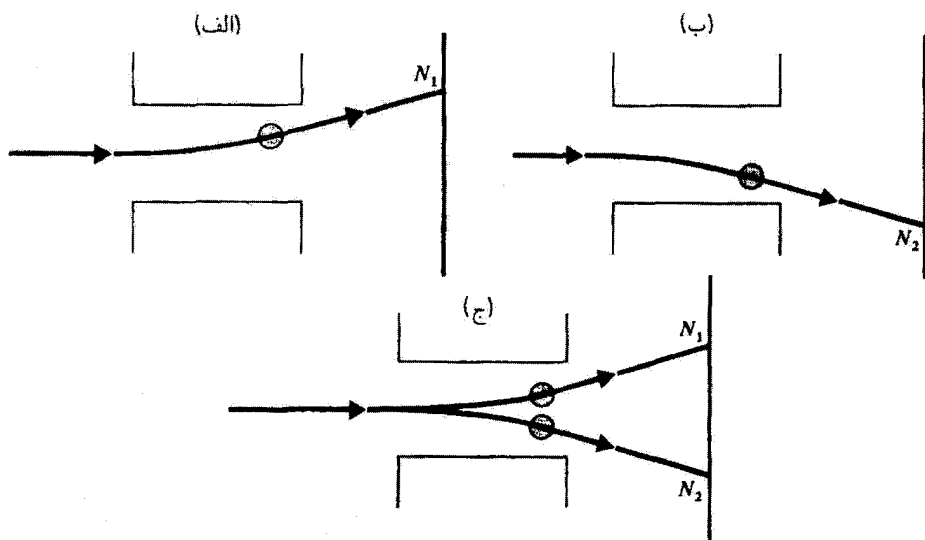
این اندازه‌های میانگین برابر با مؤلفه‌های یک تکانه زاویه‌ای کلاسیک با قدرمطلق $\hbar/2$ است که در راستای بردار u با زاویه‌های قطبی θ و φ قرار داشته باشد. بنابراین، در اینجا نیز می‌توان به‌وسیله اندازه‌های میانگین، میان مکانیک کلاسیک و مکانیک کوانتومی ارتباطی برقرار ساخت. با این‌همه، نباید از نظر دور داشت که به‌عنوان مثال، اندازه‌گیری S_x در یک اتم مشخص، هیچ‌گاه $\hbar/2 \sin \theta \cos \varphi$ را به‌دست نخواهد داد: تنها نتایجی که می‌توان به‌دست‌آورد عبارت‌اند از $\hbar/2$ و $-\hbar/2$. با میانگین گرفتن از مقدارهای به‌دست آمده در تعداد زیادی اندازه‌گیری یکسان (در یک حالت دستگاه، در اینجا $|u\rangle$)، از یک مشاهده‌پذیر فیزیکی، در اینجا S_x ، $\hbar/2 \sin \theta \cos \varphi$ به‌دست می‌آید.

یادداشت:

در این مرحله بی‌فایده نیست که مسئله درجه‌های آزادی خارجی (مکان و تکانه) از نو مورد بررسی قرار گیرد. هنگامی که یک اتم نقره در حالت اسپین $\langle \psi | \psi \rangle$ که با رابطه (۴-۳۱) داده شده است، در دستگاه دوم اشترن-گرلاخ وارد می‌شود، دیدیم غیرممکن است پیش‌بینی کرد که این اتم به کدام یک از نقطه‌های N_1 و N_2 می‌رود. به‌نظر می‌رسد که این عدم قطعیت با اندیشه یک مسیر کلاسیک کاملاً معین که حالت آغازی دستگاه شناخته شده است، به سختی آشتی‌پذیر است.

در واقع این تناقض یک تناقض واقعی نیست. گفتن اینکه می‌توان درجه‌های آزادی خارجی را به‌طور کلاسیک بررسی کرد، تنها بدین معنی است که می‌توان بسته موجی ساخت که در مقایسه با همه ابعاد مسئله بسیار کوچک باشد. چنانکه خواهیم دید، این امر الزاماً بدان معنی نیست که ذره خود یک مسیر کلاسیک را خواهد پیمود.

در واقع، نخست یک اتم نقره در نظر می‌گیریم که، در حالت آغازی اسپین $|u\rangle$ ، به دستگاه داخل می‌شود. تابع موجی که درجه‌های آزادی خارجی این ذره را تشریح می‌کند، یک بسته موج با گستره بسیار اندک است که مرکز آن مسیر کلاسیک شکل ۴-۹ (الف) را می‌پیماید. به‌طور مشابه، اگر اتم نقره در حالت



شکل ۹-۴ هنگامی که اسپین در حالت $(+ | \text{الف} | +)$ یا $(- | \text{ب} | -)$ است، مرکز بسته موج یک مسیر کاملاً مشخصی را می‌پیماید که به طور کلاسیک قابل محاسبه است. هنگامی که حالت اسپین یک برهم‌نهی خطی از $(+ | -)$ و $(- | +)$ است (ج)، بسته موج به دو بخش تقسیم می‌شود و دیگر غیرممکن است گفته شود که اتم یک مسیر کلاسیک را می‌پیماید (هرچند گستره هر یک از بسته‌موجها در مقابل ابعاد مشخصه مسئله بسیار کوچک باشد).

ابتدایی اسپین $(- | -)$ وارد شود، مرکز بسته موج وابسته بدان، مسیر کلاسیک شکل ۹-۴ (ب) را خواهد پیمود. اکنون اگر اتمی را که با حالت اسپین $(\psi | \text{رابطة } ۳۱-۴)$ وارد می‌شود در نظر بگیریم، حالت آغازی متناظر با آن یک برهم‌نهی خطی کاملاً معین از دو حالت آغازی پیشین است. چون معادله شرودینگر خطی است، تابع موج یک ذره در یک لحظه بعدی [شکل ۹-۴ (ج)] یک برهم‌نهی خطی از دو بسته موج شکل‌های ۹-۴ (الف و ب) است. بنابراین، برای حضور داشتن ذره در هر یک از دو بسته موج، دامنه احتمال معینی وجود دارد. دیده می‌شود که برعکس آنچه برای مرکزهای دو بسته موج رخ می‌دهد ذره به هیچ وجه مسیر کلاسیک را نمی‌پیماید. هنگام رسیدن به پرده، تابع موج در دو ناحیه مختلف بسیار متمرکز پیرامون نقطه‌های N_1 و N_2 دارای اندازه‌های غیرصفر است. بنابراین ذره می‌تواند یا در نزدیکی N_1 ظاهر شود و یا در نزدیکی N_2 بدون آنکه بتوان با اطمینان پیش‌بینی کرد که به کدام یک از این دو نقطه خواهد رسید. باید توجه داشت که دو بسته موج شکل ۹-۴ (ج) معرف دو ذره مختلف نیستند. بلکه تنها یک ذره را نمایش می‌دهند که تابع موج آن شامل دو بخش بسیار جایگزین شده پیرامون دو نقطه مختلف است. وانگهی، دو بسته موج دارای ارتباط فازی کاملاً مشخصی هستند، زیرا از بسته موج آغازی واحدی پدید آمده‌اند که تحت اثر گرا دیان میدان B به دو بخش تقسیم شده است. می‌توان با حذف پرده (یعنی انجام

ندادن اندازه‌گیری) و قرار دادن آنها تحت اثر گرادیان جدیدی از میدان که با گرادیان نخست مختلف‌العلامه است، این دو بسته موج را با هم ترکیب کرد و از نو بسته موج واحدی تشکیل داد. ■

۴-۲-۳ تحول اسپین ۱/۲ در یک میدان مغناطیسی یکنواخت

الف) هامیلتونی برهم‌کنش و معادله شروودینگر

اتم نقره‌ای را که در یک میدان مغناطیسی یکنواخت B_0 قرار دارد در نظر گیریم و محور Oz را در راستای B_0 انتخاب کنیم. در این صورت، انرژی پتانسیل کلاسیک گشتاور مغناطیسی $\mathcal{L} = \gamma \mathcal{M}$ این اتم چنین است

$$W = -\mathcal{M} \cdot B_0 = -\mathcal{M}_z B_0 = -\gamma B_0 \mathcal{L}_z \quad (۳۷-۴)$$

که در آن B_0 قدرمطلق میدان مغناطیسی است. قرار دهیم

$$\omega_0 = -\gamma B_0 \quad (۳۸-۴)$$

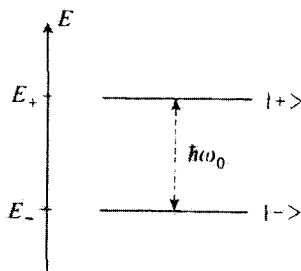
به‌سادگی دیده می‌شود که ω_0 دارای ابعاد معکوس زمان، یعنی ابعاد سرعت زاویه‌ای است. چون ما تنها درجه‌های آزادی داخلی ذره را کوانتیده می‌کنیم، \mathcal{L}_z باید توسط عملگر S_z جانشین شود و انرژی کلاسیک (۳۷-۴) یک عملگر می‌شود. این هامیلتونی H است که تحول اسپین اتم را در میدان مغناطیسی B_0 تشریح می‌کند

$$H = \omega_0 S_z \quad (۳۹-۴)$$

چون این عملگر مستقل از زمان است، حل معادله شروودینگر متناظر به حل معادله ویژه‌مقداری H منجر می‌شود. بی‌درنگ پیداست که ویژه‌بردارهای H همان ویژه‌بردارهای S_z هستند

$$\begin{aligned} H | + \rangle &= +\frac{\hbar\omega_0}{2} | + \rangle \\ H | - \rangle &= -\frac{\hbar\omega_0}{2} | - \rangle \end{aligned} \quad (۴۰-۴)$$

بنابراین، دوتراز انرژی $E_+ = -\hbar\omega_0/2$ و $E_- = \hbar\omega_0/2$ (شکل ۴-۱۰) وجود دارد که



شکل ۴-۱۰. ترازهای انرژی یک اسپین $1/2$ با ضریب زیرومغناطیسی γ در یک میدان مغناطیسی B موازی با Oz . ω_0 با رابطه $\omega_0 = -\gamma B$ تعریف می‌شود.

فاصله $\hbar\omega_0$ آنها با میدان مغناطیسی متناسب است. این دو تراز انرژی یک "بسامد بور" یکتایی را تعریف می‌کنند

$$\nu_{+-} = \frac{1}{h}(E_+ - E_-) = \frac{\omega_0}{2\pi} \quad (4-41)$$

یادداشتها:

۱. اگر میدان B با بردار یکه u با زاویه‌های قطبی θ و φ موازی باشد، رابطه (۴-۳۹) باید جانشین شود با

$$H = \omega_0 S_u \quad (4-42)$$

که در آن $S_u = S \cdot u$ مؤلفه S در راستای u است.

۲. γ برای اتم نقره منفی است؛ بنابراین، ω_0 بنابر (۴-۳۸) مثبت است که ترتیب قرار گرفتن ترازها را در شکل ۴-۱۰ بیان می‌کند.

ب) حرکت تقدیمی لارمور

فرض کنیم که در لحظه $t = 0$ اسپین در چنین حالتی باشد

$$|\psi(0)\rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} |-\rangle \quad (4-43)$$

در قسمت ج بخش ۴-۲-۱ نشان داده شد که یک حالت غیرمشخص را می‌توان بدین شکل نوشت. برای محاسبه $|\psi(t)\rangle$ در یک لحظه غیرمشخص $t > 0$ ، قاعده (D-۵۴) را که در فصل

سوم (جلد اول ترجمه فارسی همین کتاب) داده شده است، به کار می‌بریم. در عبارت (۴-۴۳)، $\langle \psi(0) |$ تاکنون برحسب ویژه‌حالت‌های هامیلتونی بسط داده شده است و بنابراین خواهیم یافت

$$| \psi(t) \rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} e^{-i(E_+ t/\hbar)} | + \rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} e^{-i(E_- t/\hbar)} | - \rangle \quad (44-4)$$

که با به کار بردن اندازه‌های E_- و E_+ می‌شود

$$| \psi(t) \rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i(\varphi+\omega_0 t)/2} | + \rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i(\varphi+\omega_0 t)/2} | - \rangle \quad (45-4)$$

بنابراین، حضور میدان مغناطیسی B_0 تغییر فازی متناسب با زمان میان ضرایب کتهای $| + \rangle$ و $| - \rangle$ به وجود می‌آورد.

از مقایسه عبارت (۴۵-۴) برای $\langle \psi(t) |$ با عبارت مربوط به ویژه کت $| + \rangle$ وابسته به مشاهده‌پذیر S_u [رابطه (۴-۲۲الف)]، دیده می‌شود $u(t)$ که مؤلفه اسپین در راستای آن با قطعیت $\hbar/2 +$ است، با زاویه‌های قطبی زیر تعریف می‌شود

$$\begin{cases} \theta(t) = \theta \\ \varphi(t) = \varphi + \omega_0 t \end{cases} \quad (46-4)$$

بنابراین زاویه میان $u(t)$ و Oz (راستای میدان مغناطیسی B_0) ثابت می‌ماند، ولی $u(t)$ با سرعت زاویه‌ای ω_0 (متناسب با میدان مغناطیسی) پیرامون Oz می‌چرخد. بدین ترتیب پدیده‌ای را که برای یک گشتاور مغناطیسی کلاسیک در قسمت ب بخش ۴-۱ بیان کرده بودیم و حرکت تقدیمی لازمور نامیده می‌شود، از نو در مکانیک کوانتومی به دست می‌آوردیم.

روشن است که بنابر عبارت (۴-۳۹) هامیلتونی، مشاهده‌پذیر S_z یک ثابت حرکت است. به خوبی به کمک (۴۵-۴) تحقیق می‌شود که احتمال به دست آوردن $\hbar/2 +$ یا $\hbar/2 -$ در یک اندازه‌گیری این مشاهده‌پذیر، مستقل از زمان است. چون قدرمطلق $e^{\pm i(\varphi+\omega_0 t)/2}$ برابر واحد است، این احتمالها به ترتیب برابر با $\cos^2 \theta/2$ و $\sin^2 \theta/2$ هستند، اندازه میانگین S_z نیز مستقل از زمان است

$$\langle \psi(t) | S_z | \psi(t) \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos \theta \quad (47-4)$$

برعکس، S_x و S_y با H جابه‌جایی‌پذیر نیستند [به آسانی می‌توان با به کار بردن ماتریسهای نماینده S_x ، S_y و S_z که با (۴-۱۵)، (۴-۱۶) و (۴-۱۷) داده شده‌اند، از آن اطمینان یافت]. در

واقع، رابطه‌های (۴-۳۶) در اینجا خواهند شد

$$\begin{aligned} \langle \psi(t) | S_x | \psi(t) \rangle &= \frac{\hbar}{\gamma} \sin \theta \cos(\varphi + \omega_0 t) \\ \langle \psi(t) | S_y | \psi(t) \rangle &= \frac{\hbar}{\gamma} \sin \theta \sin(\varphi + \omega_0 t) \end{aligned} \quad (4A-4)$$

در این عبارتها، بسامد یکتایی بور $\omega_0 / 2\pi$ از نو به دست می‌آید. به اضافه، اندازه‌های میانگین S_x ، S_y و S_z مشابه با مؤلفه‌های یک گشتاور جنبشی کلاسیک با قدرمطلق $\hbar/2$ که دارای حرکت تقدیمی لارمور است، عمل خواهند کرد.

۳-۴ مطالعه کلی از دستگاههای دوترازه

سادگی محاسبات عرضه شده در بخش ۴-۲، بر این واقعیت استوار است که فضای حالتها تنها دارای دوبعد است.

موارد گوناگون دیگری در فیزیک وجود دارد که می‌توان، در تقریب نخست، آنها را با روش ساده‌ای بررسی کرد. برای مثال، یک دستگاه فیزیکی دارای دو حالت را در نظر بگیریم که انرژی آنها به هم نزدیک بوده و از انرژی همه حالت‌های دیگر دستگاه بسیار متمایز باشد. فرض کنیم ارزیابی اثر یک پریشیدگی خارجی (یا برهم‌کنش داخلی که تا کنون از آن صرف‌نظر شده) بر روی این دو تراز، مورد نظر باشد. هنگامی که شدت پریشیدگی به اندازه کافی کم باشد، می‌توان نشان داد (فصل ۱۱ را ببینید) که اثر آن بر روی دو تراز، در تقریب نخست با چشمپوشی از ترازهای انرژی دیگر دستگاه، حساب می‌شود. در این صورت می‌توان تمام محاسبات را در یک زیرفضای دوبعدی حالتها انجام داد.

در این بخش، برخی ویژگیهای عمومی دستگاههای دوترازه (که الزاماً دستگاههای با اسپین $1/2$ نیستند) مطالعه می‌شود. سودمندی یک چنین مطالعه‌ای در این است که امکان می‌دهد تا از یک مدل که از نظر ریاضی بسیار ساده است، اندیشه‌های فیزیکی عمومی و مهمی (تشدید کوانتومی، نوسان میان دو تراز، ...) حاصل شود.

۱-۳-۴ طرح مسئله

الف) نمادگذاری

یک دستگاه فیزیکی در نظر بگیریم که فضای حالت‌های آن دارای دوبعد باشد (چنانکه در پیش گفته شد، بیشتر اوقات این یک تقریب است. در برخی شرایط، می‌توان بحث را به یک زیرفضای

دوبعدی فضای حالتها محدود کرد). ما برای پایه، دستگاه دو ویژه حالت $|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$ متناظر با ویژه مقدرهای E_1 و E_2 هامیلتونی H_0 را انتخاب می‌کنیم

$$\begin{aligned} H_0 |\varphi_1\rangle &= E_1 |\varphi_1\rangle \\ H_0 |\varphi_2\rangle &= E_2 |\varphi_2\rangle \end{aligned} \quad (49-4)$$

این پایه راست‌هنجار است

$$\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij}; i, j = 1, 2 \quad (50-4)$$

فرض کنیم می‌خواهیم یک پریشیدگی خارجی یا برهم‌کنشهای داخلی دستگاه را که در ابتدا در مقابل H_0 از آن صرف‌نظر شده است، به حساب آوریم. هامیلتونی بدین شکل در می‌آید

$$H = H_0 + W \quad (51-4)$$

ویژه‌حالتها و ویژه مقدرهای H با $|\psi_{\pm}\rangle$ و E_{\pm} نشان داده می‌شوند

$$\begin{aligned} H |\psi_+\rangle &= E_+ |\psi_+\rangle \\ H |\psi_-\rangle &= E_- |\psi_-\rangle \end{aligned} \quad (52-4)$$

H_0 بیشتر اوقات، هامیلتونی ناپریشیده و W پریشیدگی یا جفتیدگی نامیده می‌شود. در اینجا فرض می‌شود که W به‌زمان بستگی ندارد. در پایه $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$ از ویژه‌حالتهای H_0 (موسوم به حالت‌های ناپریشیده)، W با یک ماتریس هرمیتی نمایش داده می‌شود

$$(W) = \begin{pmatrix} W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & W_{22} \end{pmatrix} \quad (53-4)$$

W_{22} و W_{11} حقیقی هستند. به‌اضافه

$$W_{12} = W_{21}^* \quad (54-4)$$

در غیاب جفتیدگی، E_1 و E_2 انرژیهای ممکن دستگاه و حالت‌های $|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$ حالت‌های مانا هستند (اگر دستگاه در یکی از این دو حالت قرار داده شود، دائماً در آن حالت باقی خواهد ماند). مسئله عبارت از ارزیابی تغییراتی است که به‌هنگام دخالت جفتیدگی W پدیدار می‌شود.

ب) نتایج جفتیدگی

۱. E_1 و E_2 دیگر انرژی‌های ممکن دستگاه نیستند.

اندازه‌گیری انرژی دستگاه نمی‌تواند نتیجه‌ای جز یکی از دو ویژه‌مقدار E_+ و E_- هامیلتونی H را به دست دهد که در حالت کلی غیر از E_1 و E_2 هستند.

بنابراین، نخستین مسئله‌ای که مطرح است، محاسبه E_+ و E_- برحسب E_1 ، E_2 ، و عناصر ماتریس W_{ij} مربوط به W است. یعنی منظور بررسی اثر جفتیدگی روی موقعیت ترازهای انرژی است.

۲. $|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$ دیگر، حالت‌های مانا نیستند.

$|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$ که به‌طور کلی ویژه‌حالت‌های هامیلتونی کل H نیستند، دیگر حالت‌های مانا نمی‌باشند. برای مثال، اگر دستگاه در لحظه $t = 0$ در حالت $|\varphi_1\rangle$ باشد، یک احتمال $\mathcal{P}_{12}(t)$ وجود دارد که در لحظه t در حالت $|\varphi_2\rangle$ یافت شود؛ بنابراین W گذارهایی میان دو حالت ناپریشیده القا می‌کند و نام "جفتیدگی" (میان $|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$) برای W ، از اینجا پدید می‌آید. این جنبهٔ دینامیکی اثر W ، دومین مسئلهٔ مورد علاقه ما را تشکیل می‌دهد.

یادداشت:

در مکمل ۳ این فصل دو مسئله‌ای که هم‌اکنون طرح کردیم، با وارد کردن اسپین خیالی، بررسی شده است. در حقیقت می‌توان نشان داد هامیلتونی‌ای که قطری‌کردنش مورد نظر است، به‌همان شکل هامیلتونی یک اسپین $1/2$ واقع در یک میدان مغناطیسی ایستای \mathbf{B} است که مؤلفه‌های B_x ، B_y ، و B_z آن تنها برحسب E_1 ، E_2 ، و عناصر ماتریس W_{ij} بیان می‌شوند. به‌عبارت دیگر، به‌ر دستگاه دوترازه (که الزاماً یک اسپین $1/2$ نیست)، می‌توان یک اسپین $1/2$ به‌نام اسپین خیالی واقع در یک میدان مغناطیسی ایستای \mathbf{B} که توسط هامیلتونی‌ای به‌همان شکل توصیف می‌شود، نسبت داد. تمام نتایج مربوط به دستگاه‌های دوترازه که در این بخش به‌دست خواهیم آورد برحسب گشتاور مغناطیسی، حرکت تقدیمی لامور و دیگر مفهومی‌هایی که در بخشهای ۱-۴ و ۲-۴ این فصل در مورد اسپین $1/2$ وارد شده، دارای تعبیر هندسی ساده‌ای هستند. این تعبیر هندسی در مکمل ۳ این فصل گسترش داده شده است. ■

۲-۳-۴ سیمای ایستا: اثر جفتیدگی روی حالت‌های مانای دستگاه

الف) عبارت ویژه‌حالت‌ها و ویژه‌مقدارهای H

در پایهٔ $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$ ، ماتریس نمایندهٔ H چنین نوشته می‌شود

$$(H) = \begin{pmatrix} E_1 + W_{11} & W_{12} \\ W_{12} & E_2 + W_{22} \end{pmatrix} \quad (55-4)$$

قطری کردن ماتریس (۴-۵۵) با هیچ مشکلی روبرو نیست (این کار در مکمل ۲ فصل ۴ به تفصیل انجام شده است). برای ویژه مقادیرها چنین به دست می آید

$$E_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(E_1 + W_{11} + E_2 + W_{22}) + \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{(E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22})^2 + 4|W_{12}|^2}$$

$$E_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(E_1 + W_{11} + E_2 + W_{22}) - \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{(E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22})^2 + 4|W_{12}|^2}$$

(۴-۵۶)

(می توان تحقیق کرد که اگر $W = 0$ باشد، E_+ و E_- به E_1 و E_2 مبدل می شوند).^۱ اما ویژه بردارهای مربوط به E_+ و E_- چنین نوشته می شوند

$$|\psi_+\rangle = \cos \frac{\theta}{\sqrt{2}} e^{-i\varphi/2} |\varphi_1\rangle + \sin \frac{\theta}{\sqrt{2}} e^{i\varphi/2} |\varphi_2\rangle \quad (۴-۵۷\text{الف})$$

$$|\psi_-\rangle = -\sin \frac{\theta}{\sqrt{2}} e^{-i\varphi/2} |\varphi_1\rangle + \cos \frac{\theta}{\sqrt{2}} e^{i\varphi/2} |\varphi_2\rangle \quad (۴-۵۷\text{ب})$$

که در آنها زاویه های θ و φ چنین تعریف می شوند

$$\tan \theta = \frac{2|W_{12}|}{E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22}} \quad 0 \leq \theta < \pi \quad \text{به ازای} \quad (۴-۵۸)$$

$$W_{21} = |W_{12}| e^{i\varphi} \quad (۴-۵۹)$$

ب) بحث

۱. نمایش ترسیمی اثر جفتیدگی

همه اثرهای جالبی را که از این پس بحث خواهیم کرد، از این واقعیت حاصل می شوند که ماتریس پربشیدگی W دارای عناصر غیرقطری $W_{21} = W_{12}^*$ است (اگر $W_{12} = 0$ باشد، ویژه حالت های H همان ویژه حالت های H_0 هستند و ویژه مقادیرهای جدید تنها $E_1 + W_{11}$ و $E_2 + W_{22}$ خواهند بود). بنابراین برای ساده کردن بحث، از این پس فرض می کنیم که ماتریس (W) کاملاً غیر قطری است، یعنی $W_{11} = W_{22} = 0$.^۲ در این صورت رابطه های (۴-۵۶) و (۴-۵۸)

۱. اگر $E_1 > E_2$ باشد، هنگامی که W به صفر میل می کند، E_+ به E_1 و E_- به E_2 نزدیک می شود. برعکس اگر $E_1 < E_2$ باشد E_+ به E_2 و E_- به E_1 نزدیک می شود.

۲. اگر W_{11} و W_{22} غیرصفر باشند، برای به حساب آوردن نشان کافی است قرار دهیم: $\bar{E}_1 = E_1 + W_{11}$ ، $\bar{E}_2 = E_2 + W_{22}$. در این صورت، همه نتایج به دست آمده در این بخش معتبر خواهد بود به شرطی که E_1 و E_2 را توسط \bar{E}_1 و \bar{E}_2 جایگزین کنیم.

می‌شوند

$$E_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(E_1 + E_2) + \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2}$$

$$E_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(E_1 + E_2) - \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|W_{12}|^2} \quad (۶۰-۴)$$

$$\tan \theta = \frac{2|W_{12}|}{E_1 - E_2} \quad 0 \leq \theta < \pi \quad (۶۱-۴)$$

اکنون اثر جفت‌دگی W را روی انرژی‌های E_+ و E_- برحسب E_1 و E_2 مطالعه می‌کنیم. برای این کار، فرض کنیم W_{12} ثابت است و دو پارامتر جدید بدین صورت وارد کنیم

$$E_m = \frac{1}{\sqrt{2}}(E_1 + E_2)$$

$$\Delta = \frac{1}{\sqrt{2}}(E_1 - E_2) \quad (۶۲-۴)$$

از (۶۰-۴) بی‌درنگ پیداست که تغییرات E_+ و E_- برحسب E_m بی‌اندازه ساده است. تغییر E_m معادل با جابه‌جا کردن مبدأ روی محور انرژی‌هاست. به‌علاوه، می‌توان به‌کمک (۵۷-۴)، (۵۸-۴) و (۵۹-۴) تحقیق کرد که بردارهای $|\psi_+\rangle$ و $|\psi_-\rangle$ به E_m بستگی ندارند. بنابراین، ما توجه خود را تنها به تأثیر پارامتر Δ معطوف می‌کنیم. بر روی یک نمودار، چهار انرژی E_1, E_2, E_+, E_- و E_- را برحسب Δ رسم می‌کنیم. بدین ترتیب، برای E_1 و E_2 دو خط راست با شیبهای $+1$ و -1 به‌دست می‌آید (که در شکل ۱۱-۴ با خط چین نشان داده شده‌اند). از گذاردن (۶۲-۴) در (۶۰-۴) چنین به‌دست می‌آید

$$E_+ = E_m + \sqrt{\Delta^2 + |W_{12}|^2} \quad (۶۳-۴)$$

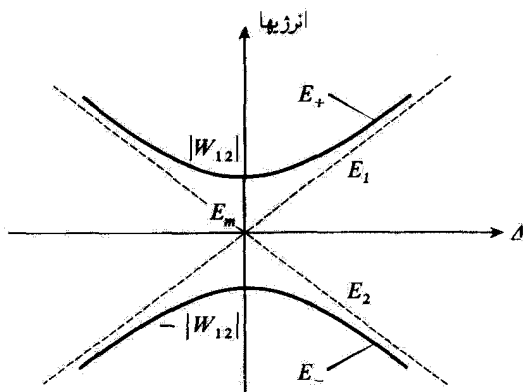
$$E_- = E_m - \sqrt{\Delta^2 + |W_{12}|^2} \quad (۶۴-۴)$$

هنگامی که Δ تغییر می‌کند، E_+ و E_- دو شاخه یک هذلولی متقارن نسبت به محورهای مختصات را می‌پیمایند که مجانبهای آن خطوط مربوط به ترازهای ناپرسیده و فاصله دو رأس آن $2|W_{12}|$ است (خط پر شکل ۱۱-۴).

۱. از شکل ۱۱-۴ به‌خوبی پیداست که چرا هنگامی که $W \rightarrow 0$ ، برای E_+ و E_- داریم

$$E_+ \rightarrow E_1, E_- \rightarrow E_2 \quad \text{برای } E_1 > E_2$$

$$E_+ \rightarrow E_2, E_- \rightarrow E_1 \quad \text{برای } E_1 < E_2$$



شکل ۱۱-۴ تغییرات انرژی E_+ و E_- برحسب اختلاف انرژی $\Delta = (E_1 - E_2)/2$. در غیاب جفتیدگی، ترازها در مرکز مختصات یکدیگر را قطع می‌کنند (خطهای نقطه‌چین). در اثر ماتریس غیرقطری جفتیدگی W ، دو تراز پربشیده "یکدیگر را می‌رانند" و یک عدم تقاطع حاصل می‌شود. خمهای مربوط به E_+ و E_- برحسب Δ شاخه‌های یک هذلولی (خطوط پرشکل) اند که ترازهای ناپربشیده مجانبهای آن هستند.

۲. اثر جفتیدگی بر موضع ترازهای انرژی

در غیاب جفتیدگی، انرژیهای E_1 و E_2 دو تراز در $\Delta = 0$ یکدیگر را "قطع می‌کنند". از شکل ۱۱-۴ به روشنی پیداست که تحت تأثیر جفتیدگی، ترازها "یکدیگر را می‌رانند"، یعنی اندازه‌های انرژی از یکدیگر دور می‌شوند. از این رو، نمودار خط پر شکل ۱۱-۴ بیشتر به این دلیل، یک نمودار عدم تقاطع نامیده می‌شود.

از طرف دیگر دیده می‌شود که Δ هرچه باشد، همیشه خواهیم داشت

$$|E_+ - E_-| > |E_1 - E_2|$$

در اینجا نتیجه‌ای را باز می‌یابیم که در دیگر زمینه‌های فیزیک (برای مثال در نظریه مدارهای الکتریکی) به‌وفور ظاهر می‌شود: جفتیدگی، بسامدهای ویژه را از هم دور می‌کند.

در نزدیکی مجانبها، یعنی برای $|\Delta| \gg |W_{12}|$ ، می‌توان رابطه‌های (۴-۶۳) و (۴-۶۴) را به‌شکل بسط محدودی برحسب توانهای $|W_{12}/\Delta|$ بدین صورت نوشت

$$E_+ = E_m + \Delta \left(1 + \frac{1}{2} \left| \frac{W_{12}}{\Delta} \right|^2 + \dots \right)$$

$$E_- = E_m - \Delta \left(1 + \frac{1}{2} \left| \frac{W_{12}}{\Delta} \right|^2 + \dots \right) \quad (۴-۶۵)$$

برعکس، در مرکز هذلولی، برای $E_+ = E_1$ ($\Delta = 0$)، رابطه‌های (۶۳-۴) و (۶۴-۴) چنین می‌شوند

$$\begin{aligned} E_+ &= E_m + |W_{12}| \\ E_- &= E_m - |W_{12}| \end{aligned} \quad (66-4)$$

بنابراین، هنگامی که ترازهای ناپریشیده دارای انرژی یکسانی هستند، اثر جفت‌دگی بسیار مهمتر است. در این صورت، همان‌گونه که از (۶۶-۴) پیداست، این اثر در مرتبه نخست تأثیر دارد، در حالی که برای $|W_{12}| \gg \Delta$ تنها در مرتبه دوم اثر می‌کند [فرمول (۶۵-۴)].

۳. اثر جفت‌دگی روی ویژه‌حالتها هنگامی که (۶۲-۴) را به‌کار می‌بریم، رابطه (۶۱-۴) می‌شود

$$\tan \theta = \frac{|W_{12}|}{\Delta} \quad (67-4)$$

هنگامی که $|W_{12}| \ll \Delta$ است (جفت‌دگی قوی)، نتیجه می‌شود که $\theta \simeq \pi/2$. برعکس وقتی $|W_{12}| \gg \Delta$ (جفت‌دگی ضعیف)، $\theta \simeq 0$ است ($\Delta \geq 0$ فرض شده است). در مرکز هذلولی، هنگامی که $E_+ = E_1$ ($\Delta = 0$) داریم

$$\begin{aligned} |\psi_+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{-i\varphi/2} |\varphi_1\rangle + e^{i\varphi/2} |\varphi_2\rangle] \\ |\psi_-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [-e^{-i\varphi/2} |\varphi_1\rangle + e^{i\varphi/2} |\varphi_2\rangle] \end{aligned} \quad (68-4)$$

در حالی که در نزدیکی مجانبها (یعنی برای $|W_{12}| \gg \Delta$)، در تقریب مرتبه نخست نسبت به $|W_{12}|/\Delta$ چنین به‌دست می‌آید

$$\begin{aligned} |\psi_+\rangle &= e^{-i\varphi/2} \left[|\varphi_1\rangle + e^{i\varphi} \frac{|W_{12}|}{2\Delta} |\varphi_2\rangle + \dots \right] \\ |\psi_-\rangle &= e^{i\varphi/2} \left[|\varphi_2\rangle - e^{-i\varphi} \frac{|W_{12}|}{2\Delta} |\varphi_1\rangle + \dots \right] \end{aligned} \quad (69-4)$$

به بیان دیگر، برای یک جفت‌دگی ضعیف ($|W_{12}| \ll E_1 - E_2$)، حالت‌های پریشیده با حالت‌های ناپریشیده اختلاف بسیار کمی دارند. در واقع، از (۶۹-۴) دیده می‌شود که با تقریب یک ضرب



شکل ۴-۱۳. دایون H_2^+ ، الکترون می‌تواند از پیش‌خواه در نزدیکیهای p_1 (الف) خواه در نزدیکیهای p_2 (ب) جایگزیده باشد در حالت پایه این یون، تابع موج الکترون یک برهم‌نهی خطی از تابع موجهای مربوط به شکلهای (الف و ب) است. احتمال وجود الکترون نسبت به صفحه میانه $p_1 p_2$ متقارن است.

داریم $\langle \varphi_2 | H | \varphi_2 \rangle = \langle \varphi_1 | H | \varphi_1 \rangle$ و می‌توان گفت که تراز پایه مولکول دوبار واگن است. با این همه، عنصر غیرقطری $\langle \varphi_2 | H | \varphi_1 \rangle$ ماتریس هامیلتونی صفر نیست. این جفت‌دگی میان حالت‌های $|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$ ، دو تراز متمایز به‌وجود می‌آورد که یکی از آنها دارای انرژی کمتر از E_m است. پس مولکول بنزن بیش از حد انتظار پایدار است. به‌اضافه، در حالت پایه حقیقی، آرایش مولکول نمی‌تواند نه با شکل ۴-۱۲ (الف) نمایش داده شود و نه با شکل ۴-۱۲ (ب): این حالت یک برهم‌نهی خطی از $|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$ است [ضریب‌های این برهم‌نهی مانند (۴-۶۸) دارای قدرمطلق یکسانی هستند]. این همان چیزی است که با دو پیکان در شکل ۴-۱۲ نشان داده شده است (این علامتی است که در شیمی خیلی زیاد به‌کار می‌رود).

مثال دیگر، مولکول (یونیزه) H_2^+ است که از دو پروتون p_1 و p_2 و یک الکترون تشکیل شده است. به‌سبب جرم‌های زیاد دو پروتون، می‌توان آنها را همانند ذره‌های ساکن در نظر گرفت. R را فاصله دو پروتون، $|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$ را حالت‌هایی در نظر بگیریم که الکترون، یا پیرامون p_1 جایگزین شده است یا پیرامون p_2 و تابع موج همان تابع موج هیدروژن است که یا با p_1 تشکیل دهد یا با p_2 (شکل ۴-۱۳). همان‌طور که در پیش دیده شد، عنصرهای قطری $\langle \varphi_1 | H | \varphi_1 \rangle$ و $\langle \varphi_2 | H | \varphi_2 \rangle$ هامیلتونی به‌دلیل تقارن برابرند که ما آنها را با $E_m(R)$ نشان می‌دهیم. با این وصف دو حالت $|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$ حالت‌های مانا نیستند، زیرا عنصر ماتریس $\langle \varphi_2 | H | \varphi_1 \rangle$ صفر نیست. این بار نیز، تراز با انرژی پایینتر از $E_m(R)$ به‌دست می‌آید و در حالت پایه، تابع موج الکترون یک ترکیب خطی از تابع موجهای شکل‌های ۴-۱۳ (الف) و ۴-۱۳ (ب) است. در این صورت الکترون دیگر تنها اطراف یکی از پروتون‌ها جایگزیده نیست و این عدم جایگزینی است که، با پایین آوردن انرژی پتانسیل آن، مسؤل پیوند شیمیایی است.^۱

۱. بررسی زرفتر مولکول یونیزه H_2^+ در مکمل ۷ فصل ۱۱ ارائه خواهد شد.

۳-۳-۴ سیمای ایستا: نوسان دستگاه میان دو حالت ناپریشیده
الف) تحول بردار حالت

فرض کنیم بردار حالت در لحظه t بدین صورت باشد

$$|\psi(t)\rangle = a_1(t) |\varphi_1\rangle + a_2(t) |\varphi_2\rangle \quad (۷۰-۴)$$

تحول $|\psi(t)\rangle$ با بودن جفتیدگی W به وسیله معادله شرودینگر داده می شود

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = (H_0 + W) |\psi(t)\rangle \quad (۷۱-۴)$$

این معادله را روی بردارهای پایه $|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$ تصویر می کنیم. با به کار بردن (۴-۶۳) که در آن $W_{11} = W_{22} = 0$ گرفته شده و (۴-۷۰) خواهیم یافت

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_1(t) = E_1 a_1(t) + W_{12} a_2(t) \quad (۷۲-۴)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_2(t) = W_{21} a_1(t) + E_2 a_2(t)$$

اگر $W_{12} \neq 0$ باشد، این معادلات یک دستگاه خطی از معادلات دیفرانسیل همگن جفتیده تشکیل می دهند. روش کلاسیک برای حل چنین دستگاههایی به استفاده از قاعده (D-۵۴) فصل سوم برمی گردد: ویژه بردارهای $|\psi_+\rangle$ (با ویژه مقدار E_+) و $|\psi_-\rangle$ (با ویژه مقدار E_-) عملگر $H = H_0 + W$ را [که عنصرهای ماتریس آن ضریبهای معادله های (۴-۷۳) است] جستجو کرده، $|\psi(0)\rangle$ را روی $|\psi_+\rangle$ و $|\psi_-\rangle$ تجزیه می کنیم

$$|\psi(0)\rangle = \lambda |\psi_+\rangle + \mu |\psi_-\rangle \quad (۷۳-۴)$$

(λ و μ با شرایط آغازی تثبیت می شوند). در این صورت، داریم

$$|\psi(t)\rangle = \lambda e^{-iE_+t/\hbar} |\psi_+\rangle + \mu e^{-iE_-t/\hbar} |\psi_-\rangle \quad (۷۴-۴)$$

[این رابطه امکان می دهد تا با تصویر کردن $|\psi(t)\rangle$ بر روی $|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$ ، $a_1(t)$ و $a_2(t)$ را به دست آوریم].

می‌توان نشان داد که دستگامی که بردار حالت آن با $|\psi(t)\rangle$ در (۷۴-۴) داده شده میان دو حالت ناپریشیده $|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$ نوسان می‌کند. برای این کار، فرض خواهیم کرد که دستگام در لحظه $t = 0$ در حالت $|\varphi_1\rangle$ است

$$|\psi(0)\rangle = |\varphi_1\rangle \quad (75-4)$$

و احتمال $\mathcal{P}_{12}(t)$ را برای اینکه دستگام در لحظه t در حالت $|\varphi_2\rangle$ باشد، محاسبه می‌کنیم.

ب) محاسبه $\mathcal{P}_{12}(t)$ ، فرمول رابی

همانند (۷۳-۴) کت داده شده با (۷۵-۴) را روی پایه $\{|\psi_+\rangle, |\psi_-\rangle\}$ گسترش می‌دهیم. با وارونه‌سازی فرمولهای (۶۷-۴) چنین می‌یابیم

$$|\psi(0)\rangle = |\varphi_1\rangle = e^{i\varphi/2} \left[\cos \frac{\theta}{2} |\psi_+\rangle - \sin \frac{\theta}{2} |\psi_-\rangle \right] \quad (76-4)$$

و از آن با به‌کار بردن (۷۴-۴) نتیجه می‌گیریم

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\varphi/2} \left[\cos \frac{\theta}{2} e^{-iE_+t/\hbar} |\psi_+\rangle - \sin \frac{\theta}{2} e^{-iE_-t/\hbar} |\psi_-\rangle \right] \quad (77-4)$$

در این صورت، دامنه احتمال یافتن دستگام در لحظه t در حالت $|\varphi_2\rangle$ نوشته می‌شود

$$\begin{aligned} \langle \varphi_2 | \psi(t) \rangle &= e^{i\varphi/2} \left[\cos \frac{\theta}{2} e^{-iE_+t/\hbar} \langle \varphi_2 | \psi_+\rangle - \sin \frac{\theta}{2} e^{-iE_-t/\hbar} \langle \varphi_2 | \psi_-\rangle \right] \\ &= e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} [e^{-iE_+t/\hbar} - e^{-iE_-t/\hbar}] \end{aligned} \quad (78-4)$$

که امکان می‌دهد تا $|\langle \varphi_2 | \psi(t) \rangle|^2 = \mathcal{P}_{12}(t)$ محاسبه شود. بدین ترتیب به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{12}(t) &= \frac{1}{4} \sin^2 \theta \left[1 - \cos \left(\frac{E_+ - E_-}{\hbar} t \right) \right] \\ &= \sin^2 \theta \sin^2 \left(\frac{E_+ - E_-}{2\hbar} t \right) \end{aligned} \quad (79-4)$$

یا، با بهکار بردن عبارتهای (۷۰-۴) و (۷۱-۴)

$$\mathcal{P}_{12}(t) = \frac{4 |W_{12}|^2}{4 |W_{12}|^2 + (E_1 - E_2)^2} \sin^2 \left[\sqrt{4 |W_{12}|^2 + (E_1 - E_2)^2} \frac{t}{2\hbar} \right] \quad (۸۰-۴)$$

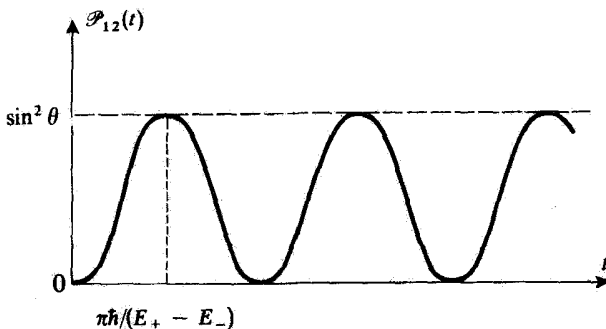
فرمول (۸۰-۴) گاهی فرمول رابی خوانده می‌شود.

ج) بحث

از (۷۹-۴) می‌توان دریافت که $\mathcal{P}_{12}(t)$ در طول زمان با بسامد $(E_+ - E_-)/\hbar$ ، که چیزی جز یگانه بسامد بور دستگاه نیست، نوسان می‌کند. $\mathcal{P}_{12}(t)$ میان صفر و اندازه ماکزیموم، که بنابر (۷۹-۴) برابر با $\sin^2 \theta$ است، تغییر می‌کند و این ماکزیموم برای همه اندازه‌های t همچون $t = (2k + 1)\pi\hbar/(E_+ - E_-)$ با $k = 0, 1, 2, \dots$ حاصل می‌شود (شکل ۱۴-۴).

بسامد نوسان $(E_+ - E_-)/\hbar$ و همچنین اندازه ماکزیموم $\sin^2 \theta$ برای تابع $\mathcal{P}_{12}(t)$ تابعهایی از $|W_{12}|$ و $E_1 - E_2$ هستند که اکنون مشخصه‌های اصلی آنها را بیان می‌کنیم.

هنگامی که $E_1 = E_2$ باشد، $(E_+ - E_-)/\hbar$ برابر با $2 |W_{12}|/\hbar$ است و $\sin^2 \theta$ مقدار ماکزیموم خود یعنی واحد را می‌پذیرد: در لحظه‌هایی چون $t = (2k + 1)\pi\hbar/2 |W_{12}|$



شکل ۱۴-۴ تغییرات تابع احتمال $\mathcal{P}_{12}(t)$ بر حسب زمان برای یافتن دستگاه در حالت $|\varphi_2\rangle$ ، در حالی که در آغاز در حالت $|\varphi_1\rangle$ بوده است. هنگامی که حالت‌های $|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$ دارای انرژی ناپراشیده یکسانی هستند، احتمال $\mathcal{P}_{12}(t)$ می‌تواند به یک برسد.

دستگاه (که از حالت (φ_1) | آغاز کرده است) در حالت (φ_2) | است. بنابراین، هر جفتیدگی میان دو حالت هم انرژی، دستگاه را با بسامد متناسب با جفتیدگی، از حالتی به حالت دیگر به طور کامل به نوسان در می آورد.^۱

هنگامی که $E_1 - E_2$ افزایش می یابد، $(E_+ - E_-)/h$ زیاد می شود، در حالی که $\sin^2 \theta$ کاهش می یابد. برای یک جفتیدگی ضعیف ($|W_{12}| \gg |E_1 - E_2|$)، اختلاف $E_+ - E_-$ با $E_1 - E_2$ ناچیز است و $\sin^2 \theta$ بسیار اندک می شود. این نتیجه تعجب آور نیست، زیرا در مورد جفتیدگی ضعیف، حالت (φ_1) | بسیار نزدیک به حالت مانای (ψ_+) | است [فرمول (۴-۷۹)]: بنابراین، دستگاه که از حالت (φ_1) | شروع کرده است، در طول زمان تنها اندکی تحول می یابد.

د) مثال واقعی از نوسان میان دو حالت

به مثال مولکول H_2^+ بازگردیم و فرض کنیم که در یک لحظه الکترون اطراف پروتون p_1 جایگزیده باشد. برای مثال الکترون در حالتی است که در شکل ۴-۱۳ (الف) نشان داده شده است. بنابر نتایج بخش پیش، می دانیم که الکترون میان دو پروتون با بسامدی برابر با بسامد بور مربوط به دو حالت مانای (ψ_+) | و (ψ_-) | مولکول، نوسان می کند. به این نوسان الکترون میان دو حالت که در شکل‌های ۴-۱۳ (الف) و ۴-۱۳ (ب) نشان داده شده است، نوسانی از اندازه میانگین گشتاور دوقطبی الکتریکی مولکول متناظر است (گشتاور دوقطبی هنگامی که الکترون اطراف یکی از دو پروتون جایگزیده شده است غیر صفر است و بسته به اینکه الکترون اطراف p_1 باشد یا p_2 ، گشتاور تغییر علامت می دهد). بدین ترتیب، به طور واقعی دیده می شود هنگامی که مولکول در یک حالت مانا نیست، چگونه یک گشتاور دوقطبی الکتریکی می تواند پدید آید. می دانیم که یک چنین دوقطبی نوسان کننده می تواند با یک موج الکترومغناطیسی با همان بسامد، انرژی مبادله کند. در نتیجه، این بسامد باید در طیف جذبی و گسیلی یون H_2^+ پدیدار شود.

مثالهای دیگری از نوسانهای میان دو حالت در مکملهای ۶، ۷، و ۸ فصل ۴ بحث شده است.

۱. همین پدیده در دیگر زمینه‌های فیزیک نیز دیده می شود. به عنوان مثال دو آونگ همسان (۱) و (۲)، یا یک بسامد و یک آونگ را در نظر بگیریم. فرض کنیم که در لحظه $t = 0$ ، تنها آونگ (۱) را رها کنیم. می دانیم (مکمل ۸ فصل ۵ را ببینید) که به سبب جفتیدگی پدیدار از آونگ‌ها مشترک، پس از مدتی (که هر جفتیدگی قویتر باشد، کوتاهتر است) به وضعیت مکملی می رسمیم که تنها آونگ (۲) با دامنه آغازی آونگ (۱) نوسان می کند و غیره.

مراجع برای مطالعه بیشتر

آزمایش اشترن-سگرلاخ:

original article (3.8); Cagnac and Pebay-Peyroula (11.2), chap. X; Eisberg and Resnick (1.3), §8-3; Bohm (5.1), §§22.5 and 22.6; Frisch (3.13).

دستگاههای دوترازه:

Feynman III (1.2), chaps. 6, 10 and 11; Valentin (16.1), Annexe XII; Allen and Eberly (15.8), particularly chap. 3.

مکملهای فصل ۴

۱. ماتریسهای پاؤلی
 ۲. قطری کردن یک ماتریس هرمیتی 2×2
- ۱ و ۲: بررسی فنی ماتریسهای 2×2 ، ساده و مهم برای حل مسائل متعدد مکانیک کوانتومی.
-
۳. اسپین خیالی $1/2$ وابسته به یک دستگاه دوترازه
- ۳: ارتباط نزدیکی را که میان بخشهای ۲-۴ و ۳-۴ از فصل ۴ وجود دارد برقرار می‌کند و تعبیر هندسی ساده‌ای از خواص دستگاههای دوترازه به دست می‌دهد (که ساده است، ولی برای دنبالهٔ مطلب ضروری نیست).
-
۴. دستگاه با دو اسپین $1/2$
- ۴: نمایش ساده‌ای از حاصلضرب تانسوری و اصول موضوع (که می‌توان به‌عنوان مجموعه‌ای از تمرینهای تصحیح شده در نظر گرفت).
-
۵. ماتریس چگالی اسپین $1/2$
- ۵: نمایش مفهومی که در مکمل EIII فصل سوم در مورد اسپین $1/2$ وارد شده است.
-
۶. اسپین $1/2$ در یک میدان مغناطیسی ایستا و یک میدان چرخان: تشدید مغناطیسی
- ۶: مطالعهٔ یک پدیدهٔ فیزیکی بسیار مهم (به‌ویژه با توجه به‌کاربردهای متعدد آن): تشدید مغناطیسی. این قسمت می‌تواند بعداً مطالعه شود.
-
۷. مطالعهٔ مولکول آمونیاک به کمک یک مدل ساده
- ۷: مثالی از یک دستگاه فیزیکی که بررسی آن در تقریب نخست می‌تواند به بررسی یک دستگاه دوترازه منجر شود. مبحثی با دشواری متوسط.
-
۸. اثرهای جفت‌دگی میان یک حالت پایدار و یک حالت ناپایدار
- ۸: بررسی تأثیر یک جفت‌دگی میان دو تراز با عمرهای مختلف. آسان، اما مفاهیمی را ایجاب می‌کند که در مکمل KIII فصل سوم وارد شده است.

مکمل ۱

ماتریسهای پاولی

۱. تعریف؛ ویژه مقدارها و ویژه بردارها

۲. خواص ساده

۳. پایه‌ای مناسب برای فضای ماتریسهای 2×2

در بخش ۱-۲، ماتریسهای نماینده سه مؤلفه S_x ، S_y ، و S_z اسپین S در پایه $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ (ویژه بردارهای S_z) داده شد. اغلب مناسب است که، در مکانیک کوانتومی، عملگر بدون بعد σ را که با S متناسب است و با رابطه

$$S = \frac{\hbar}{2} \sigma \quad (1)$$

تعریف می‌شود وارد کنیم. ماتریسهای نماینده مؤلفه σ در پایه $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ ، "ماتریسهای پاولی" نامیده می‌شوند.

۱. تعریف؛ ویژه مقدارها و ویژه بردارها

به معادله‌های (۴-۱۵)، (۴-۱۶)، و (۴-۱۷) بازگردیم. با به‌کار بردن (۱) دیده می‌شود که تعریف ماتریسهای پاولی چنین است

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2)$$

اینها ماتریسهای هرمیتی هستند که هر سه دارای یک معادله سرشتی به صورت

$$\lambda^2 - 1 = 0 \quad (3)$$

هستند. پس ویژه مقدارهای σ_x ، σ_y ، و σ_z عبارت‌اند از

$$\lambda = \pm 1 \quad (4)$$

و این واقعیت را به خوبی باز می‌یابیم که ویژه‌مقدارهای S_x ، S_y و S_z برابرند با $\pm \hbar/2$. به‌سادگی، از تعریف (۲)، ویژه‌بردارهای σ_x ، σ_y و σ_z را که به ترتیب همان ویژه‌بردارهای S_x ، S_y و S_z هستند و قبلاً در بخش ۴-۱-۲ وارد شده‌اند، به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned}\sigma_x |\pm\rangle_x &= \pm |\pm\rangle_x \\ \sigma_y |\pm\rangle_y &= \pm |\pm\rangle_y \\ \sigma_z |\pm\rangle &= \pm |\pm\rangle_z\end{aligned}\quad (5)$$

با

$$\begin{aligned}|\pm\rangle_x &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|+\rangle \pm |-\rangle] \\ |\pm\rangle_y &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|+\rangle \pm i|-\rangle]\end{aligned}\quad (6)$$

۲. خواص ساده

از تعریف (۲) به‌آسانی چنین برمی‌آید که ماتریسهای پاؤلی در برابریهای

$$\text{Det}(\sigma_j) = -1 \quad j = x, y \text{ یا } z \quad (7)$$

$$\text{Tr}(\sigma_j) = 0 \quad (8)$$

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = I \quad (I \text{ ماتریس یکه } 2 \times 2 \text{ است}) \quad (9)$$

$$\sigma_x \sigma_y = -\sigma_y \sigma_x = i\sigma_z \quad (10)$$

و همچنین دیگر معادلاتی که از (۱۰) با جایگشت دایره‌ای x ، y ، و z نتیجه می‌شوند، صدق می‌کنند. معادله‌های (۹) و (۱۰) گاهی به صورت فشرده

$$\sigma_j \sigma_k = i \sum_l \varepsilon_{jkl} \sigma_l + \delta_{jk} I \quad (11)$$

نوشته می‌شوند، که در آن ε_{jkl} نسبت به تعویض دو شاخص غیرمشخص پادمتقارن بوده و برابر

$$\varepsilon_{jkl} = \begin{cases} 0 & \text{اگر اندیسهای } j, k \text{ و } l \text{ هر سه مختلف نباشند} \\ 1 & \text{اگر } j, k, l \text{ و } l \text{ یک جایگشت زوج از } x, y, z \text{ باشند} \\ -1 & \text{اگر } j, k, l \text{ و } l \text{ یک جایگشت فرد از } x, y, z \text{ باشند} \end{cases} \quad (12)$$

از (۱۰) بی‌درنگ نتیجه می‌گیریم

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z \quad (13)$$

(و همچنین تساویهای به‌دست آمده از جایگشت دایره‌ای). از این رابطه نتیجه می‌شود

$$\begin{aligned} [S_x, S_y] &= i\hbar S_z \\ [S_y, S_z] &= i\hbar S_x \\ [S_z, S_x] &= i\hbar S_y \end{aligned} \quad (14)$$

بعداً خواهیم دید (فصل ۶ را ببینید) که معادله‌های (۱۴) معادله‌های سرشتی تکانه زاویه‌ای هستند. همچنین از رابطه (۱۰) پیداست که

$$\sigma_x \sigma_y + \sigma_y \sigma_x = 0 \quad (15)$$

(می‌گوییم که ماتریسهای σ_i میان خود پادجابه‌جا می‌شوند) و همچنین، با در نظر گرفتن (۹) داریم

$$\sigma_x \sigma_y \sigma_z = iI \quad (16)$$

سرانجام، از یک برابری گفتگو کنیم که گهگاه در مکانیک کوانتومی سودمند است. اگر A و B معرف دو برداری باشند که مؤلفه‌های آنها عدد (یا حتی عملگرهایی که با همه عملگرهای عمل‌کننده در فضای دوبعدی حالت‌های اسپین، جابه‌جا می‌شوند) هستند، داریم

$$(\sigma \cdot A)(\sigma \cdot B) = A \cdot B I + i\sigma \cdot (A \times B) \quad (17)$$

در واقع، با به کار بردن فرمول (۱۱) و توجه به اینکه \mathbf{A} و \mathbf{B} با σ جابه جا می شوند، می توان نوشت

$$\begin{aligned}(\sigma \cdot \mathbf{A})(\sigma \cdot \mathbf{B}) &= \sum_{j,k} \sigma_j A_j \sigma_k B_k \\ &= \sum_{j,k} A_j B_k \left[\sum_l \varepsilon_{jkl} \sigma_l + \delta_{jk} I \right] \\ &= \sum_l \sigma_l \left[\sum_{j,k} \varepsilon_{jkl} A_j B_k \right] + \sum_j A_j B_j I\end{aligned}\quad (18)$$

در عبارت دوم، حاصلضرب زده ای $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$ را باز می شناسیم. از دیگر سو، به آسانی پیداست که، بنابر (۱۲)، عبارت $\sum_{j,k} \varepsilon_{jkl} A_j B_k$ چیزی جز مؤلفه لام حاصلضرب برداری $\mathbf{A} \times \mathbf{B}$ نیست و بدین ترتیب (۱۷) ثابت می شود. توجه کنیم که اگر \mathbf{A} و \mathbf{B} میان خود جابه جا نشوند، باید با یک ترتیب در دو طرف تساوی پدید آیند.

۳. پایه ای مناسب برای فضای ماتریسهای 2×2

یک ماتریس 2×2 غیر مشخص

$$M = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix}\quad (19)$$

را در نظر بگیریم. همیشه می توان این ماتریس را به صورت یک ترکیب خطی از چهار ماتریس

$$I, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\quad (20)$$

نوشت. در واقع، با به کار بردن (۲)، می توانیم بی درنگ تحقیق کنیم که

$$M = \frac{m_{11} + m_{22}}{2} I + \frac{m_{11} - m_{22}}{2} \sigma_z + \frac{m_{12} + m_{21}}{2} \sigma_x + i \frac{m_{12} - m_{21}}{2} \sigma_y\quad (21)$$

پس، هر ماتریس 2×2 را می توان به شکل

$$M = a_0 I + \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}\quad (22)$$

نوشت که در آن ضریبهای a_0, a_x, a_y, a_z و a_z عددهای مختلطی هستند.

از مقایسه رابطه‌های (۲۱) و (۲۲) چنین برمی‌آید که M در صورتی هرمیتی است که اگر و فقط اگر ضریبهای a_0 و a حقیقی باشند. این ضرایب را می‌توان به‌طور صوری به کمک ماتریس M چنین بیان کرد

$$a_0 = \frac{1}{4} \text{Tr}(M) \quad (۲۳-الف)$$

$$a = \frac{1}{4} \text{Tr}(M\sigma) \quad (۲۳-ب)$$

این رابطه‌ها به‌سادگی به‌کمک (۸)، (۹)، و (۱۰) ثابت می‌شوند.

مکمل ۲

قطری کردن یک ماتریس هرمیتی 2×2

۱. مقدمه

۲. تغییر مبدأ برای تعیین ویژه‌مقدارها

۳. محاسبه ویژه‌بردارها و ویژه‌مقدارها

الف) زاویه‌های θ و φ

ب) ویژه‌مقدارهای K

ج) ویژه‌مقدارهای H

د) ویژه‌بردارهای بهنجار شده H

۱. مقدمه

در مکانیک کوانتومی غالباً لازم می‌آید که ماتریسهای 2×2 را قطری کنیم. هنگامی که تنها به ویژه‌مقدارها نیاز داریم، به آسانی می‌توان معادله سرشتی را حل کرد، زیرا معادله درجه دومی است. محاسبه ویژه‌بردارهای بهنجار شده نیز اصولاً بی‌اندازه ساده است. با این همه، اگر محاسبه با ناشیگری انجام گیرد، می‌تواند به عبارتهای پیچیده بیهوده و غیر قابل استفاده‌ای انجامد.

هدف این مکمل عرضه روش ساده‌ای است که به همه موارد قابل اعمال باشد. پس از تغییر دادن مبدأ برای تعیین ویژه‌مقدارها، زاویه‌های θ و φ را که به کمک عنصرهای ماتریس تعریف شده‌اند و سبب می‌شوند تا ویژه‌بردارهای بهنجار شده به شکلی ساده و کاربردنی نوشته شوند، وارد می‌کنیم. وارد کردن زاویه‌های θ و φ از نظر فیزیکی دارای فایده است: در واقع، در مکمل ۳ همین فصل خواهیم دید که می‌توان برای مطالعه دستگاههای دوترازه معنای فیزیکی جالبی به آنها بخشید.

۲. تغییر مبدأ برای تعیین ویژه‌مقدارها

ماتریس هرمیتی

$$(H) = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \quad (1)$$

را که در آن H_{11} و H_{22} حقیقی‌اند و به علاوه

$$H_{12} = H_{21}^* \quad (2)$$

در نظر بگیریم. بدین ترتیب، ماتریس (H) در یک پایهٔ راست‌هنجار $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$ ، یک عملگر هرمیتی، H ، را نمایش می‌دهد.^۱ با وارد کردن نصف جمع و نصف تفاضل عناصر قطری H_{11} و H_{22} ، ماتریس (H) بدین شکل درمی‌آید

$$(H) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(H_{11} + H_{22}) & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}(H_{11} + H_{22}) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(H_{11} - H_{22}) & H_{12} \\ H_{21} & -\frac{1}{2}(H_{11} - H_{22}) \end{pmatrix} \quad (3)$$

از رابطهٔ فوق نتیجه می‌شود که خود عملگر H را می‌توان به دو جزء تقسیم کرد

$$H = \frac{1}{2}(H_{11} + H_{22}) \mathbb{1} + \frac{1}{2}(H_{11} - H_{22}) K \quad (4)$$

عملگر همانی $\mathbb{1}$ و K عملگر هرمیتی‌ای است که در پایهٔ $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$ با ماتریس

$$(K) = \begin{pmatrix} 1 & \frac{2H_{12}}{H_{11} - H_{22}} \\ \frac{2H_{21}}{H_{11} - H_{22}} & -1 \end{pmatrix} \quad (5)$$

نمایش داده می‌شود.

از (۴) آشکارا پیداست که H و K دارای ویژه‌بردارهای یکسانی هستند. این ویژه‌بردارها را $|\psi_{\pm}\rangle$ و E_{\pm} و κ_{\pm} را ویژه‌مقدارهای متناظر با H و K می‌گیریم

$$H |\psi_{\pm}\rangle = E_{\pm} |\psi_{\pm}\rangle \quad (6)$$

$$K |\psi_{\pm}\rangle = \kappa_{\pm} |\psi_{\pm}\rangle \quad (7)$$

۱. حرف H را از این رو به‌کار می‌بریم که عملگر هرمیتی‌ای که قطری کردن آن مورد نظر است، اغلب یک هامیلتونی است. با این همه، محاسبهٔ عرضه شده در این مکمل، مسلماً برای هر ماتریس هرمیتی 2×2 به‌کار می‌رود.

از (۴) فوراً نتیجه می‌گیریم

$$E_{\pm} = \frac{1}{2}(H_{11} + H_{22}) + \frac{1}{2}(H_{11} - H_{22})\kappa_{\pm} \quad (۸)$$

سرانجام، نخستین ماتریس طرف دوم (۳)، دارای نقش کم اهمیتی است. این ماتریس را می‌توان با انتخاب $(H_{11} + H_{22})/2$ به‌عنوان مبدأ جدید برای تعیین ویژه‌مقدارها، حذف کرد.^۱

۳. محاسبه ویژه‌بردارها و ویژه‌مقدارها

الف. زاویه‌های θ و φ

زاویه‌های θ و φ را به‌کمک عنصرهای ماتریس H_{ij} چنین تعریف کنیم

$$\tan \theta = \frac{2 |H_{21}|}{H_{11} - H_{22}} \quad \text{با } 0 \leq \theta < \pi \quad (۹)$$

$$H_{21} = |H_{21}| e^{i\varphi} \quad \text{با } 0 \leq \varphi < 2\pi \quad (۱۰)$$

φ شناسه عدد مختلط H_{21} است. بنابر رابطه (۲)، داریم $|H_{12}| = |H_{21}|$ و

$$H_{12} = |H_{12}| e^{-i\varphi} \quad (۱۱)$$

اگر رابطه‌های (۹)، (۱۰)، و (۱۱) به‌کار روند، ماتریس (K) می‌شود

$$(K) = \begin{pmatrix} 1 & \tan \theta e^{-i\varphi} \\ \tan \theta e^{i\varphi} & -1 \end{pmatrix} \quad (۱۲)$$

ب) ویژه‌مقدارهای K

معادله سرشتی ماتریس (۱۲)، یعنی

$$\text{Det}[(K) - \kappa I] = \kappa^2 - 1 - \tan^2 \theta = 0 \quad (۱۳)$$

۱. به‌علاوه، این مبدأ جدید، به‌ازای هر پایه $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$ که انتخاب شده باشد، یکسان است، زیرا $H_{11} + H_{22} = \text{Tr}(H)$ تحت تغییر پایه راست‌هنجار ناورداست.

ویژه مقدارهای κ_+ و κ_- ماتریس (K) را به فوریت به دست می دهد

$$\kappa_+ = + \frac{1}{\cos \theta} \quad (۱۴-الف)$$

$$\kappa_- = - \frac{1}{\cos \theta} \quad (۱۴-ب)$$

می بینیم که این ویژه مقدارها کاملاً حقیقی اند. (خواص ماتریس هرمیتی، بخش $D-2$ از فصل دوم جلد اول ترجمه فارسی همین کتاب را ببینید). اگر بخواهیم $1/\cos \theta$ را برحسب H_{ij} بیان کنیم، کافی است رابطه (۹) را به کار ببریم و توجه کنیم که $\cos \theta$ و $\tan \theta$ هم علامت هستند، زیرا $0 < \theta \leq \pi$

$$\frac{1}{\cos \theta} = \frac{\sqrt{(H_{11} - H_{22})^2 + 4 |H_{12}|^2}}{H_{11} - H_{22}} \quad (۱۵)$$

ج) ویژه مقدارهای H

با به کار بردن (۸)، (۱۴) و (۱۵)، به فوریت نتیجه می گیریم

$$E_+ = \frac{1}{4}(H_{11} + H_{22}) + \frac{1}{4}\sqrt{(H_{11} - H_{22})^2 + 4 |H_{12}|^2} \quad (۱۶-الف)$$

$$E_- = \frac{1}{4}(H_{11} + H_{22}) - \frac{1}{4}\sqrt{(H_{11} - H_{22})^2 + 4 |H_{12}|^2} \quad (۱۶-ب)$$

یادداشتها:

- همان طور که در پیش دیدیم، ویژه مقدارهای (۱۶) را می توان به آسانی از معادله سرشتی ماتریس (H) به دست آورد. اگر تنها به ویژه مقدارهای (H) نیاز داشته باشیم، دیگر وارد کردن زاویه های θ و φ ، به ترتیبی که انجام شد، لزومی ندارد. برعکس، در بخش بعد خواهیم دید هنگامی که به کار بردن ویژه بردارهای بهنجار شده H مورد نیاز است، این روش بسیار عملی است.
- به کمک روابط (۱۶) به فوریت تحقیق می شود که

$$E_+ + E_- = H_{11} + H_{22} = \text{Tr}(H) \quad (۱۷)$$

$$E_+ E_- = H_{11} H_{22} - |H_{12}|^2 = \text{Det}(H) \quad (۱۸)$$

۳. برای آنکه $E_+ = E_-$ شود، لازم است که $|H_{۱۲}|^2 = 4(H_{۱۱} - H_{۲۲})^2$ ، یعنی $H_{۱۱} = H_{۲۲} = 0$ و $H_{۱۲} = H_{۲۱} = 0$. بنابراین، یک ماتریس هرمیتی 2×2 با طیف واگن، الزاماً با ماتریس یک‌ه متنااسب است.

(د) ویژه‌بردارهای بهنجار شده H

a و b را مؤلفه‌های $|\psi_+\rangle$ روی $|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$ در نظر بگیریم. بنابر (۷)، (۱۲)، و (۱۴ الف)، باید در تساوی

$$\begin{pmatrix} 1 & \tan\theta e^{-i\varphi} \\ \tan\theta e^{i\varphi} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{\cos\theta} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (۱۹)$$

صدق کنند، که از آن نتیجه می‌شود

$$\left(1 - \frac{1}{\cos\theta}\right)a + \tan\theta e^{-i\varphi}b = 0 \quad (۲۰)$$

یعنی

$$\left(-\sin\frac{\theta}{\varphi}e^{i\varphi/2}\right)a + \left(\cos\frac{\theta}{\varphi}e^{-i\varphi/2}\right)b = 0 \quad (۲۱)$$

بنابراین ویژه‌بردار بهنجار شده $|\psi_+\rangle$ را می‌توان چنین نوشت

$$|\psi_+\rangle = \cos\frac{\theta}{\varphi}e^{-i\varphi/2}|\varphi_1\rangle + \sin\frac{\theta}{\varphi}e^{i\varphi/2}|\varphi_2\rangle \quad (۲۲)$$

یک محاسبه مشابه، $|\psi_-\rangle$ را چنین به دست می‌دهد

$$|\psi_-\rangle = -\sin\frac{\theta}{\varphi}e^{-i\varphi/2}|\varphi_1\rangle + \cos\frac{\theta}{\varphi}e^{i\varphi/2}|\varphi_2\rangle \quad (۲۳)$$

به خوبی تحقیق می‌شود که $|\psi_+\rangle$ و $|\psi_-\rangle$ بر هم عمودند.

یادداشت:

در حالی که توابع مثلثاتی زاویه θ به کمک عنصرهای ماتریس H_{ij} نسبتاً ساده بیان می‌شوند [به عنوان مثال رابطه‌های (۹) و (۱۵)]، توابع مربوط به زاویه $\theta/2$ چنین نیستند. در نتیجه، فرمولهای (۲۲)

و (۲۳) که ویژه بردارهای بهنجار شده $\langle \psi_+ |$ و $\langle \psi_- |$ را می دهند هنگامی که $\cos \theta/2$ و $\sin \theta/2$ برحسب H_{ij} ها بیان می شوند، پیچیده هستند و به کار بردن آنها دیگر ساده نیست. بهتر است عبارتهای (۲۲) و (۲۳) را مستقیماً به کار برد و تابعهای $\cos \theta/2$ و $\sin \theta/2$ را، در طول محاسبه‌ای که به شناسایی ویژه بردارهای بهنجار شده H نیازمند است، حفظ کرد. وانگهی اغلب دیده می شود که نتیجه نهایی محاسبه فقط تابعهایی از زاویه θ را به دست می دهد (به عنوان مثال محاسبه بخش ۳-۳-۴ ب از فصل ۴) که از آن پس برحسب H_{ij} ها بیان می شوند. در این صورت، عبارتهای (۲۲) و (۲۳) امکان می دهند که با احتراز از عبارتهای پیچیده‌ای که هر چه نتیجه نهایی ساده تر باشد کمتر دخالت می کند، محاسبات حد واسط به شیوه‌ای رسا انجام گیرند. این است برتری روشی که در این مکمل عرضه شد. برتری دیگری، که دارای جنبه فیزیکی است، در مکمل بعد ظاهر خواهد شد.



مکمل ۳

اسپین خیالی ۱/۲ وابسته به یک دستگاه دوترازه

۱. مقدمه

۲. تعبیر هامیلتونی برحسب اسپین خیالی

۳. تعبیر هندسی پدیده‌های مختلف که در بخش ۴-۳ از فصل ۴ بحث شده است

الف) میدانهای مغناطیسی خیالی وابسته به H_0 ، W ، و H

ب) اثر جفتدگی روی ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای هامیلتونی

ج) تعبیر هندسی $\mathcal{P}_{12}(t)$

۱. مقدمه

دستگاه دوترازه‌ای را که هامیلتونی آن، در یک پایه راست‌هنجار $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$ ، با ماتریس هرمیتی (H) داده شده است در نظر بگیریم [رابطه (۱) مکمل ۲-۱]. اگر $(H_{11} + H_{22})/2$ را به‌عنوان مبدأ جدید انرژی بگیریم، ماتریس (H) می‌شود

$$(H) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(H_{11} - H_{22}) & H_{12} \\ H_{21} & -\frac{1}{2}(H_{11} - H_{22}) \end{pmatrix} \quad (1)$$

هرچند که دستگاه دوترازه مورد نظر لزوماً یک اسپین ۱/۲ نیست، می‌توان همیشه بدان یک اسپین ۱/۲ نسبت داد که هامیلتونی H آن، در پایه $\{|-\rangle, |+\rangle\}$ ویژه‌حالت‌های مؤلفه S_z این اسپین، با همان ماتریس (H) نمایش داده شود. خواهیم دید که در این صورت می‌توان (H) را به‌عنوان انرژی جفتدگی این "اسپین خیالی" با یک میدان مغناطیسی ایستای B تعبیر کرد، که راستا و اندازه آن به‌سادگی به پارامترهایی که در مکمل پیشین به‌هنگام قطری کردن (H) وارد شده بودند، مربوط می‌شوند. بدین ترتیب ممکن است به این پارامترها یک معنی فیزیکی ساده داد.

به‌اضافه، اگر هامیلتونی H به‌صورت $H = H_0 + W$ ، مجموع دو عملگر باشد، خواهیم دید که می‌توان به H_0 ، H ، و W سه میدان مغناطیسی B_0 ، B ، و b به‌گونه‌ای نسبت داد که $B = B_0 + b$ باشد. وارد کردن جفتدگی W برحسب اسپین خیالی، به افزودن میدان b به

اسپین خیالی $1/2$ وابسته به یک دستگاه دوترازه ۵۹

B برمی‌گردد. نشان خواهیم داد که این دیدگاه امکان می‌دهد تا پدیده‌هایی که در بخش ۳-۴ مطالعه شده‌اند، به سادگی تعبیر شوند.

۲. تعبیر هامیلتونی برحسب اسپین خیالی

در فصل ۴ دیدیم که هامیلتونی H جفتدگی میان یک اسپین $1/2$ و یک میدان مغناطیسی B با مؤلفه‌های B_x, B_y, B_z چنین نوشته می‌شود

$$\tilde{H} = -\gamma \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} = -\gamma (B_x S_x + B_y S_y + B_z S_z) \quad (2)$$

برای محاسبه ماتریس وابسته به این عملگر، کافی است ماتریسهای وابسته به S_x, S_y, S_z را در این تساوی ببریم [رابطه‌های (۴-۱۵)، (۴-۱۶)، و (۴-۱۷)]. در این صورت فوراً نتیجه می‌گیریم

$$(\tilde{H}) = -\frac{\gamma \hbar}{2} \begin{pmatrix} B_z & B_x - iB_y \\ B_x + iB_y & -B_z \end{pmatrix} \quad (3)$$

بنابراین، برای یکسان دانستن ماتریس (۱) با (\tilde{H}) ، کافی است یک "میدان خیالی" B به صورت

$$\begin{cases} B_x = -\frac{\gamma}{\hbar} \operatorname{Re} H_{12} \\ B_y = \frac{\gamma}{\hbar} \operatorname{Im} H_{12} \\ B_z = \frac{\gamma}{\hbar} (H_{22} - H_{11}) \end{cases} \quad (4)$$

تعریف کنیم. توجه کنیم که در این صورت قدرمطلق B_{\perp} تصویر میدان B بر روی صفحه xOy برابر است با

$$B_{\perp} = \frac{\gamma}{\hbar} |H_{12}| \quad (5)$$

بنابر رابطه‌های (۹) و (۱۰) از مکمل γ ، زاویه‌های θ و φ وابسته به ماتریس $(H) = (\tilde{H})$ در رابطه (۳)، با روابط زیر داده می‌شوند

$$\begin{cases} \tan \theta = \frac{|\gamma B_{\perp}|}{-\gamma B_z} & 0 \leq \theta < \pi \\ -\gamma (B_x + iB_y) = |\gamma B_{\perp}| e^{i\varphi} & 0 \leq \varphi < 2\pi \end{cases} \quad (6)$$

ضریب ژیرومغناطیسی γ یک رابط ساده محاسبه است و می‌تواند از پیش هر مقداری داشته باشد. اگر γ را منفی اختیار کنیم، تساویهای (۶) نشان می‌دهند که زاویه‌های θ و φ وابسته به ماتریس (H) همان زاویه‌های قطبی راستای میدان مغناطیسی B هستند (اگر γ مثبت اختیار می‌شد. راستای مخالف به دست می‌آمد).

در پایان، دیده می‌شود که می‌توان دستگاه دوترازه را، که از آن شروع کرده بودیم، فراموش کرد و ماتریس (H) را، در پایه ویژه‌حالت‌های $(+)$ و $(-)$ وابسته به عملگر S_z ، به‌عنوان هامیلتونی \tilde{H} یک اسپین $1/2$ در میدان مغناطیسی‌ای در نظر گرفت که مؤلفه‌های آن با رابطه (۴) داده می‌شوند. \tilde{H} را می‌توان چنین نیز نوشت

$$\tilde{H} = \omega S_u \quad (۷-الف)$$

S_u عملگر $S \cdot u$ است که مؤلفه اسپین در راستای u با زاویه‌های قطبی θ و φ را تشریح می‌کند و ω سرعت زاویه‌ای لارمور است

$$\omega = |\gamma| |B| \quad (۷-ب)$$

در جدول زیر تناظرهای مختلف میان دستگاه دوترازه و اسپین خیالی $1/2$ وابسته، خلاصه شده است.

دستگاه دوترازه		اسپین خیالی $1/2$
$ \varphi_1\rangle$	\longleftrightarrow	$ +\rangle$
$ \varphi_2\rangle$	\longleftrightarrow	$ -\rangle$
$ \psi_+\rangle$	\longleftrightarrow	$ +\rangle_u$
$ \psi_-\rangle$	\longleftrightarrow	$ -\rangle_u$
$E_+ - E_-$	\longleftrightarrow	$\hbar\omega$
زاویه‌های θ و φ وارد شده	\longleftrightarrow	زاویه‌های قطبی از
در مکمل ۲		میدان خیالی B
$H_{11} - H_{22}$	\longleftrightarrow	$-\gamma\hbar B_z$
$ H_{21} $	\longleftrightarrow	$-\gamma\hbar B_{\perp}/2$

۳. تعبیر هندسی پدیده‌های مختلف که در بخش ۴-۳ از فصل ۴ بحث شده است
الف) میدانهای مغناطیسی خیالی وابسته به H_0 , W , و H

فرض کنیم که، مشابه با بخش ۴-۳، هامیلتونی H به شکل مجموع دو عبارت باشد

$$H = H_0 + W \quad (۸)$$

در پایه $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$ ، هامیلتونی ناپریشیده H_0 با یک ماتریس قطری نمایش داده می‌شود که با انتخاب مناسب مبدأ انرژی نوشته می‌شود

$$(H_0) = \begin{pmatrix} \frac{E_1 - E_2}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{E_1 - E_2}{2} \end{pmatrix} \quad (۹)$$

اما در مورد جفتیدگی W ، مانند بخش ۴-۳، فرض می‌کنیم که غیرقطری خالص باشد

$$(W) = \begin{pmatrix} 0 & W_{12} \\ W_{21} & 0 \end{pmatrix} \quad (۱۰)$$

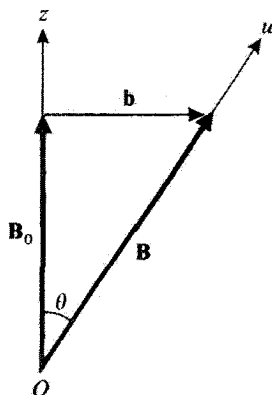
بحث بخش پیش امکان می‌دهد تا به (H_0) و (W) دو میدان مغناطیسی، B و b به گونه‌ای نسبت دهیم [رابطه‌های (۴) و (۵)] که

$$\begin{cases} B_{z} = \frac{E_2 - E_1}{\gamma \hbar} \\ B_{\perp} = 0 \end{cases} \quad (۱۱)$$

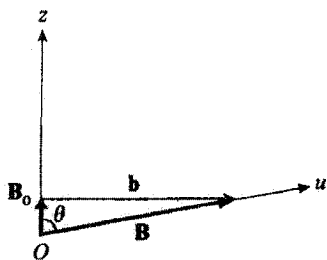
$$\begin{cases} b_z = 0 \\ b_{\perp} = \frac{2}{\hbar} \left| \frac{W_{12}}{\gamma} \right| \end{cases} \quad (۱۲)$$

بنابراین B_0 موازی با محور Oz و متناسب با $(E_2 - E_1)/2$ و عمود بر Oz و متناسب با $|W_{12}|$ است. چون $(H) = (H_0) + (W)$ است، میدان B وابسته به هامیلتونی کل مجموع برداری B_0 و b است

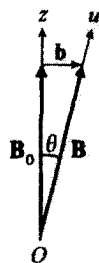
$$B = B_0 + b \quad (۱۳)$$



شکل ۱ وضع نسبی میدانهای خیالی. B_0 وابسته به H_0 ، b وابسته به W و $B = B_0 + b$ وابسته به هامیلتونی کل $H = H_0 + W$ است.



(الف)



(ب)

شکل ۲ وضع نسبی میدانهای خیالی B_0 ، b ، و B در یک جفتیدگی قوی (الف) یا ضعیف (ب).

سه میدان B_0 ، b ، و B در شکل ۱ نشان داده شده‌اند. زاویه θ که در بخش ۴-۳-۲ (الف) وارد شده است، زاویه میان B_0 و B است، زیرا B_0 موازی با Oz است.

شرط جفتیدگی قوی $(|W_{12}| \gg |E_1 - E_2|)$ که در بخش ۴-۳-۲ وارد شد، معادل با $|b| \gg |B_0|$ است [شکل ۲ (الف)]. شرط جفتیدگی ضعیف $(|W_{12}| \ll |E_1 - E_2|)$ معادل با $|b| \ll |B_0|$ است [شکل ۲ (ب)].

(ب) اثر جفتیدگی روی ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای هامیلتونی

$\omega = |\gamma| |B|$ و $\omega_0 = |\gamma| |B_0|$ به ترتیب با سرعتهای زاویه‌ای لارمور $E_+ - E_-$ و $E_1 - E_2$ در میدانهای B_0 و B متناظرند. در شکل ۱ دیده می‌شود که B_0 ، b ، و B مثلث راستگوشه‌ای

می‌سازند که وتر آن B است. پس همیشه $|B| \geq |B_0|$ است و به خوبی باز می‌یابیم که $E_+ - E_-$ همیشه بزرگتر از $E_1 - E_2$ است.

برای یک جفتیدگی ضعیف [شکل ۲ (الف)]، اختلاف نسبی میان $|B|$ و $|B_0|$ بسیار ضعیف و برحسب $|B| / |b|$ از مرتبه دوم است. از این واقعیت فوراً نتیجه می‌شود که اختلاف نسبی $E_+ - E_-$ و $E_1 - E_2$ به صورت جملاتی از مرتبه دوم نسبت به $(E_1 - E_2) / |W_{12}|$ است. برعکس، برای یک جفتیدگی قوی، [شکل ۲ (الف)] $|B|$ در مقایسه با $|B_0|$ خیلی بزرگ و در عمل برابر $|b|$ است. $E_+ - E_-$ در این هنگام خیلی بزرگتر از $|E_1 - E_2|$ و در عمل متناسب با $|W_{12}|$ است. بدین ترتیب همه نتایج بخش ۲-۳-۴ یک بار دیگر به دست می‌آیند.

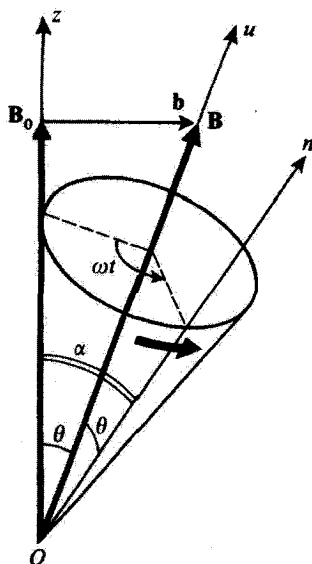
در مورد اثر جفتیدگی بر ویژه‌بردارها، به سادگی می‌توان آن‌را از شکل‌های ۱ و ۲ نیز دریافت. در واقع، ویژه‌بردارهای H و H_0 به ترتیب به ویژه‌بردارهای مؤلفه‌های S روی محوره‌های Ou و Oz مربوط هستند. این محورها، در عمل، در مورد جفتیدگی ضعیف [شکل ۲ (ب)] موازی و در مورد جفتیدگی قوی [شکل ۲ (الف)] بر هم عمود هستند. ویژه‌بردارهای S_x و S_z ، در نتیجه ویژه‌بردارهای مربوط به H و H_0 ، در مورد نخست بسیار به هم نزدیک و در مورد دوم بسیار از هم متفاوت هستند.

ج) تعبیر هندسی $\mathcal{P}_{12}(t)$

مسائلی را که در بخش ۳-۳-۴ بررسی شد، می‌توان برحسب اسپین خیالی چنین مطرح کرد: در لحظه $t = 0$ ، اسپین خیالی وابسته به دستگاه دوترازه در ویژه‌حالت $(+)$ عملگر S_z است؛ b را به B_0 اضافه می‌کنیم، احتمال $\mathcal{P}_{+-}(t)$ برای یافتن اسپین در لحظه t در حالت $(-)$ چه مقدار است؟ با توجه به تناظرهای میان دستگاه دوترازه و اسپین خیالی که در جدول خلاصه شده است، $\mathcal{P}_{12}(t)$ باید با $\mathcal{P}_{+-}(t)$ یکی شود.

محاسبه $\mathcal{P}_{+-}(t)$ در این صورت بسیار ساده است، زیرا تحول یک اسپین در طول زمان به حرکت تقدیمی لارمور پیرامون B (شکل ۳) می‌انجامد. در جریان این حرکت تقدیمی، زاویه θ میان اسپین و راستای Ou میدان B ثابت می‌ماند. در لحظه t ، اسپین در راستای On که با Oz زاویه α می‌سازد، قرار می‌گیرد. زاویه‌ای که به وسیله صفحه‌های (Oz, Ou) و (Ou, On) تشکیل می‌شود برابر با wt است. یک فرمول کلاسیک مثلثات کروی می‌دهد بنویسیم

$$\cos \alpha = \cos^2 \theta + \sin^2 \theta \cos wt \quad (14)$$



شکل ۳ تعبیر هندسی رابطه رابی برحسب اسپین خیالی. تحت اثر جفت‌زدگی (که با b نشان داده شده است)، اسپین که در آغاز در راستای Oz است، به دور B حرکت تقدیمی می‌کند. در نتیجه، احتمال یافتن $-\hbar/2$ در یک اندازه‌گیری مؤلفه S_z بر روی Oz ، تابعی نوسانی از زمان است.

در نتیجه، هنگامی که اسپین در راستایی که با زاویه α می‌سازد قرار می‌گیرد، احتمال یافتن آن در حالت $(-)$ عملگر S_z برابر است با $(1 - \cos \alpha)/2 = \sin^2 \alpha/2$ (بخش ۲-۲-۴-ب). با به‌کار بستن (۱۴)، چنین به‌دست می‌آید

$$\mathcal{P}_{+-}(t) = \sin^2 \frac{\alpha}{2} = \frac{1}{4} \sin^2 \theta (1 - \cos \omega t) \quad (15)$$

این نتیجه، هنگامی که $(E_+ - E_-)/\hbar$ جایگزین ω شود، برابر با فرمول (۴-۷۹) می‌شود. بدین ترتیب، از این فرمول یک تعبیر کاملاً هندسی به‌دست داده‌ایم.

مراجع برای مطالعه بیشتر

Abragam (14.1), chap. II, §F; Sargent et al. (15.5), §7-5; Allen (15.7), chap. 2;

همچنین مرجع زیر را ببینید

Feynman et al. (1.33).

دستگاه با دو اسپین ۱/۲

۱. تشریح کوانتومی

الف) فضای حالتها

ب) مجموعه‌های کامل مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده

ج) کلی‌ترین حالت

۲. پیش‌بینی نتایج اندازه‌گیری

الف) اندازه‌گیرهای همزمان بر روی دو اسپین

ب) اندازه‌گیرهای انجام گرفته بر روی یک اسپین تنها

در این مکمل می‌خواهیم روشی را که در بخش ۴-۱-۲ ارائه شد، برای توصیف دو ذره با اسپین $1/2$ به‌کار ببریم. این مورد به‌هیچ روی پیچیده‌تر از مورد یک ذرهٔ تنها با اسپین $1/2$ نیست. سودمندی آن در ارتباط با اصول موضوع این است که در اینجا دیگر هیچ‌یک از عملگرهای فیزیکی اسپین به‌تنهایی یک مجموعهٔ کامل مشاهده‌پذیر جابه‌جایی‌پذیر تشکیل نمی‌دهد (در حالی که در مورد یک اسپین تنها چنین است). بدینسان قادر خواهیم بود، اندازه‌گیرهایی را در نظر بگیریم که خواه بر روی یک مشاهده‌پذیر با طیف واگن انجام گرفته باشند، خواه به‌طور همزمان بر روی دو مشاهده‌پذیر. یک سودمندی دیگر این بررسی، روشن کردن مفهوم حاصلضرب تانسوری، که در بخش F از فصل دوم وارد شد، به‌کمک یک مورد ساده است. در اینجا نیز همانند فصل ۴، تنها به‌درجه‌های آزادی داخلی (حالت‌های اسپین) توجه می‌کنیم و به‌اضافه فرض خواهیم کرد که دو ذرهٔ تشکیل‌دهنده دستگاه همسان نیستند (دستگاه‌های ذره‌های همسان به‌طور کلی در فصل ۱۴ مطالعه خواهند شد).

۱. تشریح کوانتومی

در فصل ۴ دیدیم که چگونه حالت اسپین یک ذره با اسپین $1/2$ به‌طور کوانتومی توصیف می‌شود. بنابراین کافی است نتایج بخش F از فصل دوم را برای توصیف دستگاه‌های با دو اسپین $1/2$ به‌کار ببریم.

الف) فضای حالتها

میان دو ذره به کمک شاخصهای ۱ و ۲ تمایز قائل می‌شویم. هنگامی که ذره (۱) تنهاست، حالت اسپین آن به وسیله یک کیت متعلق به فضای حالت‌های (۱) \mathcal{E}_S دوبعدی، مشخص می‌شود. همچنین، حالت‌های اسپین ذره (۲) تنها یک فضای (۲) \mathcal{E}_S دوبعدی تشکیل می‌دهد. مشاهده پذیرهای اسپین ذره‌های (۱) و (۲) را به ترتیب با S_1 و S_2 نشان می‌دهیم. در (۱) \mathcal{E}_S [یا (۲) \mathcal{E}_S] ویژه‌کتهای S_{1z} (یا S_{2z}) را به عنوان پایه انتخاب می‌کنیم و با $|1: +\rangle$ و $|1: -\rangle$ (یا $|2: +\rangle$ و $|2: -\rangle$) نشان می‌دهیم. بنابراین، کلی‌ترین کیت (۱) \mathcal{E}_S چنین نوشته می‌شود

$$|\varphi(1)\rangle = \alpha_1 |1: +\rangle + \beta_1 |1: -\rangle \quad (1)$$

و کلی‌ترین کیت (۲) \mathcal{E}_S چنین است

$$|\chi(2)\rangle = \alpha_2 |2: +\rangle + \beta_2 |2: -\rangle \quad (2)$$

($\alpha_1, \beta_1, \alpha_2, \beta_2$ اعداد مختلط غیرمشخصی هستند).

هنگامی که دو ذره را در یک دستگاه مجتمع کنیم، فضای حالت‌های \mathcal{E}_S یک چنین دستگاہی حاصلضرب تانسوری دو فضای قبلی است

$$\mathcal{E}_S = \mathcal{E}_S(1) \otimes \mathcal{E}_S(2) \quad (3)$$

این بدان معنی است که، در مرحله نخست، از ضرب تانسوری دو پایه تعریف شده قبلی برای (۱) \mathcal{E}_S و (۲) \mathcal{E}_S ، یک پایه در \mathcal{E}_S به دست می‌آید. نمادگذاری زیر را به کار خواهیم برد

$$\begin{aligned} |++\rangle &= |1: +\rangle |2: +\rangle \\ |+-\rangle &= |1: +\rangle |2: -\rangle \\ | -+\rangle &= |1: -\rangle |2: +\rangle \\ |--\rangle &= |1: -\rangle |2: -\rangle \end{aligned} \quad (4)$$

برای مثال، در حالت $|+-\rangle$ مؤلفه اسپین ذره (۱) در روی Oz یقیناً برابر $\hbar/2$ و مؤلفه اسپین ذره (۲) یقیناً $-\hbar/2$ است. بنابر قرارداد، $|+-\rangle$ را برای همیوگ کیت $|+-\rangle$ به کار می‌بریم. بنابراین،

ترتیب نمادها در کیت و پرا یکسان است: نماد نخست، ریشه وابسته به ذره (۱) و نماد دوم وابسته به ذره (۲) است.

بدین ترتیب، فضای \mathcal{E}_S چهار بعدی است. چون پایه‌های $\{|1: \pm\rangle\}$ و $\{|2: \pm\rangle\}$ به ترتیب در $(1) \mathcal{E}_S$ و $(2) \mathcal{E}_S$ راست‌هنجارند، پایه (۴) در \mathcal{E}_S راست‌هنجار است

$$\langle \varepsilon_1 \varepsilon_2 | \varepsilon'_1 \varepsilon'_2 \rangle = \delta_{\varepsilon_1 \varepsilon'_1} \delta_{\varepsilon_2 \varepsilon'_2} \quad (5)$$

$(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon'_1, \varepsilon'_2)$ در مواردی با + و در مواردی با - جایگزین می‌شود. $\delta_{\varepsilon \varepsilon'}$ برابر واحد است هرگاه ε و ε' یکسان باشند و صفر است اگر متفاوت باشند. دستگاه بردارهای (۴) از یک رابطه بستاری در \mathcal{E}_S پیروی می‌کند

$$\sum_{\varepsilon_1 \varepsilon_2} | \varepsilon_1 \varepsilon_2 \rangle \langle \varepsilon_1 \varepsilon_2 | = | ++ \rangle \langle ++ | + | +- \rangle \langle +- | + | -+ \rangle \langle -+ | + | -- \rangle \langle -- | = \mathbb{1} \quad (6)$$

ب) مجموعه‌های کامل مشاهده‌پذیرهای جابه‌جا شونده

عملگر فیزیکی S_1 و S_2 را که ابتدا در $(1) \mathcal{E}_S$ و $(2) \mathcal{E}_S$ تعریف شده‌اند، در \mathcal{E}_S امتداد می‌دهیم (همانند بخش F از فصل دوم، این عملگرهای امتداد داده شده را با S_1 و S_2 نمایش می‌دهیم). عمل آنها بر روی کتهای (۴) ساده است. به‌عنوان مثال، مؤلفه‌های S_1 تنها روی بخشی از کیت که به ذره (۱) مربوط است اثر می‌کنند. به ویژه بردارهای پایه (۴)، ویژه بردارهای همزمان S_{1z} و S_{2z} هستند

$$\begin{aligned} S_{1z} | \varepsilon_1 \varepsilon_2 \rangle &= \frac{\hbar}{2} \varepsilon_1 | \varepsilon_1 \varepsilon_2 \rangle \\ S_{2z} | \varepsilon_1 \varepsilon_2 \rangle &= \frac{\hbar}{2} \varepsilon_2 | \varepsilon_1 \varepsilon_2 \rangle \end{aligned} \quad (7)$$

برای مؤلفه‌های دیگر S_1 و S_2 ، رابطه‌هایی را که در بخش ۴-۱-۲ وارد شد، به‌کار می‌بریم. به‌عنوان مثال، می‌دانیم که بنابر تساوی (۴-۱۶)، چگونه روی کیت $\{|1: \pm\rangle\}$ اثر می‌کند

$$\begin{aligned} S_{1x} | 1: + \rangle &= \frac{\hbar}{2} | 1: - \rangle \\ S_{1x} | 1: - \rangle &= \frac{\hbar}{2} | 1: + \rangle \end{aligned} \quad (8)$$

از آنجا اثر S_{1x} را بر روی کتهای (۴) به دست می آوریم

$$\begin{aligned} S_{1x} | ++ \rangle &= \frac{\hbar}{2} | -+ \rangle \\ S_{1x} | +- \rangle &= \frac{\hbar}{2} | -- \rangle \\ S_{1x} | -+ \rangle &= \frac{\hbar}{2} | ++ \rangle \\ S_{1x} | -- \rangle &= \frac{\hbar}{2} | +- \rangle \end{aligned} \quad (9)$$

بدین ترتیب، به سادگی تحقیق می شود که، هر چند سه مؤلفه S_1 (یا S_2) با یکدیگر جابه جا نمی شوند، یک مؤلفه غیر مشخص S_1 با یک مؤلفه غیر مشخص S_2 جابه جا می شود. در $(1) \mathcal{E}_S$ مشاهده پذیر S_{1z} به تنهایی تشکیل یک مجموعه کامل مشاهده پذیر جابه جایی پذیر می دهد و همین طور S_{2z} در $(2) \mathcal{E}_S$. در \mathcal{E}_S ویژه مقدارهای S_{1z} و S_{2z} همان $\pm \hbar/2$ باقی می ماند، ولی هر یک از آنها دوبار واگن است: به عنوان مثال، به ویژه مقدار $+\hbar/2$ عملگر S_{1z} ، دو بردار راست هنجار $| ++ \rangle$ و $| +- \rangle$ [رابطه های (۷)] و هر ترکیب خطی آنها متناظر است. بنابراین، در \mathcal{E}_S ، نه S_{1z} و نه S_{2z} (به طور جداگانه) تشکیل یک مجموعه کامل مشاهده پذیر جابه جایی پذیر نمی دهند. برعکس، مجموعه $\{S_{1z}, S_{2z}\}$ یک مجموعه کامل مشاهده پذیر جابه جایی پذیر در \mathcal{E}_S است که می توان آن را از رابطه های (۷) دریافت.

البته این تنها مجموعه کامل مشاهده پذیر جابه جایی پذیر نیست که می توان تشکیل داد. به عنوان مثال، $\{S_{1z}, S_{2x}\}$ نیز یکی از این مجموعه هاست. در واقع، چنانکه در پیش دیده شد این مشاهده پذیرها جابه جا می شوند و هر یک از آنها، در فضایی که در آغاز در آن تعریف شده است، یک مجموعه کامل مشاهده پذیرهای جابه جایی پذیر تشکیل می دهد. ویژه بردارهای مشترک S_{1z} و S_{2x} از ضرب تانسوری ویژه بردارهای متناظر آنها در $(1) \mathcal{E}_S$ و $(2) \mathcal{E}_2$ به دست می آیند. با به کار بردن تساوی (۴-۲۰) خواهیم یافت

$$\begin{aligned} | 1 : + \rangle | 2 : + \rangle_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} [| ++ \rangle + | +- \rangle] \\ | 1 : + \rangle | 2 : - \rangle_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} [| ++ \rangle - | +- \rangle] \\ | 1 : - \rangle | 2 : + \rangle_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} [| -+ \rangle + | -- \rangle] \\ | 1 : - \rangle | 2 : - \rangle_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} [| -+ \rangle - | -- \rangle] \end{aligned} \quad (10)$$

ج) کلی‌ترین حالت

بردارهای (۴) از ضرب تانسوری یک کیت از $\mathcal{E}_S(1)$ در یک کیت از $\mathcal{E}_S(2)$ به دست آمده‌اند. به‌طور کلی، به کمک یک کیت اختیاری $\mathcal{E}_S(1)$ [مانند (۱)] و یک کیت اختیاری $\mathcal{E}_S(2)$ [مانند (۲)]، می‌توان یک کیت در \mathcal{E}_S ساخت

$$|\varphi(1)\rangle |\chi(2)\rangle = \alpha_1\alpha_2|++\rangle + \alpha_1\beta_2|+-\rangle + \alpha_2\beta_1|-+\rangle + \beta_1\beta_2|--\rangle \quad (11)$$

مؤلفه‌های یک چنین کیتی در پایه (۴)، حاصلضربهای مؤلفه‌های $|\varphi(1)\rangle$ و $|\chi(2)\rangle$ در پایه‌های $\mathcal{E}_S(1)$ و $\mathcal{E}_S(2)$ هستند که برای تشکیل (۴) به کار رفته‌اند.

ولی همه کیت‌های \mathcal{E}_S حاصلضرب تانسوری نیستند. کلی‌ترین بردار \mathcal{E}_S ترکیب خطی دلخواهی از بردارهای پایه است

$$|\psi\rangle = \alpha|++\rangle + \beta|+-\rangle + \gamma|-+\rangle + \delta|--\rangle \quad (12)$$

اگر بخواهیم $|\psi\rangle$ بهنجار شده باشد، لازم است داشته باشیم

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\gamma|^2 + |\delta|^2 = 1 \quad (13)$$

اگر $|\psi\rangle$ داده شود، در حالت کلی نمی‌توان دو کیت $|\varphi(1)\rangle$ و $|\chi(2)\rangle$ را چنان یافت که $|\psi\rangle$ حاصلضرب تانسوری آنها باشد. در واقع برای آنکه (۱۲) به شکل (۱۱) باشد، بخصوص باید داشته باشیم

$$\frac{\alpha}{\beta} = \frac{\gamma}{\delta} \quad (14)$$

و این شرط لزوماً برقرار نیست.

۲. پیش‌بینی نتایج اندازه‌گیری

اکنون تعدادی اندازه‌گیری را که می‌توان بر روی یک دستگاه دو اسپین ۱/۲ انجام داد در نظر می‌گیریم و پیش‌بینی‌های حاصل از اصول موضوع را برای هر یک از این اندازه‌گیریها محاسبه می‌کنیم. فرض می‌کنیم که درست قبل از هر اندازه‌گیری دستگاه با کیت بهنجارشده (۱۲) توصیف می‌شود.

الف) اندازه‌گیریهای همزمان بر روی دو اسپین

چون هر مؤلفه S_1 با هر مؤلفه S_2 جابه‌جا می‌شود، می‌توان به‌طور همزمان آنها را اندازه‌گیری کرد (فصل سوم، بخش C-6-a). برای محاسبهٔ پیش‌بینیهای مربوط به چنین اندازه‌گیریهایی کافی است ویژه‌بردارهای مشترک این دو عملگر فیزیکی را به‌کار ببریم.

مثال نخست

قبل از همه، فرض کنیم که S_{1z} و S_{2z} همزمان اندازه‌گیری می‌شوند. احتمالهای نتایج گوناگونی را که می‌توان به‌دست آورد، چه مقدار است؟

چون مجموعهٔ $\{S_{1z}, S_{2z}\}$ یک مجموعهٔ کامل مشاهده‌پذیرهای جابه‌جایی‌پذیر است، به هر نتیجهٔ اندازه‌گیری تنها یک حالت وابسته است. اگر دستگاه قبل از اندازه‌گیری در حالت (۱۲) باشد، می‌توان یافت

$$\begin{aligned} |\langle ++ | \psi \rangle|^2 &= |\alpha|^2 \text{ احتمال } + \frac{\hbar}{4} \text{ برای } S_{2z} \text{ و } + \frac{\hbar}{4} \text{ برای } S_{1z} \\ |\langle +- | \psi \rangle|^2 &= |\beta|^2 \text{ احتمال } - \frac{\hbar}{4} \text{ برای } S_{2z} \text{ و } + \frac{\hbar}{4} \text{ برای } S_{1z} \\ |\langle -+ | \psi \rangle|^2 &= |\gamma|^2 \text{ احتمال } + \frac{\hbar}{4} \text{ برای } S_{2z} \text{ و } - \frac{\hbar}{4} \text{ برای } S_{1z} \\ |\langle -- | \psi \rangle|^2 &= |\delta|^2 \text{ احتمال } - \frac{\hbar}{4} \text{ برای } S_{2z} \text{ و } - \frac{\hbar}{4} \text{ برای } S_{1z} \end{aligned} \quad (15)$$

مثال دوم

اکنون S_{1y} و S_{2z} همزمان اندازه‌گیری می‌شوند. احتمال آنکه برای هر یک از این دو مشاهده‌پذیر $+\hbar/2$ به‌دست آید، چیست؟

در اینجا نیز $\{S_{1y}, S_{2z}\}$ یک مجموعهٔ کامل مشاهده‌پذیر جابه‌جایی‌پذیر است. ویژه‌بردار مشترک S_{1y} و S_{2z} ، متناظر با ویژه‌مقدارهای $+\hbar/2$ و $+\hbar/2$ ، حاصلضرب تانسوری بردار $|1: +\rangle_y$ و بردار $|2: +\rangle_z$ است

$$|1: +\rangle_y |2: +\rangle_z = \frac{1}{\sqrt{2}} [|++\rangle + i|--\rangle] \quad (16)$$

با به‌کار بردن چهارمین اصل موضوع فصل سوم، دیده می‌شود که احتمال موردنظر عبارت است از

$$\begin{aligned} \mathcal{D} &= \left| \frac{1}{\sqrt{2}} [\langle ++ | -i \langle -+ |] | \psi \rangle \right|^2 \\ &= \frac{1}{2} |\alpha - i\gamma|^2 \end{aligned} \quad (17)$$

بدین ترتیب نتیجه به صورت "مربع یک مجموعه" ظاهر می‌شود.^۱ اگر بعد از اندازه‌گیری واقعاً $+\hbar/2$ برای S_{1y} و $+\hbar/2$ برای S_{2z} داشته باشیم، دستگاه پس از اندازه‌گیری در حالت (۱۶) است.

ب) اندازه‌گیریهای انجام گرفته بر روی یک اسپین تنها

البته می‌توان تنها یکی از مؤلفه‌های یکی از دو اسپین را اندازه گرفت. در این مورد، چون هیچ‌یک از این مؤلفه‌ها به‌تنهایی یک مجموعه کامل مشاهده‌پذیر جابه‌جایی‌پذیر نیست، با یک نتیجه اندازه‌گیری چند ویژه‌بردار متناظر است و احتمال مربوط برابر با یک "مجموع مربعها" خواهد بود.

مثال نخست

تنها S_{1z} اندازه‌گیری می‌شود. چه نتایجی، و با چه احتمالهایی، می‌توان به‌دست آورد؟ نتایج ممکن ویژه‌مقدارهای $\pm \hbar/2$ عملگر S_{1z} هستند. هر یک از این اندازه‌ها دو بار واگن است. در زیرفضای ویژه وابسته، یک پایه راست‌هنجار انتخاب می‌کنیم: به‌عنوان مثال می‌توان $\{ |++\rangle, |+-\rangle \}$ را برای $+\hbar/2$ و $\{ |--\rangle, |-+\rangle \}$ را برای $-\hbar/2$ در نظر گرفت. در این صورت نتیجه خواهیم گرفت

$$\begin{aligned} \mathcal{D} \left(+\frac{\hbar}{2} \right) &= |\langle ++ | \psi \rangle|^2 + |\langle +- | \psi \rangle|^2 \\ &= |\alpha|^2 + |\beta|^2 \\ \mathcal{D} \left(-\frac{\hbar}{2} \right) &= |\langle -+ | \psi \rangle|^2 + |\langle -- | \psi \rangle|^2 \\ &= |\gamma|^2 + |\delta|^2 \end{aligned} \quad (18)$$

یادداشت:

چون بر روی اسپین (۲) هیچ نوع اندازه‌گیری انجام نمی‌دهیم، انتخاب پایه در (۲) دلخواه است.

۱. باید توجه داشت هنگامی که برای همیوخ (۱۶) به‌دست می‌آید، علامت i تغییر می‌کند. اگر این نکته فراموش شود، نتیجه غلط به‌دست می‌آید $|\alpha - i\gamma|^2 \neq |\alpha + i\gamma|^2$ ، زیرا در حالت کلی α/γ حقیقی نیست.

می‌توان به‌عنوان مثال، برای زیرفضای ویژه S_{1z} با ویژه‌مقدار $+\hbar/2$ ، بردارهای زیر را برگزید

$$|1: +\rangle |2: \pm\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} [|++\rangle \pm |+-\rangle] \quad (19)$$

که باز به‌خوبی نتیجه می‌دهند

$$\begin{aligned} \mathcal{P}\left(+\frac{\hbar}{2}\right) &= \frac{1}{2} |\alpha + \beta|^2 + \frac{1}{2} |\alpha - \beta|^2 \\ &= |\alpha|^2 + |\beta|^2 \end{aligned} \quad (20)$$

اثبات عمومی این واقعیت، که احتمال به‌دست آمده (در مورد یک ویژه‌مقدار واگن) از انتخاب پایه در زیرفضای مربوط مستقل است، در بخش $B-3-\alpha$ فصل سوم داده شده است. ■

مثال دوم

اکنون این S_{2z} است که می‌خواهیم آن را اندازه بگیریم. احتمال به‌دست آوردن $-\hbar/2$ چیست؟ زیرفضای ویژه وابسته به ویژه‌مقدار $-\hbar/2$ از عملگر S_{2z} دو بعدی است. می‌توانیم برای پایه‌ای در آن انتخاب کنیم

$$\begin{aligned} |1: +\rangle |2: -\rangle_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|++\rangle - |+-\rangle] \\ |1: -\rangle |2: -\rangle_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} [| -+\rangle - |--\rangle] \end{aligned} \quad (21)$$

در این صورت خواهیم یافت

$$\begin{aligned} \mathcal{P} &= \left| \frac{1}{\sqrt{2}} [\langle ++ | - \langle +- |] | \psi \rangle \right|^2 + \left| \frac{1}{\sqrt{2}} [\langle -+ | - \langle -- |] | \psi \rangle \right|^2 \\ &= \frac{1}{2} |\alpha - \beta|^2 + \frac{1}{2} |\gamma - \delta|^2 \end{aligned} \quad (22)$$

در این نتیجه، هر یک از عبارتهای "مجموع مربعها"، خود "مربع یک مجموعه" است. اگر اندازه‌گیری واقعاً $-\hbar/2$ را به‌دست دهد، $|\psi\rangle$ حالت دستگاه درست بعد از این اندازه‌گیری، تصویر (پهنجاری شده) $|\psi\rangle$ بر روی زیرفضای ویژه مربوط است. در بالا مؤلفه‌های $|\psi\rangle$ را روی بردارهای پایه (۲۱) این زیرفضا محاسبه کردیم: این مؤلفه‌ها به‌ترتیب عبارت‌اند از $1/\sqrt{2}(\alpha - \beta)$

و $1/\sqrt{2}(\gamma - \delta)$. در نتیجه

$$|\psi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{4}|\alpha - \beta|^2 + \frac{1}{4}|\gamma - \delta|^2}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha - \beta)(|++\rangle - |+-\rangle) + \frac{1}{\sqrt{2}}(\gamma - \delta)(| -+\rangle - |--\rangle) \right] \quad (۲۳)$$

یادداشت:

در این مکمل، تنها مؤلفه‌های S_1 و S_2 در روی محورهای مختصات را در نظر گرفتیم. البته می‌توان مؤلفه‌های $S_1.u$ و $S_2.v$ را روی بردارهای یکه u و v غیرمشخص به خوبی اندازه گرفت. شیوه استدلال همان است که پیش از این آمد.

■

مکمل ۵

ماتریس چگالی اسپین ۱/۲

۱. مقدمه
۲. ماتریس چگالی یک اسپین کاملاً قطبیده (مورد خالص)
۳. مثالی از یک آمیزه آماری: اسپین ناقطبیده
۴. اسپین ۱/۲ در تعادل ترمودینامیکی در یک میدان ایستا
۵. بسط ماتریس چگالی برحسب ماتریسهای پاؤلی

۱. مقدمه

هدف این مکمل، روشن ساختن نظرهای عمومی ارائه شده در مکمل E_{III}، (فصل ۳، جلد اول ترجمه فارسی همین کتاب) به کمک یک دستگاه فیزیکی بسیار ساده، یعنی اسپین ۱/۲ است. اینک به مطالعه ماتریسهای چگالی، که اسپین ۱/۲ را در تعدادی از موارد، اسپین کاملاً قطبیده (مورد خالص)، ناقطبیده یا به طور جزئی قطبیده (آمیزه آماری) توصیف می کنند، می پردازیم. بدین ترتیب می توان خواص عمومی ای را که در مکمل E_{III} بیان شده اند، تحقیق و تعبیر کرد. به اضافه خواهیم دید که بسط ماتریس چگالی برحسب ماتریسهای پاؤلی، به سادگی به صورت تابعی از مقادیر میانگین مؤلفه های مختلف اسپین بیان می شود.

۲. ماتریس چگالی یک اسپین کاملاً قطبیده (مورد خالص)

یک اسپین ۱/۲ در نظر بگیریم که از یک "قطبی کننده اتمی" از نوعی که در بخش ۴-۲ شرح داده شد، خارج می شود و در ویژه حالت $|+\rangle$ (با ویژه مقدار $+\hbar/2$) مؤلفه S_u اسپین قرار دارد (یادآور شویم که زاویه های قطبی بردار یکه u با θ و φ نشان داده شده است). حالت اسپین در این صورت کاملاً شناخته شده است و چنین نوشته می شود [رابطه (۴-۲۲ الف)]

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} |-\rangle \quad (1)$$

در مکمل E_{III} فصل سوم دیدیم که چنین وضعی، بنا بر تعریف، مربوط به یک مورد خالص است. می گوئیم باریکه ای که از "قطبی کننده" خارج می شود کاملاً قطبیده است. وانگهی یادآور می شویم که اندازه میانگین $\langle S \rangle$ برای هر اسپین، برابر با $\frac{\hbar}{2} u$ است [رابطه (۴-۳۶)].

به آسانی می‌توان ماتریس چگالی $\rho(\theta, \varphi)$ مربوط به حالت (۱) را در پایه $\{| + \rangle, | - \rangle\}$ نوشت. ماتریس تصویرگر روی این حالت را چنین می‌نویسیم

$$\rho(\theta, \varphi) = \begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\theta}{2} & \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi} \\ \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} & \sin^2 \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (2)$$

این ماتریس در حالت کلی غیرقطری است. "جمعیت" های ρ_{++} و ρ_{--} دارای معنای فیزیکی بسیار ساده‌ای هستند. تفاضل آنها برابر است با $2 \langle S_z \rangle / \hbar = \cos \theta$ [رابطه (۴-۳۶)]، و مجموع آنها البته برابر واحد است. بنابراین، جمعیتها به قطبش طولی $\langle S_z \rangle$ مربوط هستند. همچنین، قدرمطلق "همدوسی" های ρ_{+-} و ρ_{-+} برابر با $|\langle S_x \rangle| = (\hbar/2) \sin \theta = |\rho_{+-}| = |\rho_{-+}|$ است (که $\langle S_x \rangle$ تصویر $\langle S \rangle$ روی صفحه xOy است. شناسه ρ_{-+} برابر زاویه φ ، یعنی زاویه‌ای است که $\langle S_x \rangle$ با محور Ox می‌سازد. بنابراین همدوسیهها به قطبش عرضی $\langle S_x \rangle$ وابسته هستند. همچنین تحقیق می‌شود که

$$[\rho(\theta, \varphi)]^2 = \rho(\theta, \varphi) \quad (3)$$

رابطه‌ای است که مشخصه مورد خالص است.

۳. مثالی از آمیزه آماری: اسپین ناقطبیده

اکنون اسپین یک اتم نقره را که، همانند آنچه در شکل ۴-۱ دیده شد، از یک کوره خارج می‌شود و از هیچ قطبی‌کننده اتمی عبور نکرده است، در نظر بگیریم (این اسپین به یک حالت معین برده نشده است). در این صورت تنها اطلاعاتی که از این اسپین در دست است این است که اسپین می‌تواند از پیش، در هر جهتی از فضا قرار گیرد و همه جهتها به یکسان محتمل‌اند. با توجه به نمادگذاریهای مکمل E_{III} ، (فصل ۳ جلد اول، ترجمه فارسی همین کتاب)، چنین وضعی مربوط به یک آمیزه آماری حالت‌های $| + \rangle$ با وزنه‌های برابر است. رابطه (۲۸) مکمل E_{III} ماتریس چگالی متناظر با این حالت را تعریف می‌کند. با این‌همه، جمع گسسته \sum_k باید در اینجا با یک انتگرال روی تمام جهتهای ممکن، جایگزین شود

$$\rho = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega \rho(\theta, \varphi) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \rho(\theta, \varphi) \quad (4)$$

(ضریب $1/4\pi$ بهنجار بودن احتمالات مربوط به جهتهای مختلف را تأمین می‌کند). انتگرالهایی که اجزای ماتریس ρ را به دست می‌دهند ساده‌اند و به نتیجه زیر منجر می‌شوند

$$\rho = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix} \quad (5)$$

به سادگی از رابطه (۵) نتیجه می‌شود $\rho^2 = \rho/2$ ، که به درستی نشان می‌دهد که در مورد یک آمیزه آماری ρ^2 با ρ اختلاف دارد.

از طرف دیگر، اگر اندازه‌های میانگین S_x ، S_y ، و S_z به وسیله (۵) محاسبه شوند، به دست می‌آید

$$\langle S_i \rangle = \text{Tr}[\rho S_i] = \frac{1}{2} \text{Tr} S_i = 0 \quad i = x, y, z \quad (6)$$

بدین ترتیب بار دیگر نتیجه می‌شود که اسپین قطبیده نیست: چون همه جهتها معادل‌اند، اندازه میانگین اسپین صفر می‌شود.

یادداشتها:

۱. به کمک این مثال به خوبی دیده می‌شود که چگونه عنصرهای غیرقطری ρ (همدوسیه‌ها) می‌توانند، در جریان جمع‌زدن بر روی حالت‌های مختلف آمیزه آماری، از بین بروند: همان‌طور که در بند ۲ دیده شد، همدوسیه‌های ρ_{+-} و ρ_{-+} به قطبش عرضی $\langle S_{\perp} \rangle$ اسپین وابسته‌اند و با جمع زدن بردارهای $\langle S_{\perp} \rangle$ مربوط به همه جهتها (هم احتمال) در صفحه xOy ، مسلماً نتیجه صفر به دست می‌آید.

۲. مورد یک اسپین ناقطبیده نیز برای درک عدم امکان تشریح یک آمیزه آماری به کمک یک "بردار حالت میانگین" بسیار آموزنده است. در واقع سعی کنیم ضرایب α و β را چنان انتخاب کنیم که بک

$$|\psi\rangle = \alpha |+\rangle + \beta |-\rangle \quad (7)$$

با

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (8)$$

نمایانگر یک اسپین ناقطبیده باشد، که برای آن $\langle S_x \rangle$ ، $\langle S_y \rangle$ ، و $\langle S_z \rangle$ صفرند. یک محاسبه ساده می‌دهد

$$\begin{aligned}\langle S_x \rangle &= \frac{\hbar}{2}(\alpha^* \beta + \alpha \beta^*) \\ \langle S_y \rangle &= \frac{\hbar}{2i}(\alpha^* \beta - \alpha \beta^*) \\ \langle S_z \rangle &= \frac{\hbar}{2}(\alpha^* \alpha - \beta^* \beta)\end{aligned}\quad (9)$$

اگر بخواهیم $\langle S_x \rangle$ صفر شود، باید α و β را چنان انتخاب کنیم که $\alpha^* \beta$ موهومی خالص باشد. همچنین باید $\alpha^* \beta$ حقیقی باشد تا $\langle S_y \rangle$ صفر شود. در این صورت باید $\alpha^* \beta = 0$ باشد، یعنی

$$\begin{aligned}\langle S_x \rangle &= -\hbar/2 \quad |\beta| = 1 \quad \alpha = 0 \\ \langle S_z \rangle &= -\hbar/2 \quad |\alpha| = 1 \quad \beta = 0\end{aligned}$$

بدین ترتیب، $\langle S_x \rangle$ نمی‌تواند همزمان با $\langle S_x \rangle$ و $\langle S_y \rangle$ برابر صفر شود. در نتیجه، حالت (۷) نمی‌تواند یک اسپین ناقطبیده را نمایش دهد.

از طرف دیگر، بحث بخش ۴-۲-۱ (ج) نشان می‌دهد که α و β که در (۸) صدق می‌کنند هرچه باشند، می‌توان همیشه بدانها دو زاویه θ و φ ، که یک راستای u را مشخص می‌کنند، به‌گونه‌ای نسبت داد که $\langle \psi |$ ویژه‌بردار $S \cdot u$ با ارزش ویژه $\hbar/2 +$ باشد. بنابراین، مستقیماً دیده می‌شود که حالتی چون (۷)، همیشه یک اسپین کاملاً قطبیده را در راستایی از فضا توصیف می‌کند.

۳. ماتریس چگالی (۵) یک آمیزه آماری از حالت‌های مختلف « $+$ » را نشان می‌دهد، در حالی که همه راستاهای u هم‌احتمال هستند (به همین ترتیب بود که آن را به‌دست آورده بودیم). با این همه، می‌توان آمیزه‌های آماری دیگری تصور کرد که به همان ماتریس چگالی منجر شوند. به‌عنوان مثال، یک آمیزه آماری با نسبت‌های برابر از حالت‌های « $+$ » و « $-$ » یا یک آمیزه آماری از سه حالت « $+$ » به‌گونه‌ای که انتهای سه بردار u مربوط به آنها رأسهای یک مثلث متساوی‌الاضلاع با مرکز O تشکیل دهند. بدین ترتیب دیده می‌شود که یک ماتریس چگالی معین می‌تواند از راه‌های مختلف به‌دست آید. در عمل، چون پیش‌بینی‌های فیزیکی تنها به ماتریس چگالی مربوط است، غیرممکن است بتوان انواع آمیزه‌های آماری مختلف را که به یک ماتریس چگالی می‌انجامد، به‌طور فیزیکی از یکدیگر تمیز داد. آنها را باید به‌عنوان عبارتهای گوناگون برای همان اطلاعات ناقصی که از دستگاه داریم در نظر گرفت.

۴. اسپین ۱/۲ در تعادل ترمودینامیکی در یک میدان ایستا

یک اسپین ۱/۲ را که در یک میدان ایستای B_0 موازی با Oz قرار گرفته است، در نظر می‌گیریم. در بخش ۴-۲-۳ دیده شد که حالت‌های مانای این اسپین، حالت‌های $|+\rangle$ و $|-\rangle$ با انرژی $+\hbar\omega_0/2$ و $-\hbar\omega_0/2$ (با $\omega_0 = -\gamma B_0$) نسبت ژیرومغناطیسی اسپین) هستند. اگر فقط بدانیم که دستگاه در تعادل ترمودینامیکی در دمای T است، می‌توان اثبات کرد که بودن در حالت $|+\rangle$ دارای احتمال $Z^{-1}e^{-\hbar\omega_0/2kT}$ و بودن در حالت $|-\rangle$ دارای احتمال $Z^{-1}e^{+\hbar\omega_0/2kT}$ است. اینجا آمیزه آماری دیگری داریم که با ماتریس چگالی زیر بیان می‌شود

$$\rho = Z^{-1} \begin{pmatrix} e^{-\hbar\omega_0/2kT} & 0 \\ 0 & e^{+\hbar\omega_0/2kT} \end{pmatrix} \quad (10)$$

در اینجا نیز می‌توان به آسانی تحقیق کرد که $\rho^2 \neq \rho$ است. صفر بودن عنصرهای غیرقطری از این واقعیت حاصل می‌شود که همه راستاهای عمود بر B_0 (یعنی بر Oz) که با φ مشخص می‌شوند، هم‌ارزند.

به کمک (۱۰) به سادگی می‌توان نتیجه گرفت

$$\begin{aligned} \langle S_x \rangle &= \text{Tr}(\rho S_x) = 0 \\ \langle S_y \rangle &= \text{Tr}(\rho S_y) = 0 \\ \langle S_z \rangle &= \text{Tr}(\rho S_z) = -\frac{\hbar}{2} \tanh\left(\frac{\hbar\omega_0}{2kT}\right) \end{aligned} \quad (11)$$

دیده می‌شود که اسپین در راستای موازی با میدان که در آن قرار گرفته است قطبی می‌شود. هر چه ω_0 (یعنی B_0) بیشتر و دمای T پایین‌تر باشد، قطبش آن بزرگتر است. چون $|\tanh x| < 1$ است، این قطبش از $\hbar/2$ ، مربوط به یک اسپین کاملاً قطبی شده در راستای Oz ، کمتر است. پس می‌توان گفت که (۱۰) یک اسپین "به‌طور جزئی قطبیده" در راستای Oz را تشریح می‌کند. یادداشت:

مغناطش $\langle M_z \rangle$ برابر با $\gamma \langle S_z \rangle$ است. به کمک (۱۱) می‌توان پذیرفتاری پارامغناطیسی χ اسپین را که توسط

$$\langle M_z \rangle = \gamma \langle S_z \rangle = \chi B_0 \quad (12)$$

تعریف می شود محاسبه کرد. نتیجه خواهیم گرفت (فرمول بریلوئن)

$$\chi = \frac{\hbar\gamma}{\gamma B_0} \tanh\left(\frac{\hbar\gamma B_0}{\gamma kT}\right) \quad (13)$$

۵. بسط ماتریس چگالی برحسب ماتریسهای پاؤلی

در مکمل ۱ دیدیم که ماتریس یکۀ I و ماتریسهای پاؤلی $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ و تشکیل پایه ای می دهند که می توان ماتریسهای 2×2 را در آن بسط داد. بنابراین برای ماتریس چگالی ρ یک اسپین ۱/۲ می نویسیم

$$\rho = a_0 I + \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (14)$$

ضریبهای a_i با روابط زیر داده می شوند [مکمل ۱، رابطه (۲۳)]

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{1}{4} \text{Tr } \rho \\ a_x &= \frac{1}{4} \text{Tr } (\rho \sigma_x) = \frac{1}{\hbar} \text{Tr } (\rho S_x) \\ a_y &= \frac{1}{4} \text{Tr } (\rho \sigma_y) = \frac{1}{\hbar} \text{Tr } (\rho S_y) \\ a_z &= \frac{1}{4} \text{Tr } (\rho \sigma_z) = \frac{1}{\hbar} \text{Tr } (\rho S_z) \end{aligned} \quad (15)$$

در این صورت خواهیم داشت

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{1}{4} \\ \mathbf{a} &= \frac{1}{\hbar} \langle \mathbf{S} \rangle \end{aligned} \quad (16)$$

و ρ به صورت زیر نوشته می شود

$$\rho = \frac{1}{4} I + \frac{1}{\hbar} \langle \mathbf{S} \rangle \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (17)$$

بنابراین، ماتریس چگالی ρ یک اسپین ۱/۲ به سادگی برحسب اندازه میانگین اسپین $\langle \mathbf{S} \rangle$

بیان می شود.

یادداشت:

عبارت (۱۷) را به توان دوم برسانیم. با به کار بردن اتحاد (۱۷) از مکمل ۱ همین فصل خواهیم یافت

$$\rho^2 = \frac{1}{4}I + \frac{1}{\hbar^2}\langle S \rangle^2 I + \frac{1}{\hbar}\langle S \rangle \cdot \sigma \quad (18)$$

بنابراین شرط $\rho^2 = \rho$ ، مشخصه مورد خالص، برای یک اسپین ۱/۲ معادل است با

$$\langle S \rangle^2 = \frac{\hbar^2}{4} \quad (19)$$

البته این شرط برای یک اسپین ناقطبیده تحقق نمی‌یابد (زیرا $\langle S \rangle$ در این صورت صفر است) و همچنین است برای یک اسپین در تعادل ترمودینامیکی (زیرا همان‌طور که در بخش ۴ دیده شد، در این مورد $|\langle S \rangle| < \hbar/2$). برعکس، می‌توان به کمک فرمولهای (۴-۳۶) تحقیق کرد که، برای یک اسپین در حالت $|\psi\rangle$ که با (۱) داده می‌شود، $\langle S^2 \rangle$ واقعاً برابر $\hbar^2/4$ است. ■

مراجع برای مطالعه بیشتر

Abraham (14.1), chap. II, §C.

مکمل ۶

اسپین $1/2$ در یک میدان مغناطیسی ایستا و یک میدان چرخان: تشدید مغناطیسی

۱. بررسی کلاسیک؛ چارچوب مرجع چرخان
الف) حرکت در یک میدان ایستا؛ حرکت تقدیمی لارمور
ب) تأثیر یک میدان چرخان؛ تشدید
۲. بررسی کوانتومی
الف) معادله شرودینگر
ب) معادله در چارچوب مرجع چرخان
ج) احتمال گذار؛ رابطه رابی
د) حالتی که دو زیرتراز ناپایدارند
۳. بستگی میان بررسی کلاسیک و بررسی کوانتومی؛ تحول $\langle M \rangle$
۴. معادله‌های بلوخ
الف) مطالعه یک مثال واقعی
ب) حل در مورد یک میدان چرخان

در فصل چهارم، به کمک مکانیک کوانتومی تحول یک اسپین $1/2$ در یک میدان مغناطیسی ایستا را بررسی کردیم. در این مکمل، مورد یک اسپین $1/2$ را در نظر می‌گیریم که تحت اثر چند میدان مغناطیسی قرار گرفته است که برخی از آنها می‌توانند وابسته به زمان باشند. این کیفیت در آزمایش‌های تشدید مغناطیسی رخ می‌دهد. قبل از بررسی مسئله از دیدگاه کوانتومی، نتایجی چند از فیزیک کلاسیک را به سرعت یادآوری می‌کنیم.

۱. بررسی کلاسیک؛ چارچوب مرجع چرخان
الف) حرکت در یک میدان ایستا؛ حرکت تقدیمی لارمور
یک دستگاه تکانه زاویه‌ای Z را که دارای گشتاور مغناطیسی $\gamma = m$ (ثابت γ ، نسبت ژیرومغناطیسی دستگاه است)، همخط با Z است و در یک میدان مغناطیسی ایستای B_0 قرار دارد، در نظر

بگیریم. این میدان بر روی دستگاه گشتاوری وارد می‌کند و معادله کلاسیک تحول \mathbf{j} عبارت است از

$$\frac{d\mathbf{j}}{dt} = \mathbf{m} \times \mathbf{B}_0 \quad (۱)$$

یا

$$\frac{d}{dt} \mathbf{m}(t) = \gamma \mathbf{m}(t) \times \mathbf{B}_0 \quad (۲)$$

با ضرب زده‌های دو طرف این معادله در $\mathbf{m}(t)$ و در \mathbf{B}_0 ، به دست می‌آید

$$\frac{d}{dt} [\mathbf{m}(t)]^2 = 0 \quad (۳)$$

$$\frac{d}{dt} [\mathbf{m}(t) \cdot \mathbf{B}_0] = 0 \quad (۴)$$

بدین ترتیب، در حالی که قدرمطلق $\mathbf{m}(t)$ ثابت می‌ماند، این بردار با حفظ زاویه ثابتی با \mathbf{B}_0 تحول می‌یابد. بنابراین کافی است معادله (۲) را بر روی صفحه عمود بر \mathbf{B}_0 تصویر کنیم تا دریابیم که $\mathbf{m}(t)$ با سرعت زاویه‌ای $\omega_0 = -\gamma \mathbf{B}_0$ ، به دور \mathbf{B}_0 می‌چرخد (اگر γ مثبت باشد، دوران پادساعتگرد است).

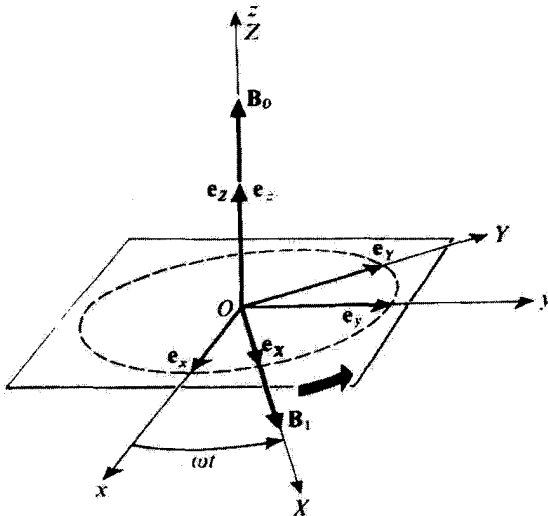
(ب) تأثیر یک میدان چرخان؛ تشدید

اکنون فرض کنیم که علاوه بر میدان ایستای \mathbf{B}_0 ، یک میدان $\mathbf{B}_1(t)$ عمود بر \mathbf{B}_0 با قدرمطلق ثابت که با سرعت زاویه‌ای ω به دور \mathbf{B}_0 می‌چرخد، اضافه شود (شکل ۱). قرار می‌دهیم

$$\begin{aligned} \omega_0 &= -\gamma \mathbf{B}_0 \\ \omega_1 &= -\gamma \mathbf{B}_1 \end{aligned} \quad (۵)$$

$Oxyz$ (با بردارهای $\mathbf{e}_z, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_x$) را یک سه‌وجهی راستگوشه ثابت، که محور Oz آن در راستای \mathbf{B}_0 است، در نظر می‌گیریم و $OXYZ$ (با بردارهای $\mathbf{e}_z, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_x$) را با چرخش $Oxyz$ به اندازه زاویه ωt به دور Oz به دست می‌آوریم [در راستای میدان چرخان $\mathbf{B}_1(t)$ است]. معادله تحول $\mathbf{m}(t)$ در میدان کل $\mathbf{B}(t) = \mathbf{B}_0 + \mathbf{B}_1(t)$ چنین است

$$\frac{d}{dt} \mathbf{m}(t) = \gamma \mathbf{m}(t) \times [\mathbf{B}_0 + \mathbf{B}_1(t)] \quad (۶)$$



شکل ۱ $Oxyz$ چارچوب مرجع ثابتی است. میدان مغناطیسی ایستای B_0 در راستای محور Oz آن قرار دارد. دستگاه $OXYZ$ که محور Ox آن در راستای میدان $B_1(t)$ است به دور Oz با سرعت زاویه‌ای ω می‌چرخد.

برای حل این معادله، مناسب است به جای در نظر گرفتن چارچوب مرجع مطلق $Oxyz$ ، مسئله را در دستگاه مختصات $OXYZ$ که در آن بردار $m(t)$ دارای سرعت نسبی

$$\left(\frac{dm}{dt}\right)_{rel} = \frac{dm}{dt} - \omega e_z \times m(t) \quad (7)$$

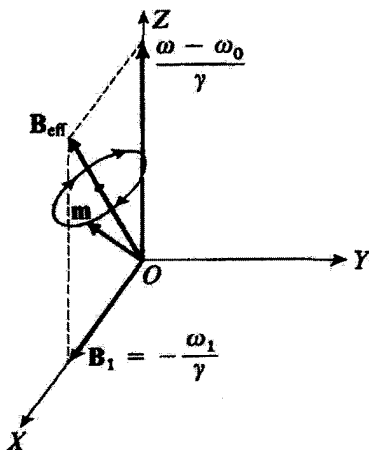
است، بررسی کنیم. قرار می‌دهیم

$$\Delta\omega = \omega - \omega_0 \quad (8)$$

رابطه (۶) را در تساوی (۷) ببریم، به دست خواهد آمد

$$\left(\frac{dm}{dt}\right)_{rel} = m(t) \times [\Delta\omega e_z - \omega_1 e_x] \quad (9)$$

حل این معادله خیلی ساده‌تر از حل معادله (۶) است، زیرا ضریبهای طرف دوم این معادله مستقل از زمان هستند. و به اضافه، دارای شکلی مشابه با (۲) است. بنابراین، حرکت نسبی بردار $m(t)$ چرخشی به دور "میدان مؤثر" B_{eff} است، که نسبت به چارچوب مرجع چرخان ساکن است و چنین داده می‌شود (شکل ۲)



شکل ۲ میدان مؤثر B_{eff} ، در دستگاه مختصات چرخان $OXYZ$ ، دارای راستای ثابتی است که گشتاور مغناطیسی $m(t)$ به دور آن با سرعت زاویه‌ای ثابتی می‌چرخد (حرکت تقدیمی در چارچوب مرجع چرخان).

$$B_{\text{eff}} = \frac{1}{\gamma} [\Delta\omega e_z - \omega_1 e_x] \quad (۱۰)$$

برای به دست آوردن حرکت مطلق $m(t)$ کافی است این حرکت تقدیمی به دور B_{eff} را با یک چرخش به دور Oz با سرعت زاویه‌ای ω ترکیب کنیم.

این نخستین نتایج امکان می‌دهند تا اساس پدیدهٔ تشدید مغناطیسی را درک کنیم. در حقیقت، یک گشتاور مغناطیسی را که در لحظهٔ $t = 0$ موازی B_0 است (وضعی که، به‌عنوان مثال، در دمای بسیار پایین برای یک گشتاور مغناطیسی که در تعادل ترمودینامیکی است پیش می‌آید: دستگاه در پایین‌ترین حالت انرژی ممکن در میدان مغناطیسی B_0 است) در نظر بگیریم. اگر یک میدان ضعیف چرخان $B_1(t)$ اعمال شود، چه پیش می‌آید؟ اگر بسامد $\omega/2\pi$ چرخش این میدان با بسامد ویژهٔ $\omega_0/2\pi$ اختلاف زیادی داشته باشد (به‌طور دقیقتر، اگر $\Delta\omega = \omega - \omega_0$ در مقابل ω_1 بسیار بزرگ باشد)، میدان مؤثر عملاً در راستای Oz است. حرکت تقدیمی $m(t)$ به دور B_{eff} در این صورت دارای دامنهٔ بسیار ضعیفی است و راستای گشتاور مغناطیسی را اندکی تغییر می‌دهد. برعکس، اگر شرط تشدید $\omega \simeq (\omega_1) \ll \Delta\omega$ برقرار باشد، میدان B_{eff} زاویهٔ بزرگی با Oz می‌سازد. حرکت تقدیمی گشتاور مغناطیسی در این صورت دارای دامنهٔ بزرگی است و، در تشدید ($\Delta\omega = 0$)، گشتاور مغناطیسی می‌تواند کاملاً وارونه شود.

۲. بررسی کوانتومی

الف) معادله شرودینگر

$|+\rangle$ و $|-\rangle$ را دو ویژه بردار تصویر S_z اسپین بر روی Oz ، به ترتیب با ویژه مقادیرهای $+\hbar/2$ و $-\hbar/2$ در نظر بگیریم. بردار حالت دستگاه می تواند چنین نوشته شود

$$|\psi(t)\rangle = a_+(t)|+\rangle + a_-(t)|-\rangle \quad (11)$$

عملگر هامیلتونی دستگاه عبارت است از^۱

$$H(t) = -\mathbf{M} \cdot \mathbf{B}(t) = -\gamma \mathbf{S} \cdot [\mathbf{B}_0 + \mathbf{B}_1(t)] \quad (12)$$

با بسط حاصلضرب زده ای، چنین به دست می آید

$$H(t) = \omega_0 S_z + \omega_1 [\cos \omega t S_x + \sin \omega t S_y] \quad (13)$$

با به کار بردن فرمولهای (۱۶-۴) و (۱۷-۴)، ماتریس نماینده H در پایه $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ را به صورت زیر به دست می آوریم

$$H = \frac{\hbar}{\gamma} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 e^{-i\omega t} \\ \omega_1 e^{i\omega t} & -\omega_0 \end{pmatrix} \quad (14)$$

به کمک (۱۱) و (۱۴)، می توان معادله شرودینگر را بدین شکل نوشت

$$\begin{cases} i \frac{d}{dt} a_+(t) = \frac{\omega_0}{\gamma} a_+(t) + \frac{\omega_1}{\gamma} e^{-i\omega t} a_-(t) \\ i \frac{d}{dt} a_-(t) = \frac{\omega_1}{\gamma} e^{i\omega t} a_+(t) - \frac{\omega_0}{\gamma} a_-(t) \end{cases} \quad (15)$$

۱. در عبارت (۱۲)، $\mathbf{M} \cdot \mathbf{B}(t)$ نماد حاصلضرب زده ای $M_x B_x(t) + M_y B_y(t) + M_z B_z(t)$ است که در M_x, M_y, M_z عملگر (یعنی مشاهده پذیرهای دستگاه مورد مطالعه) هستند، در حالی که $B_x(t), B_y(t), B_z(t)$ عدد هستند (زیرا میدان مغناطیسی را همچون یک کمیت کلاسیک در نظر می گیریم که مقدار آن به وسیله یک وسیله تجربی خارجی مستقل از دستگاه مورد مطالعه تعیین می شود).

ب) معادله در چارچوب مرجع چرخان

معادلات (۱۵) یک دستگاه خطی و همگن با ضریبهای وابسته به زمان هستند. مناسب است که تغییر تابعهای به شکل زیر در نظر بگیریم

$$\begin{aligned} b_+(t) &= e^{i\omega t/\gamma} a_+(t) \\ b_-(t) &= e^{-i\omega t/\gamma} a_-(t) \end{aligned} \quad (16)$$

با قراردادن تابعهای (۱۶) در معادله (۱۵) دستگاه معادلاتی حاصل می‌شود که ضرایب آنها، این بار، مستقل از زمان است

$$\begin{cases} i \frac{d}{dt} b_+(t) = -\frac{\Delta\omega}{\gamma} b_+(t) + \frac{\omega_1}{\gamma} b_-(t) \\ i \frac{d}{dt} b_-(t) = \frac{\omega_1}{\gamma} b_+(t) + \frac{\Delta\omega}{\gamma} b_-(t) \end{cases} \quad (17)$$

این دستگاه را می‌توان چنین نیز نوشت

$$i\hbar \frac{d}{dt} | \tilde{\psi}(t) \rangle = \tilde{H} | \tilde{\psi}(t) \rangle \quad (18)$$

که در آن کیت $| \tilde{\psi}(t) \rangle$ و عملگر \tilde{H} عبارت‌اند از

$$| \tilde{\psi}(t) \rangle = b_+ | (t) + \rangle + b_-(t) | - \rangle \quad (19)$$

$$\tilde{H} = \frac{\hbar}{\gamma} \begin{pmatrix} -\Delta\omega & \omega_1 \\ \omega_1 & \Delta\omega \end{pmatrix} \quad (20)$$

تبدیل (۱۶) به معادله (۱۸) منجر می‌شود که مشابه با معادله شرودینگری است که در آن عملگر \tilde{H} ، که با (۲۰) داده شده است، نقش هامیلتونی مستقل از زمان را بازی می‌کند. \tilde{H} برهم‌کنش اسپین با یک میدان ثابت را، که مؤلفه‌های آن همان مؤلفه‌های میدان مؤثری است که قبلاً در چارچوب مرجع $OXYZ$ وارد شد [رابطه (۱۰)]، توصیف می‌کند. پس می‌توان تبدیل (۱۶) را هم‌ارز کوانتومی رفتن از چارچوب مرجع ثابت $Oxyz$ به چارچوب مرجع چرخان $OXYZ$ در نظر گرفت.

این نتیجه را می‌توان دقیقاً به‌دست آورد. در واقع، بنابر (۱۶)، می‌توان نوشت

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = R(t) |\psi(t)\rangle \quad (21)$$

که در آن $R(t)$ یک عملگر یکانی است که چنین تعریف می‌شود

$$R(t) = e^{i\omega t S_z / \hbar} \quad (22)$$

بعد خواهیم دید (مکمل ۲ همین فصل را ببینید) که $R(t)$ چرخش چارچوب مرجع به اندازه زاویه ωt به دور Oz را بیان می‌کند. پس (۱۸) بیانگر معادله شروودینگر در چارچوب مرجع چرخان $OXYZ$ است.

حل معادله (۱۸) بسیار ساده است. برای تعیین $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ ، با دانستن $|\tilde{\psi}(0)\rangle$ ، کافی است $|\tilde{\psi}(0)\rangle$ را برحسب ویژه‌بردارهای \hat{H} (که به‌دقت قابل محاسبه هستند) بسط داد و سپس قاعده (D-54) فصل سوم را به‌کاربرد (کاری که شدنی است زیرا \hat{H} به‌طور صریح به زمان وابسته نیست). سرانجام به‌وسیله فرمولهای (۱۶)، $|\psi(t)\rangle$ از $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ به‌دست می‌آید.

ج) احتمال‌گذار؛ رابطه رابی

اسپینی را در نظر بگیریم که، در لحظه $t = 0$ ، در حالت $|+\rangle$ باشد

$$|\psi(0)\rangle = |+\rangle \quad (23)$$

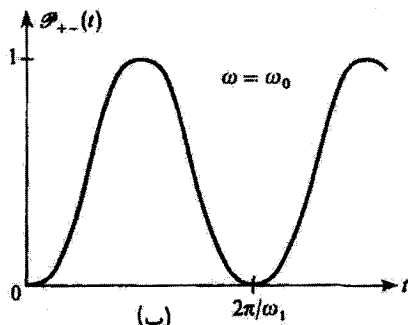
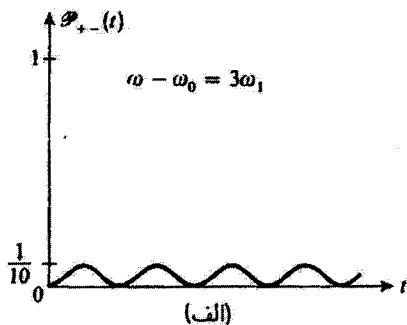
این کت بنابر رابطه (۱۶) متناظر است با

$$|\tilde{\psi}(0)\rangle = |+\rangle \quad (24)$$

اکنون ببینیم احتمال آنکه اسپین در لحظه t در حالت $|-\rangle$ باشد چیست؟ چون $a_-(t)$ و $b_-(t)$ دارای قدرمطلق یکسانی هستند، می‌توان نوشت

$$|\mathcal{P}_{+-}(t)| = |\langle - | \psi(t) \rangle|^2 = |a_-(t)|^2 = |b_-(t)|^2 = |\langle - | \tilde{\psi}(t) \rangle|^2 \quad (25)$$

بنابراین، لازم است $|\langle - | \tilde{\psi}(t) \rangle|^2$ را که در آن $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ پاسخ (۱۸) با شرط آغازی (۲۴) است حساب کنیم.



شکل ۳ تغییرات احتمال گذار میان حالت‌های $|+\rangle$ و $|-\rangle$ در اثر یک میدان مغناطیسی چرخان $B_1(t)$ ، برحسب زمان. خارج از تشدید (الف)، این احتمال ضعیف می‌ماند. در نقطه تشدید (ب) هر اندازه هم B_1 کوچک باشد، باز در لحظه‌هایی احتمال گذار برابر واحد است.

مسئله‌ای که در اینجا طرح شد، قبلاً در بخش ۴-۳-۳ (ب) حل شده است. برای استفاده از محاسبات آن بخش، کافی است تناظرهای زیر را به‌کار ببریم

$$\begin{aligned} |\varphi_1\rangle &\rightarrow |+\rangle \\ |\varphi_2\rangle &\rightarrow |-\rangle \\ E_1 &\rightarrow -\frac{\hbar}{\gamma}\Delta\omega \\ E_2 &\rightarrow \frac{\hbar}{\gamma}\Delta\omega \\ W_{12} &\rightarrow \frac{\hbar}{\gamma}\omega_1 \end{aligned} \tag{۲۶}$$

رابطهٔ رابی [معادلهٔ (۴-۸)] در این صورت می‌شود

$$\mathcal{P}_{+-}(t) = \frac{\omega_1^2}{\omega_1^2 + (\Delta\omega)^2} \sin^2 \left[\sqrt{\omega_1^2 + (\Delta\omega)^2} \frac{t}{\gamma} \right] \tag{۲۷}$$

احتمال $\mathcal{P}_{+-}(t)$ ، که البته در $t = 0$ برابر صفر است، برحسب زمان به صورت سینوسی میان صفر و $\omega_1^2 / [\omega_1^2 + (\Delta\omega)^2]$ تغییر می‌کند. در اینجا نیز پدیدهٔ تشدید پدیدار می‌شود. در حقیقت برای $|\Delta\omega| \gg \omega_1$ ، همیشه $\mathcal{P}_{+-}(t)$ در حدود صفر باقی می‌ماند [شکل ۳ (الف)] و برعکس نزدیک تشدید، دامنهٔ $\mathcal{P}_{+-}(t)$ افزایش می‌یابد و هنگامی که شرط $\Delta\omega = 0$ دقیقاً برقرار شود، در لحظه‌های $t = (2n + 1)\pi/\omega_1$ خواهیم داشت $\mathcal{P}_{+-}(t) = 1$ [شکل ۳ (ب)].

بدین ترتیب دوباره نتیجه‌ای را به دست می‌آوریم که قبلاً به طور کلاسیک به دست آورده بودیم. در نقطهٔ تشدید، یک میدان چرخان بسیار ضعیف می‌تواند راستای اسپین را وارونه کند. به علاوه، توجه کنیم که بسامد زاویه‌ای نوسان $\mathcal{P}_{+-}(t)$ برابر $|\gamma \mathbf{B}_{\text{eff}}| = \sqrt{\omega_L^2 + (\Delta\omega)^2}$ است. این نوسان، در چارچوب مرجع چرخان، به تصویر حرکت تقدیمی گشتاور مغناطیسی به دور میدان مؤثر بر روی OZ مربوط است و گاهی "حرکت تقدیمی رابی" نامیده می‌شود [همچنین محاسبهٔ $\mathcal{P}_{+-}(t)$ را که در بخش ۳-ج مکمل ۳ این فصل ارائه شده است ببینید].

د) حالتی که دو زیرتراز ناپایدارند

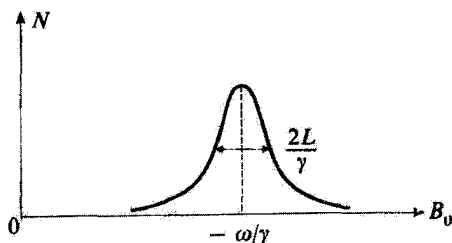
اکنون فرض می‌کنیم که دو حالت (\pm) مربوط به دو زیرتراز یک تراز اتمی برانگیخته (که گشتاور آن $1/2$ فرض می‌شود) باشد. در واحد زمان n اتم برانگیخته شده و به حالت $(+)$ می‌روند.^۱ هر اتم انرژی برانگیختگی خود را با تابش خود به خود، با احتمال $1/\tau$ در واحد زمان از دست می‌دهد. این احتمال برای دو زیرتراز (\pm) یکسان است. می‌دانیم که در این شرایط، برای اتمی که در لحظهٔ t برانگیخته شده است، احتمال اینکه در لحظهٔ $t = 0$ هنوز در حالت برانگیخته باشد $e^{-t/\tau}$ است (مکمل KIII را ببینید).

فرض می‌کنیم که آزمایش به حالت پایدار انجام شود، یعنی در حضور میدانهای \mathbf{B}_0 و $\mathbf{B}_1(t)$ ، آنها با یک آهنگ ثابت n به حالت $(+)$ برانگیخته شوند. اینک ببینیم پس از گذشت زمان بسیار طولانی در مقایسه با طول عمر τ ، تعداد اتمهای N ، که در واحد زمان از حالت $(-)$ به حالت پایه باز می‌گردند، چه مقدار است؟ اگر اتمی در لحظهٔ t برانگیخته شده باشد، احتمال آنکه در لحظهٔ $t = 0$ در حالت $(-)$ باشد برابر است با $\mathcal{P}_{+-}(t)e^{-t/\tau}$ ، که $\mathcal{P}_{+-}(t)$ با رابطهٔ (۲۷) داده می‌شود. تعداد محل اتمهای به حالت $(-)$ با جمع زدن اتمهای برانگیخته در همهٔ لحظه‌های قبلی $-t$ ، یعنی با محاسبهٔ انتگرال زیر به دست می‌آید

$$\int_0^{\infty} e^{-t/\tau} \mathcal{P}_{+-}(t) n dt \quad (28)$$

این انتگرال به سادگی محاسبه می‌شود. با ضرب کردن تعداد اتمهایی که بدین ترتیب به دست آمده‌اند در $1/\tau$ ،

۱. در عمل، این برانگیختگی می‌تواند، به عنوان مثال، با فرستادن یک باریکهٔ نورانی بر روی آنها تحقق یابد. هنگامی که فوتونهای فرودی قطبی باشند بقای تکانهٔ زاویه‌ای ایجاب می‌کند که در مواردی اتم بعد از جذب به حالت $(+)$ برسد (و نه به حالت $(-)$). همچنین، با آشکارسازی قطبش فوتونهایی که آنها دوباره گسیل می‌کنند، می‌توان دریافت که آنها یا از حالت $(+)$ به تراز پایه باز می‌گردند یا از حالت $(-)$.



شکل ۴ منحنی تشدید. برای مشاهده تشدید، آزمایشی فراهم می‌سازیم که در آن π اتم در واحد زمان به حالت (+) برانگیخته می‌شوند. تحت اثر یک میدان $B_1(t)$ که با بسامد $\omega/2\pi$ بچرخد، اتمها انتقالاتی را به سمت حالت (-) متحمل می‌شوند. در وضع پایدار، اگر تعداد اتمهایی N را که در واحد زمان از حالت (-) وامی‌باشند اندازه‌گیری کنیم، هنگامی که میدان ایستای B_0 پیرامون اندازه $-\omega/\gamma$ روئیده شود، یک تغییر تشدید به دست خواهد آمد.

یعنی احتمال واپاشی آنها را در واحد زمان، خواهیم داشت

$$N = \frac{n}{\gamma} \frac{\omega_1^2}{(\Delta\omega)^2 + \omega_1^2 + (\gamma/\tau)^2} \quad (29)$$

تغییر N برحسب $\Delta\omega$ ، با یک منحنی لورنتس، متناظر است، که نیم‌پهنای آن می‌شود

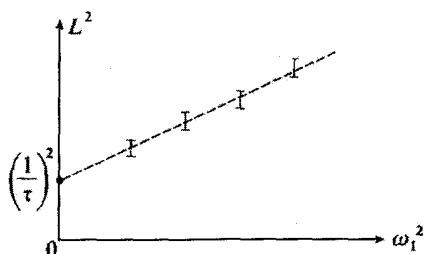
$$L = \sqrt{\omega_1^2 + (\gamma/\tau)^2} \quad (30)$$

در آزمایشی که در بالا شرح داده شد، برای اندازه‌های مختلف میدان مغناطیسی B_0 (یعنی، با فرض ثابت بودن ω ، برای اندازه‌های مختلف $\Delta\omega$)، تعداد اتمهایی که از تراز (-) وامی‌باشند را اندازه می‌گیریم. بنابر رابطه (۲۹) باید یک منحنی تشدید به صورتی که در شکل ۴ نشان داده شده است به دست آید. بسیار جالب است که یک چنین منحنی به‌طور تجربی به دست آید. در واقع، می‌توان اندازه چندین پارامتر را از آن نتیجه گرفت:

اگر ω شناخته شده باشد و اندازه B_0^m از میدان B_0 که متناظر با قله منحنی است اندازه‌گیری شود، نسبت ژیرومغناطیسی γ از رابطه $\gamma = -\omega/B_0^m$ نتیجه می‌شود.

اگر γ را بدانیم، می‌توانیم با اندازه‌گیری بسامد $\omega/2\pi$ مربوط به تشدید، میدان مغناطیسی ایستای B_0 را اندازه بگیریم. آهنرباسنجهای مختلف که دقتشان اغلب بسیار زیاد است، بر پایه این اصل کار می‌کنند. در مواردی چند می‌توان آگاهیهای جالبی از این گونه اندازه‌گیری میدان به دست آورد. برای مثال اگر اسپین مورد نظر اسپین یک هسته متعلق به یک مولکول یا یک شبکه بلورین باشد، می‌توان میدان موضعی از دید هسته، تغییرات آن برحسب مکان، و غیره را شناخت.

اگر L^2 مجذور نیم‌پهنای را برحسب ω_1^2 رسم کنیم، یک خط مستقیم به دست می‌آید که با برون‌یابی آن تا $\omega_1 = 0$ ، عمر τ تراز برانگیخته به دست می‌آید (شکل ۵).



شکل ۵. برون‌یابی تا $\omega_1 = 0$ از مربع شده نیم‌پهنای L منحنی تشدید در شکل ۴ عمر τ تراز مورد بررسی به دست می‌آید.

۳. بستگی میان بررسی کلاسیک و بررسی کوانتومی: تحول $\langle M \rangle$

نتایجی که در بخش‌های ۱ و ۲ به دست آمد، با وجود اینکه در موردی مکانیک کلاسیک و در مورد دیگر مکانیک کوانتومی به کار رفته است، بسیار مشابه هستند. اکنون نشان خواهیم داد که این شباهت اتفاقی نیست. این تشابه از این واقعیت ناشی می‌شود که معادلات تحول مکانیک کوانتومی در مورد مقدار میانگین گشتاور مغناطیسی واقع در یک میدان مغناطیسی اختیاری، با معادلات کلاسیکی متناظر، یکسان هستند.

اندازه میانگین گشتاور مغناطیسی وابسته به یک اسپین ۱/۲ عبارت است از

$$\langle M \rangle(t) = \gamma \langle S \rangle(t) \quad (31)$$

برای محاسبه تحول $\langle M \rangle(t)$ ، قضیه (D-۲۷) فصل سوم، یعنی

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle M \rangle(t) = \langle [M, H(t)] \rangle \quad (32)$$

را به کار می‌بریم که در آن $H(t)$ عبارت است از عملگر

$$H(t) = -\mathbf{M} \cdot \mathbf{B}(t) \quad (33)$$

به عنوان مثال، جابه‌جاگر $[M_x, H(t)]$ را محاسبه می‌کنیم. با استفاده از این واقعیت که مؤلفه‌های میدان $B_y(t)$ و $B_z(t)$ عدد هستند [یادداشت بخش ۲ (الف)]، حاصل می‌شود

$$\begin{aligned} [M_x, H(t)] &= -\gamma^2 [S_x, S_x B_x(t) + S_y B_y(t) + S_z B_z(t)] \\ &= -\gamma^2 B_y(t) [S_x, S_y] - \gamma^2 B_z(t) [S_x, S_z] \end{aligned} \quad (34)$$

با به‌کار بردن رابطه‌های (۱۴) از مکمل ۱ همین فصل، به‌دست می‌آید

$$[M_x, H(t)] = i\hbar\gamma^2 [B_z(t)S_y - B_y(t)S_z] \quad (۳۵)$$

با بردن (۳۵) در (۳۲)، خواهیم داشت

$$\frac{d}{dt}\langle M_x \rangle(t) = \gamma [B_z(t)\langle M_y \rangle(t) - B_y(t)\langle M_z \rangle(t)] \quad (۳۶)$$

با جایگشت دایره‌ای، می‌توان عبارتهای مشابهی برای مؤلفه‌ها روی Oy و Oz به‌دست آورد. سه معادله حاصل را می‌توان به شکل فشرده به صورت زیر نوشت

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{M} \rangle(t) = \gamma \langle \mathbf{M} \rangle(t) \times \mathbf{B}(t) \quad (۳۷)$$

(۳۷) را با (۶) مقایسه کنیم: وابستگی میدان مغناطیسی $\mathbf{B}(t)$ به زمان هر چه باشد، تحول اندازه میانگین $\langle \mathbf{M} \rangle(t)$ دقیقاً از معادلات کلاسیک پیروی می‌کند.

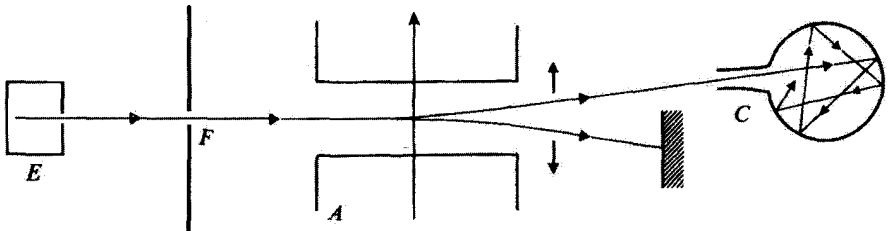
۴. معادله‌های بلوخ

در عمل، در یک آزمایش تشدید مغناطیسی، گشتاور مغناطیسی تنها یک اسپین را مشاهده نمی‌کنند، بلکه گشتاور مغناطیسی شمار زیادی اسپین همسان را بررسی می‌کنند (مانند آزمایش مشروح در بخش ۲-۲-۱ پیشین که در آن تعداد اتمهایی که از حالت برانگیخته (-) خارج می‌شوند اندازه‌گیری می‌شود). به‌اضافه، تنها کمیت $\mathcal{P}_+(t)$ که قبلاً محاسبه شد مورد نظر نیست، بلکه همچنین می‌توان \mathcal{M} مغناطیدگی کلی نمونه مورد مطالعه، یعنی مجموع اندازه‌های میانگین مشاهده‌پذیر \mathcal{M} متناظر با هر اسپین نمونه را، اندازه گرفت.^۱ بنابراین، دستیابی به معادله‌های تحول \mathcal{M} ، که معادله‌های بلوخ نام دارد، جالب توجه است. برای درک معنای فیزیکی جمله‌های مختلفی که در این معادلات پدید می‌آیند، آنها را در یک مورد ساده و واقعی به‌دست می‌آوریم. نتایج به‌دست آمده به وضعهای پیچیده‌تر تعمیم داده می‌شود.

الف) مطالعه یک مثال واقعی

باریکه‌ای از اتمهایی را در نظر بگیریم که، از یک قطبی‌کننده اتمی، از نوعی که در بخش (۴-۲-۱ الف)

۱. به‌عنوان مثال، نیروی محرکه الکتریکی القاشده در یک سیم‌پیچ را، به وسیله تغییرات \mathcal{M} برحسب زمان اندازه‌گیری می‌کنند.



شکل ۶ طرحی ترسیمی از یک دستگاه تجربی که اتمهایی در حالت $(+)$ را برای سلول C تأمین می‌کند.

بررسی شد، خارج می‌شود. همه اتمهای باریکه در حالت اسپین $(+)$ هستند^۱ و بنابراین گشتاور مغناطیسی آنها موازی با Oz است. این اتمها از روزنه کوچکی داخل یک سلول C (شکل ۶) می‌شوند، چندین بار بر روی دیواره‌های داخلی آن بازتاب می‌یابند و سرانجام از همان روزنه خارج می‌شوند.

تعداد اتمهای قطبیده‌ای را که در واحد زمان به سلول وارد می‌شوند، n می‌گیریم. n عموماً کوچک است و چگالی اتمی داخل سلول آن قدر کم است که می‌توان از برهم‌کنش میان اتمها صرف‌نظر کرد. به‌اضافه، اگر دیواره‌های داخلی سلول از اندوده مناسبی پوشیده شده باشد، برخوردها بر روی دیواره حالت اسپین اتمها را بسیار کم تغییر می‌دهد.^۲ می‌پذیریم که احتمال از بین رفتن مغناطیدگی ابتدایی اتمهایی که وارد سلول می‌شوند برابر $1/TR$ در واحد زمان است که یا به یک برخورد واقطنبده در روی دیوار مربوط می‌شود و یا فقط به این خاطر است که اتم از سلول خارج شده است. TR "زمان واهلش" نام دارد. سلول در یک میدان مغناطیسی $\mathbf{B}(t)$ قرار داده می‌شود که احتمالاً دارای یک مؤلفه ایستا و یک مؤلفه چرخان است. مسئله عبارت از یافتن معادله تحول مغناطیدگی کلی $\mathcal{M}(t)$ اتمهایی است که در لحظه t در داخل سلول هستند. نخست عبارت دقیق $\mathcal{M}(t)$ را می‌نویسیم

$$\mathcal{M}(t) = \sum_{i=1}^N \langle \psi^{(i)}(t) | \mathbf{M} | \psi^{(i)}(t) \rangle = \sum_{i=1}^N \mathcal{M}^{(i)}(t) \quad (38)$$

در (۳۸) جمع‌بندی بر روی \mathcal{N} اسپین که، در لحظه t ، هنوز از سلول خارج نشده‌اند و برخورد واقطنبده نداشته‌اند انجام گرفته است. $\langle \psi^{(i)}(t) | \mathbf{M} | \psi^{(i)}(t) \rangle$ بردار حالت یک اسپین (i) در لحظه t است [در (۳۸)، اسپینهایی را که یک برخورد واقطنبده داشته و هنوز از سلول خارج نشده‌اند به حساب نمی‌آوریم، زیرا سهم کلی آنها صفر است: این اسپینها به‌طور کتره‌ای در همه راستاها قرار دارند].

۱. این اتمها، به‌عنوان مثال، اتمهای نقره یا هیدروژن در حالت پایه هستند. برای سادگی از هرگونه اثر مربوط به اسپین هسته اتمی صرف‌نظر می‌شود.
۲. به‌عنوان مثال، برای اتمهای هیدروژنی که در روی تفلن بازتابیده می‌شوند، دهها هزار برخورد لازم است تا گشتاور مغناطیسی اتم هیدروژن تغییر راستا دهد.

$\mathcal{M}(t)$ به سه دلیل گوناگون میان لحظه‌های t و $t + dt$ تغییر می‌کند:

۱. بخش \mathcal{N} از اسپین، یا برخورد واقعبنده کرده یا از سلول خارج می‌شوند. این اسپینها از جمع‌بندی (۳۸) خارج می‌شوند و بنابراین از $\mathcal{M}(t)$ به اندازه

$$d\mathcal{M}(t) = -\frac{dt}{T_R} \mathcal{M}(t) \quad (39)$$

کم می‌شود.

۲. اسپینهای دیگر به آزادی در میدان $\mathbf{B}(t)$ تحول می‌یابند. در بخش ۳ پیشین دیده شد که برای هر یک از این اسپینها، تحول اندازه میانگین \mathbf{M} ، یعنی $\mathcal{M}^{(i)}(t) = \langle \psi^{(i)}(t) | \mathbf{M} | \psi^{(i)}(t) \rangle$ ، از رابطه کلاسیک زیر پیروی می‌کند

$$d\mathcal{M}^{(i)}(t) = \gamma \mathcal{M}^{(i)}(t) \times \mathbf{B}(t) dt \quad (40)$$

چون طرف دوم (۴۰) نسبت به $\mathcal{M}^{(i)}(t)$ خطی است، سهم این اسپینها در تغییرات $\mathcal{M}(t)$ با رابطه

$$d\mathcal{M}(t) = \gamma \mathcal{M}(t) \times \mathbf{B}(t) dt \quad (41)$$

داده می‌شود.

۳. سرانجام، تعداد $n dt$ اسپین جدید در سلول وارد شده‌اند. سهم هر یک از آنها در مغناطیدگی کل به اندازه μ_0 برابر با اندازه میانگین \mathbf{M} در حالت (+) است (μ_0 موازی با Oz و $|\mu_0| = \gamma \hbar/2$) است. بنابراین، به اندازه

$$d\mathcal{M}(t) = n\mu_0 dt \quad (42)$$

افزایش می‌یابد.

تغییرات کلی $\mathcal{M}(t)$ از جمع‌کردن رابطه‌های (۳۹)، (۴۱) و (۴۲) به دست می‌آید و با تقسیم طرفین بر dt ، معادله تحول $\mathcal{M}(t)$ (معادله بلوخ) را به دست می‌آوریم

$$\frac{d}{dt} \mathcal{M}(t) = n\mu_0 - \frac{1}{T_R} \mathcal{M}(t) + \gamma \mathcal{M}(t) \times \mathbf{B}(t) \quad (43)$$

رابطه (۴۳) را در یک مورد مشخص و به کمک چند فرضیه به دست آوردیم. با این همه مشخصه‌های این معادله برای تعداد زیادی آزمایش دیگر، که در آنها آهنگ تغییرات $\mathcal{M}(t)$ به شکل مجموع سه جمله به شرح زیر پدیدار می‌شود برقرار است:

یک جمله ریشه‌ای (در اینجا $n\mu_0$) که آماده‌سازی دستگاه را توصیف می‌کند. در حقیقت امکان ندارد بتوان تشدید مغناطیسی را، بدون قطبش قبلی اسپینها، مشاهده کرد. این قطبش ممکن است از گزینش در یک گرا دیان میدان مغناطیسی (مثال مطالعه‌شده در اینجا)، برانگیختگی اپتیکی قطبی‌شده

(مثال بررسی شده در بخش ۲-د پیشین)، سردکردن نمونه در یک میدان ایستای قوی و غیره تحقق یابد.

یک جمله میرایی بزرگ در اینجا $(-1/T_R \mathcal{M}(t))$ که ناپدید شدن یا "واهلش" مغناطیدگی کلی را، بر اثر فرایندهای گوناگون، از قبیل برخورد، ناپدید شدن اتمها، تغییر تراز اتمی با گسیل خود به خودی (مثال مطالعه شده در بخش ۲-د) و غیره.

یک جمله که حرکت تقدیمی $\mathcal{M}(t)$ را در میدان $B(t)$ بیان می کند [آخرین جمله در (۴۳)].

ب) حل در مورد یک میدان چرخان

هنگامی که میدان $B(t)$ مجموع یک میدان ایستای B_0 و یک میدان چرخان $B_1(t)$ ، مانند آنچه قبلاً در نظر گرفته شده باشد، می توان معادلات (۴۳) را به دقت حل کرد. همانند بخشهای ۱ و ۲، دستگاه محورهای مختصات چرخان $OXYZ$ را به کار می بریم که تغییرات $\mathcal{M}(t)$ نسبت به آن عبارت است از

$$\left(\frac{d}{dt}\mathcal{M}\right)_{\text{rel}} = n\mu_0 - \frac{1}{T_R}\mathcal{M} + \gamma\mathcal{M} \times B_{\text{eff}} \quad (44)$$

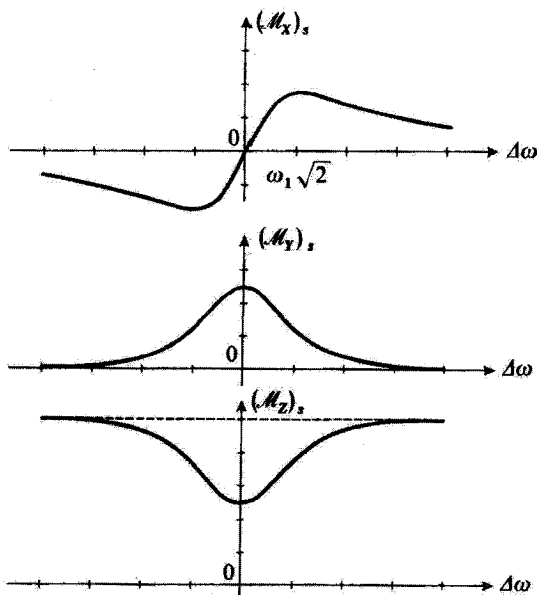
[B_{eff} با معادله (۱۰) تعریف می شود].

با تصویرکردن این معادله روی OX, OY, OZ ، یک دستگاه سه معادله دیفرانسیل خطی با ضریبهای ثابت به دست می آید که جواب مانای آن (معتبر برای گذشت زمانی بسیار بزرگتر از T_R) عبارت است از

$$\begin{aligned} (\mathcal{M}_X)_S &= -n\mu_0 T_R \frac{\omega_1 \Delta\omega}{(\Delta\omega)^2 + \omega_1^2 + (1/T_R)^2} \\ (\mathcal{M}_Y)_S &= -n\mu_0 \frac{\omega_1}{(\Delta\omega)^2 + \omega_1^2 + (1/T_R)^2} \\ (\mathcal{M}_Z)_S &= n\mu_0 T_R \left[1 - \frac{\omega_1}{(\Delta\omega)^2 + \omega_1^2 + (1/T_R)^2} \right] \end{aligned} \quad (45)$$

سه مؤلفه مغناطیدگی مانای \mathcal{M}_S هنگامی که B_0 تغییر می کند، دارای تغییرات تشدید در نزدیکی اندازه $B_0 = -\omega/\gamma$ هستند (شکل ۷). $(\mathcal{M}_Z)_S$ و $(\mathcal{M}_Y)_S$ منحنیهای جذب (منحنیهای لورنتسی با پهنا $(2/\gamma)\sqrt{\omega_1^2 + (1/T_R)^2}$) و $(\mathcal{M}_X)_S$ یک منحنی پاشیدگی (با همان پهنا) به دست می دهند.

می توان یادداشتهای پایان بخش ۲-د پیشین درباره سودمندی تجربی چنین منحنیهایی را در اینجا تکرار کرد.



شکل ۷. تغییرات اندازه‌های مانای مؤلفه‌های M برحسب $\Delta\omega = \omega - \omega_0$ در دستگاه مختصات چرخان. برای $(M_x)_s$ یک منحنی پاشیدگی و برای $(M_y)_s$ و $(M_z)_s$ منحنیهای جذب به‌دست می‌آید. هر سه منحنی دارای پهنای یکسان، $2\sqrt{\omega_1^2 + (1/T_R)^2}$ هستند که با زیاد شدن ω_1 افزایش می‌یابد. این منحنیها با فرض $\omega_1 = 1/T_R$ ("نیمه اشباع") رسم شده‌اند.

مراجع برای مطالعه بیشتر

Feynman II (7.2), chap. 35; Cagnac and Pebay-Peyroula (11.2), chaps. IX §5, X §5, XI §§2 to 5, XIX §3; Kuhn (11.1), §VI, D.

مراجع بخش ۱۴ کتابشناسی را ببینید، به‌ویژه مرجع زیر

Abraham (14.1) and Slichter (14.2).

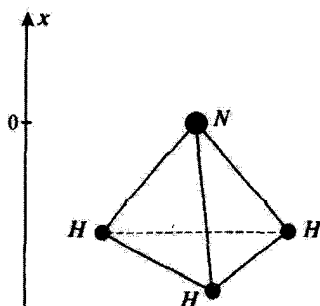
مکمل ۷

مطالعه مولکول آمونیاک به کمک یک مدل ساده

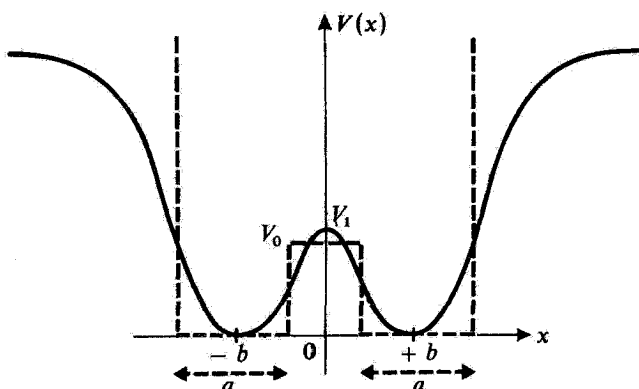
۱. توصیف مدل
۲. ویژه‌تاینها و ویژه‌مقدارهای هامیلتونی
الف) سد پتانسیل بینهایت
ب) سد پتانسیل محدود
ج) تحول مولکول. بسامد و ارونگی
۳. مولکول آمونیاک به‌عنوان یک دستگاه دوترازه
الف) فضای حالتها
ب) ترازهای انرژی. رفع واکنشی از شفافیت سد پتانسیل
ج) تأثیر یک میدان الکتریکی ایستا

۱. توصیف مدل

در مولکول آمونیاک NH_3 ، سه اتم هیدروژن قاعدهٔ هرمی را تشکیل می‌دهند که نیتروژن در رأس آن قرار دارد (شکل ۱). ما این مولکول را به کمک یک مدل ساده‌شده‌ای مطالعه می‌کنیم که مشخصه‌های آن چنین است: اتم نیتروژن، بسیار سنگینتر از هم‌تاهایش بی‌حرکت است. اتمهای هیدروژن یک مثلث متساوی‌الاضلاع می‌سازند که محور آن همواره از اتم نیتروژن می‌گذرد. در این صورت پتانسیل دستگاه تابع تنها یک پارامتر، فاصلهٔ (جبری) x میان نیتروژن و صفحه‌ای است که



شکل ۱ طرح مولکول آمونیاک؛ x بیانگر فاصلهٔ جبری میان صفحهٔ هیدروژنها و اتم نیتروژن است که ساکن فرض شده است.



شکل ۲ تغییرات انرژی پتانسیل $V(x)$ مولکول برحسب x . $V(x)$ دارای دو مینیموم است (وضعهای تعادل کلاسیک) که توسط یک سد پتانسیل، پدیدار از نیروی رانشی میان نیتروژن و سه هیدروژن در $|x|$ کوچک، از هم جدا شده‌اند. پتانسیل مستطیلی که با منحنی خط چین نشان داده شده است، برای تقریب $V(x)$ به‌کار می‌رود.

با سه هیدروژن تعریف شده است.^۱ روند این انرژی پتانسیل $V(x)$ با منحنی خط پر در شکل ۲ نشان داده شده است. تقارن مسئله نسبت به صفحه $x = 0$ ایجاب می‌کند که $V(x)$ تابع زوجی از x باشد. دو مینیموم $V(x)$ مربوط به دو آرایش متقارن مولکول هستند که در آنها مولکول از دید کلاسیک پایدار است. مبدأ انرژی را جایی برمی‌گزینیم که انرژی مولکول صفر شود. سد پتانسیل در $x = 0$ ، به ارتفاع V_1 ، این واقعیت را بیان می‌کند که اگر نیتروژن در صفحه هیدروژنها قرار گیرد، آنها را پس می‌زند. سرانجام، افزایش $V(x)$ ، هنگامی که $|x|$ بزرگتر از b است، متناظر با نیروی پیوندی شیمیایی است که چسبندگی مولکول را تأمین می‌کند.

بنابراین، در این مدل، مسئله به‌حالتی یک‌بعدی درآمده است که در آن یک ذره خالی به جرم m تحت اثر یک پتانسیل $V(x)$ قرار گرفته است (می‌توان نشان داد که "جرم کاهش یافته" m دستگاه برابر است با $(\frac{1}{3}m_H m_N / (\frac{1}{3}m_H + m_N))$). در این شرایط، ترازهای انرژی‌ای که مکانیک کوانتومی پیش‌بینی می‌کند، کدام‌اند؟ دو اختلاف اصلی می‌تواند با مکانیک کلاسیک پدید آید:

۱. رابطه عدم قطعیت هایزنبرگ، مولکول را باز می‌دارد که دارای یک انرژی برابر با مینیموم $V(x)$ ، یعنی $V_{\min} = 0$ باشد. ما تاکنون در مکملهای C_I و M_{III} (فصل اول و سوم) دیده‌ایم که چرا این انرژی باید بیش از V_{\min} باشد.

۲. از دید کلاسیکی، سد پتانسیل در $x = 0$ برای ذره‌ای با انرژی کمتر از V_1 غیرقابل عبور است. اتم نیتروژن در این صورت همیشه در یک طرف صفحه هیدروژنها باقی می‌ماند و مولکول نمی‌تواند وارونه شود. از دید کوانتومی، ذره می‌تواند با هر انرژی از این سد، به‌وسیله اثر تونل، عبور

۱. واضح است در این مدل یک‌بعدی، اثرهای مربوط به چرخش مولکول به حساب نمی‌آیند.

کند (فصل اول، بخش D-۲-c). وارونه شدن مولکول همواره ممکن است. از این پس پیامدهای این اثر را بحث خواهیم کرد.

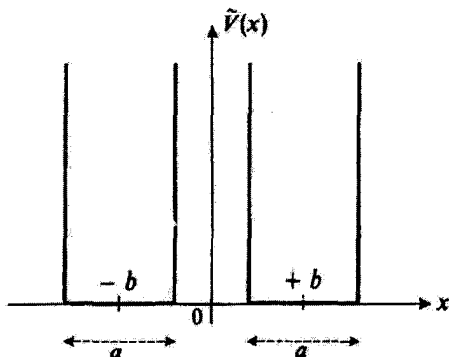
در اینجا تنها به یک بحث کیفی از پدیده‌های فیزیکی علاقه‌مند هستیم نه به یک محاسبه دقیق کمی، که در این مدل تقریبی دارای معنای چندانی نیست. برای مثال، در جستجوی آن هستیم که وجود یک بسامد وارونه‌شدن مولکول آمونیاک را، بی‌آنکه اندازه دقیق و حتی تقریبی آن را به دست دهیم، اثبات کنیم. همچنین، مسئله را ساده‌تر کرده تابع $V(x)$ را با پتانسیل مستطیلی نقطه چین شکل ۲ [دو پله پتانسیل بینهایت در $x = \pm(b + a/2)$ و یک سد پتانسیل به ارتفاع V_0 به مرکز $x = 0$ و پهنای $(2b - a)$] جایگزین می‌کنیم.

۲. ویژه‌تابعها و ویژه‌مقدارهای هامیلتونی

الف) سد پتانسیل بینهایت

قبل از محاسبه ویژه‌تابعها و ویژه‌مقدارهای هامیلتونی مربوط به پتانسیل "مربعی" شکل ۲، در مرحله نخست فرض می‌کنیم سد پتانسیل V_0 بینهایت است (که در این صورت دیگر اثر تونل امکانپذیر نیست). این فرض بعداً به فهم نتایج اثر تونل از سد پتانسیل محدود در شکل ۲، کمک خواهد کرد. بنابراین نخست مسئله یک ذره را در نظر می‌گیریم که تحت تأثیر یک پتانسیل $\bar{V}(x)$ شامل دو چاه بینهایت با عرض a و مرکزهای $x = \pm b$ (شکل ۳) قرار گرفته است. اگر ذره در یکی از این دو چاه باشد، بدیهی است که نمی‌تواند به دیگری برود.

هر یک از چاههای شکل ۳ مشابه چاهی است که در بخش ۲-c- β از مکمل H_1 (فصل



شکل ۳ هنگامی که V_0 ارتفاع سد پتانسیل شکل ۲ زیاد است، عملاً با دو چاه پتانسیل بینهایت به عرض a مواجه هستیم که فاصله مرکزهای آنها برابر با $2b$ است.

اول ترجمه فارسی همین کتاب) مطالعه شد. بنابراین می‌توان نتایج به دست آمده در آن مکمل را به‌کار بست. انرژیهای ممکن ذره عبارت‌اند از

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \quad (1)$$

با

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \quad (2)$$

(که در آن n یک عدد درست مثبت است). هر یک از این انرژیها دوبار واگن است، زیرا با آن دو تابع موج متناظر است

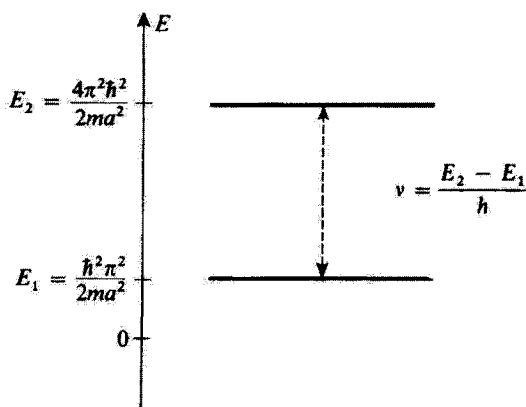
$$\varphi_1^n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \left[k_n \left(b + \frac{a}{2} - x \right) \right] & , b - \frac{a}{2} \leq x \leq b + \frac{a}{2} \text{ اگر} \\ 0 & \text{هر جای دیگر} \end{cases}$$

$$\varphi_2^n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \left[k_n \left(b + \frac{a}{2} + x \right) \right] & , b - \frac{a}{2} \leq -x \leq b + \frac{a}{2} \text{ اگر} \\ 0 & \text{هر جای دیگر} \end{cases} \quad (3)$$

در حالت $\{\varphi_1^n\}$ ، ذره در چاه بینهایت طرف راست و در حالت $\{\varphi_2^n\}$ ، در چاه بینهایت طرف چپ قرار دارد.

شکل ۴ دو تراز نخست انرژی مولکول را، که دو بار واگن هستند، نشان می‌دهد. همان‌طور که قبلاً در مکمل AIII (بخش ۲-b) دیدیم، بسامد بور $(E_2 - E_1)/h$ وابسته به این دو تراز، هنگامی با حرکت رفت‌وآمدی ذره میان دو دیواره چاه راست (یاچپ) متناظر است که حالت آن یک برهم‌نهی خطی از $\{\varphi_1^1\}$ و $\{\varphi_2^1\}$ (یا از $\{\varphi_1^2\}$ و $\{\varphi_2^2\}$) باشد. به‌طور فیزیکی، چنین نوسانی یک ارتعاش مولکولی صفحه هیدروژنها پیرامون وضع تعادل پایدار آن را که متناظر با $x = +b$ (یا $x = -b$) است، نمایش می‌دهد. بسامد این نوسانها در فرسوخ قرار می‌گیرد.

در دنباله محاسبات، مناسب است تا در هر یک از ویژه‌زیرفضاهای هامیلتونی ذره، تغییر پایه داده شود. چون $V(x)$ تابعی زوج است، هامیلتونی H با عملگر پاریته II جابه‌جا می‌شود (مکمل FII، بخش ۴). در این مورد، می‌توان پایه‌ای از ویژه‌بردارهای H یافت که زوج یا فرد باشد. تابع



شکل ۴ نخستین ترازهای انرژی به دست آمده در چاههای پتانسیل شکل ۳. نوسان دستگاه با بسامد بور $\nu = (E_2 - E_1)/h$ در یکی از دو چاه ارتعاش مولکول را در اطراف یکی از دو وضع تعادل کلاسیک آن نشان می‌دهد.

موجهای این بردارها ترکیبهای خطی متقارن و پادمتقارن زیر هستند

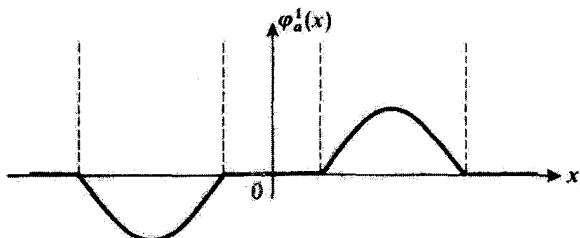
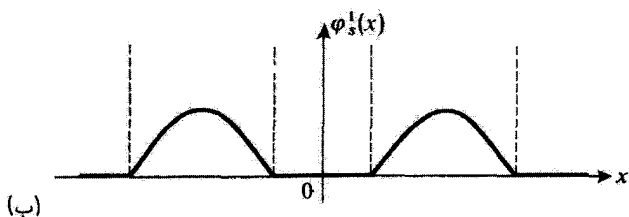
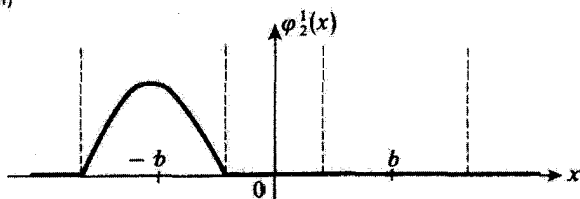
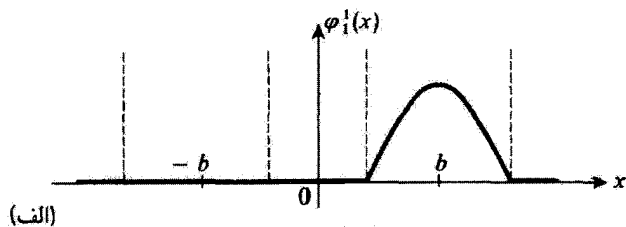
$$\begin{aligned}\varphi_s^n(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_1^n(x) + \varphi_2^n(x)] \\ \varphi_a^n(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_1^n(x) - \varphi_2^n(x)]\end{aligned}\quad (4)$$

در حالت‌های $|\varphi_s^n\rangle$ و $|\varphi_a^n\rangle$ ، ذره می‌تواند در یکی از این دو چاه پتانسیل باشد. در دنبالهٔ بحث، بررسی را به تراز پایه محدود می‌کنیم که برای آن تابع موجهای $\varphi_1(x)$ ، $\varphi_2(x)$ ، $\varphi_s^1(x)$ و $\varphi_a^1(x)$ در شکل ۵ نشان داده شده‌اند.

(ب) سد پتانسیل محدود

حال می‌خواهیم شکل ویژه‌تابعهای نخستین ترازهای انرژی را، هنگامی که V_0 دارای اندازهٔ محدودی است (که با وجود این فرض می‌کنیم از انرژی این ترازها بزرگتر است)، بیابیم. در داخل دو چاه پتانسیل "مسطحی" (منحنی خط‌چین شکل ۲)، $V(x) = 0$ است. بنابراین تابع موج بدین شکل است

$$\begin{aligned}\chi(x) &= A \sin \left[k \left(b + \frac{a}{\gamma} - x \right) \right], & b - \frac{a}{\gamma} \leq x \leq b + \frac{a}{\gamma} & \text{اگر} \\ \chi(x) &= A' \sin \left[k \left(b + \frac{a}{\gamma} + x \right) \right], & b - \frac{a}{\gamma} \leq -x \leq b + \frac{a}{\gamma} & \text{اگر}\end{aligned}\quad (5)$$



شکل ۵ حالت‌های $\varphi_1(x)$ و $\varphi_1'(x)$ که در شکل الف نشان داده شده‌اند، حالت‌های مانا با انرژی یکسانی هستند که به ترتیب در چاه راست و چاه چپ متمرکز شده‌اند. برای استفاده از تقارن مسئله، مناسبتر است که حالت‌های متقارن $\varphi_2(x)$ و $\varphi_2'(x)$ و پادمقارن $\varphi_3(x)$ و $\varphi_3'(x)$ را به عنوان حالت‌های مانا در نظر بگیریم.

که در آنها k به انرژی E تراز با رابطه

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (۶)$$

مربوط می‌شود. همانند بخش پیش $\chi(x)$ همواره در $x = \pm(b + a/2)$ صفر می‌شود، زیرا $V(x)$ در این دو نقطه بینهایت است. برعکس، چون V_0 محدود است $\chi(x)$ دیگر در $x = \pm(b - a/2)$ صفر نمی‌شود و در نتیجه k دیگر از رابطه (۲) پیروی نمی‌کند.

این بار نیز، چون $V(x)$ زوج است، می‌توان ویژه‌تابعهایی، $\chi_s(x)$ و $\chi_a(x)$ ، برای هامیلتونی جستجو کرد که به ترتیب زوج و فرد باشند. ضریبهای A و A' رابطهٔ (۵) و مربوط به $\chi_s(x)$ و $\chi_a(x)$ را به A_s و A'_s, A'_a و A_a نشان می‌دهیم. روشن است که خواهیم داشت

$$\begin{aligned} A'_s &= A_s \\ A'_a &= -A_a \end{aligned} \quad (7)$$

ویژه‌مقدارهای وابسته به χ_a و χ_s را با E_a و E_s نشان خواهیم داد. بدین ترتیب، اندازه‌های متناظر k_a و k_s پارامتر k به‌کمک رابطهٔ (۶) تعریف می‌شوند.

در بازهٔ $-(b - a/2) \leq x \leq (b - a/2)$ ، تابع موج دیگر مانند حالت قبل صفر نیست، زیرا V_0 محدود است: تابع موج، بسته به اینکه χ_s یا χ_a در نظر گرفته شود، باید ترکیب خطی زوج یا فردی از تابعهای نمایی $e^{q_{s,a}x}$ و $e^{-q_{s,a}x}$ باشد. q_a و q_s از $E_{s,a}$ و V_0 چنین تعریف می‌شوند

$$q_{s,a} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E_{s,a})} = \sqrt{\alpha^2 - k_{s,a}^2} \quad (8)$$

با

$$V_0 = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \quad (9)$$

بنابراین، برای $-(b - a/2) \leq x \leq (b - a/2)$ ، تابعهای χ_a و χ_s چنین نوشته می‌شوند

$$\begin{aligned} \chi_s(x) &= B_s \cosh(q_s x) \\ \chi_a(x) &= B_a \sinh(q_a x) \end{aligned} \quad (10)$$

اینک آنچه می‌ماند این است که ویژه‌تابعها و مشتقهایشان را در نقطه‌های $x = \pm(b - a/2)$ پیوند دهیم. بنابراین، پاسخ زوج $\chi_s(x)$ باید از شرایط

$$\begin{aligned} A_s \sin(k_s a) &= B_s \cosh \left[q_s \left(b - \frac{a}{2} \right) \right] \\ -A_s k_s \cos(k_s a) &= B_s q_s \sinh \left[q_s \left(b - \frac{a}{2} \right) \right] \end{aligned} \quad (11)$$

پیروی کند. چون A_s و B_s نمی‌توانند همزمان صفر شوند، می‌توانیم نسبت معادله‌های (۱۱) را به‌دست آوریم

$$\tan(k_s a) = -\frac{k_s}{q_s} \coth \left[q_s \left(b - \frac{a}{2} \right) \right] \quad (12)$$

برای پاسخ فرد $\chi_a(x)$ به همین‌سان به‌دست می‌آید

$$\tan(k_a a) = -\frac{k_a}{q_a} \tanh \left[q_a \left(b - \frac{a}{2} \right) \right] \quad (13)$$

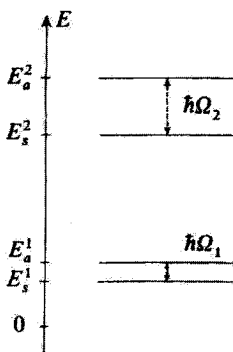
اگر به‌جای q_s و q_a اندازه‌هایشان برحسب k_s و k_a گذاشته شود، رابطه‌های (۱۲) و (۱۳) چنین نوشته می‌شوند

$$\tan(k_s a) = -\frac{k_s}{\sqrt{\alpha^2 - k_s^2}} \coth \left[\sqrt{\alpha^2 - k_s^2} \left(b - \frac{a}{2} \right) \right] \quad (14)$$

و

$$\tan(k_a a) = -\frac{k_a}{\sqrt{\alpha^2 - k_a^2}} \tanh \left[\sqrt{\alpha^2 - k_a^2} \left(b - \frac{a}{2} \right) \right] \quad (15)$$

بنابراین، مسئله دراصل حل شده است رابطه‌های (۱۴) و (۱۵) کوانتس انرژی را بیان می‌کنند، زیرا اندازه‌های ممکن k_s و k_a را به‌دست می‌دهند و سپس به‌کمک رابطه (۶)، انرژی‌های E_s و E_a به‌دست می‌آیند (به‌شرطی که این انرژیها کمتر از V_0 باشند). حل معادله‌های غیرجبری (۱۴) و (۱۵) می‌تواند برای مثال، به‌شیوهٔ ترسیمی انجام گیرد. بدینسان تعدادی جواب $k_s^1, k_s^2, \dots, k_a^1, k_a^2, \dots$ به‌دست می‌آیند. جوابهای k_s^n با k_a^n یکی نیستند، زیرا معادله‌های (۱۴) و (۱۵) یکی نیستند: بنابراین انرژیهای E_s^n و E_a^n متفاوت هستند. البته هنگامی که V_0 بسیار بزرگ شود، k_s^n و k_a^n هر دو به مقدار $n\pi/a$ ، که در بخش پیش به‌دست آمد، میل می‌کنند. این موضوع را می‌توان با میل دادن α ، در معادله‌های (۱۴) و (۱۵)، به بینهایت دریافت که در این صورت خواهیم داشت $\tan(k_{s,a} a) = 0$ ، که هم‌ارز معادله (۲) است. بنابراین، انرژیهای E_s^n و E_a^n به‌سمت $E_n = \hbar^2 n^2 \pi^2 / 2ma^2$ میل خواهند کرد که در بخش پیش، هنگامی که V_0 به بینهایت میل می‌کند، محاسبه شد. سرانجام به‌آسانی می‌توان دریافت که هر چه V_0 در مقایسه با E_n بزرگتر باشد، دو انرژی E_s^n و E_a^n به یکدیگر نزدیکتر می‌شوند.



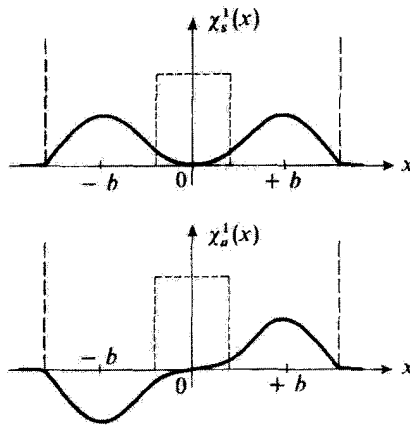
شکل ۶ هنگامی که واقعیت محدودبودن ارتفاع V_0 سد پتانسیل به حساب می آید، دیده می شود که طیف انرژی شکل ۴ تغییر می کند. هر تراز به دو تراز متمایز منشعب می شود. بسامدهای بور $\Omega_1/2\pi$ و $\Omega_2/2\pi$ که متناظر با عبور از یک چاه به چاه دیگر توسط اثر تونل هستند، عبارت اند از بسامدهای وارونه شدن مولکول آمونیاک برای دو تراز نخست ارتعاشی. اثر تونل در تراز ارتعاشی بالاتر مهمتر است، به طوری که $\Omega_2 > \Omega_1$.

اندازه های دقیق E_s^n و E_a^n در اینجا دارای اهمیت ناچیزی هستند. ما به نشان دادن سیمای طیف انرژی در شکل ۶، رضایت می دهیم، که نمودار ترازهای E_1 و E_2 شکل ۴، وقتی ارتفاع V_0 سد پتانسیل محدود است، را نشان می دهد. دیده می شود که اثر تونل در این سد پتانسیل واگنی E_1 و E_2 را رفع می کند و به پدیدار شدن دوتاییهای (E_s^1, E_a^1) و (E_s^2, E_a^2) می انجامد البته فرض می شود که تمام این انرژیها از V_0 کمترند. چون دوتایی (E_s^1, E_a^1) پایینتر قرار دارد، دیده می شود که $|E_s^2 - E_a^2| < |E_s^1 - E_a^1|$ است. سرانجام، فاصله میان دوتاییها از جدایی داخلی هر دوتایی به مراتب بزرگتر است (به طور تجربی نسبت میان آنها در حدود هزار است). وانگهی، این جدایی امکان می دهد تا بسامدهای بور تازه ای به صورت

$$\Omega_1 = \frac{E_a^1 - E_s^1}{\hbar}, \quad \Omega_2 = \frac{E_a^2 - E_s^2}{\hbar}, \dots$$

تعریف شود که معنای فیزیکی آنها را در بخش بعد مطالعه خواهیم کرد (گذارهای متناظر توسط پیکان در شکل ۶ نشان داده شده اند).

سرانجام، در شکل ۷، تغییرات ویژه تابعهای $\chi_s^1(x)$ و $\chi_a^1(x)$ را که با معادله های (۵)، (۷)، و (۱۰) داده می شوند و در آنها k_s^1 و k_a^1 از (۱۴) و (۱۵) تعیین شده اند، نمایش داده ایم. معلوم می شود که این تابعها به تابعهای $\varphi_s^1(x)$ و $\varphi_a^1(x)$ شکل ۵ بسیار شبیه هستند، با این اختلاف اساسی که تابع موجها در فاصله $(b - a/2) \leq x \leq (b + a/2)$ دیگر صفر نیستند. همچنین



شکل ۷ تابع موجهای وابسته به ترازهای E'_a و E'_s شکل ۶. همانندی آنها با تابعهای شکل ۵ (ب) به چشم می خورد. با این همه، این تابع موجهای جدید در فاصله $-b + a/2 \leq x \leq b - a/2$ صفر نمی شوند.

اهمیت وارد کردن پایه φ'_a و φ'_s در بخش پیش معلوم می شود: ویژه تابعهای χ'_s و χ'_a در حضور اثر تونل به φ'_a و φ'_s خیلی بیشتر شبیه هستند تا به φ'_1 و φ'_2 .

ج) تحول مولکول. بسامد و ارونگی

فرض کنیم که مولکول در لحظه $t = 0$ در حالت

$$|\psi(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\chi'_s\rangle + |\chi'_a\rangle] \quad (16)$$

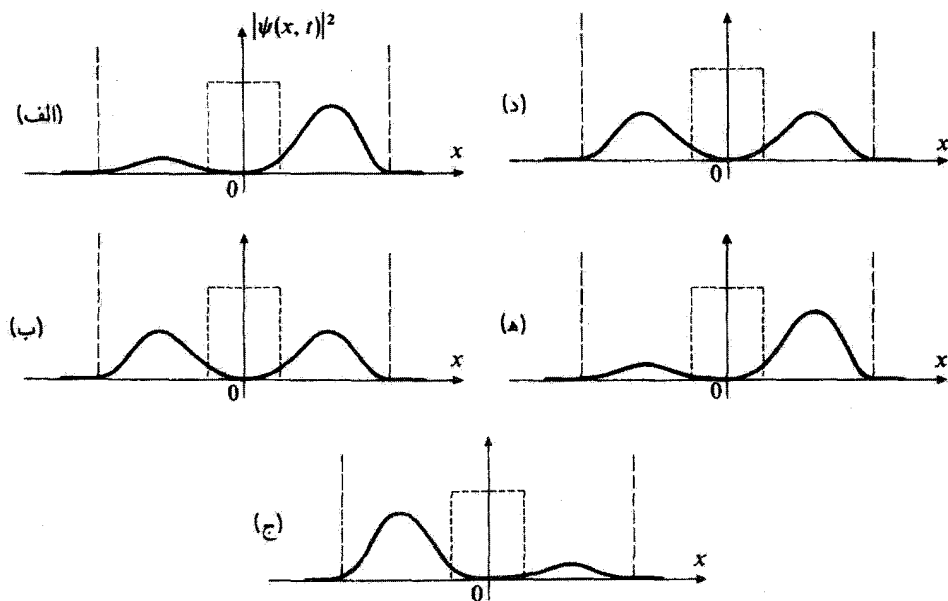
باشد. بردار حالت $|\psi(t)\rangle$ در لحظه t را می توان با به کار بردن فرمول عمومی (D-54) فصل سوم به دست آورد. در این صورت خواهیم داشت

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\frac{E'_s+E'_a}{\hbar}t} [e^{+i\Omega_1 t/2} |\chi'_s\rangle + e^{-i\Omega_1 t/2} |\chi'_a\rangle] \quad (17)$$

از این رابطه، چگالی احتمال می شود

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{4} [|\chi'_s(x)|^2 + |\chi'_a(x)|^2 + \cos(\Omega_1 t) \chi'_s(x) \chi'_a(x)] \quad (18)$$

تغییرات این چگالی احتمال برحسب زمان می تواند به آسانی از منحنیهای شکل ۷ به طور ترسیمی به دست آید. این تغییرات در شکل ۸ نشان داده شده است. برای $t = 0$ (شکل ۸ الف) دیده



شکل ۸ تحول یک بسته موج که از برهم نهی دو تابع موج مانای شکل ۷ به دست آمده است. ذره در آغاز در چاه راست است (شکل الف)، به وسیله اثر تونل به چاه چپ می‌رود (شکل ب) و پس از گذشت زمانی در آن جایگزین می‌شود (شکل ج)، سپس به چاه راست باز می‌گردد (شکل د) و به حالت آغازی باز می‌آید (شکل ه) و این عمل تکرار می‌شود.

می‌شود که حالت آغازی که در (۱۶) انتخاب شده است، با چگالی احتمالی متناظر است که در چاه راست متمرکز شده است (تابعهای χ_a^1 و χ_b^1 در چاه چپ دارای علامتهای مخالف و قدرمطلقهای تقریباً نزدیکی هستند، به گونه‌ای که مجموع آنها عملاً صفر است). بنابراین، می‌توان گفت که ذره در آغاز عملاً در چاه راست قرار دارد. این ذره، در لحظه $t = \pi/2\Omega_1$ (شکل ب) به طور چشمگیری توسط اثر تونل به چاه چپ می‌آید، در لحظه $t = \pi/\Omega_1$ عملاً در آن جا می‌گیرد (شکل ج) و سپس حرکت وارون انجام می‌دهد (شکلهای ا د و ه).

بنابراین ذره خیالی با بسامد $\Omega_1/2\pi$ از یک طرف سد پتانسیل به طرف دیگر می‌رود یعنی صفحه هیدروژنها به طور متناوب از یک طرف اتم نیتروژن به طرف دیگر آن می‌رود. از این روست که بسامد $\Omega_1/2\pi$ بسامد وارونگی مولکول نامیده می‌شود. توجه شود که این بسامد وارونگی دارای همانند کلاسیکی نیست، زیرا وجود آن به اثر تونل ذره خیالی در سد پتانسیل وابسته است.

چون اتم نیتروژن تمایل دارد الکترونهاى سه اتم هیدروژن را به سوی خود بکشد، مولکول آمونیاک دارای یک گشتاور دوقطبی الکتریکی است که با مقدار متوسط $\langle X \rangle$ ، موضع ذره خیالی

مطالعه شده، متناسب است. در شکل ۸ دیده می‌شود که این گشتاور دوقطبی تابعی نوسانی از زمان است. در این شرایط، مولکول آمونیاک می‌تواند تابش الکترومغناطیسی با بسامد $\Omega_1/2\pi$ گسیل یا جذب کند.

تجربه نیز این موضوع را تأیید می‌کند و اندازه Ω_1 در ناحیهٔ امواج سانتی‌متری قرار دارد. در اخترشناسی رادیویی، توانسته‌اند گسیل و جذب موجهای الکترومغناطیسی با این بسامد را وسیلهٔ مولکولهای آمونیاک میان ستاره‌های آشکار کنند. همچنین یادآوری می‌کنیم که اصول کار میز آمونیاکی مبتنی بر گسیل برانگیختهٔ این امواج از مولکول NH_3 است.

۳. مولکول آمونیاک به‌عنوان یک دستگاه دوترازه

در شکل ۶ وضعی دیده می‌شود که همانند وضعی است که در پیشگفتار بخش ۳-۴ یادآوری شد، دستگاه بررسی شده دارای دوتراز بسیار نزدیک به هم E_a^1 و E_b^1 است که ترازهای دیگر E_g^1 ، E_a^2 ، و ... بسیار دور هستند. اگر تنها دوتراز E_a^1 و E_b^1 مورد توجه قرار گیرند، می‌توان تمامی ترازهای دیگر را "فراموش کرد" (توجه دقیق یک چنین تقریبی در چارچوب نظریهٔ بریشیدگی در فصل ۱۱ داده خواهد شد).

بنابراین، بررسی پیشین را با دیدگاهی کمی متفاوت از سر می‌گیریم و نشان خواهیم داد که ملاحظات عمومی فصل ۴ دربارهٔ دستگاههای دوترازه را می‌توان دربارهٔ مولکول آمونیاک به‌کار برد. این دیدگاه افزون بر آن امکان می‌دهد تا اثر یک میدان الکتریکی ایستای خارجی را روی این مولکول به‌سادگی بررسی کنیم.

الف) فضای حالتها

فضای حالتهایی که در نظر خواهیم گرفت با دو بردار عمود بر هم $|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$ ، که تابع موجهای آنها در (۳) داده شده است، ایجاد می‌شود. چنانکه قبلاً بیان شد، حالتهاى دیگر $|\varphi_3\rangle$ او $|\varphi_4\rangle$ با $n > 1$ نادیده می‌گیریم. در حالتهاى $|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$ ، اتم نیتروژن یا بالای صفحهٔ هیدروژنها قرار دارد و یا پایین آن. در (۴) پایهٔ دیگری از فضای حالتها وارد شد که از بردارهای زوج و فرد

$$\begin{aligned} |\varphi_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|\varphi_1\rangle + |\varphi_2\rangle] \\ |\varphi_4\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|\varphi_1\rangle - |\varphi_2\rangle] \end{aligned} \quad (19)$$

تشکیل شده بود. در این دو حالت اخیر، احتمال یافتن نیتروژن در بالا یا پایین صفحهٔ اتمهای هیدروژن یکی است.

ب) ترازهای انرژی. رفع واگنی ناشی از شفافیت سد پتانسیل

هنگامی که ارتفاع V_0 سد پتانسیل بینهایت است، حالت‌های $|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$ (مانند $|\varphi_0\rangle$ و $|\varphi_1\rangle$) دارای انرژی یکسانی هستند، به گونه‌ای که هامیلتونی دستگاه می‌شود

$$H_0 = E_1 \times \mathbb{1} \quad (20)$$

($\mathbb{1}$ عامل همانی در فضای حالت‌های دوبعدی است).

برای آنکه این واقعیت را که سد پتانسیل بینهایت نیست، به شیوه پدیده‌شناختی به حساب آوریم، به H_0 یک پریشیدگی W بیفزاییم که در پایه $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$ غیرقطری است و با ماتریس

$$W = -A \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (21)$$

نشان داده می‌شود که در آن A یک ضریب حقیقی مثبت^۱ است.

برای به دست آوردن حالت‌های مانای مولکول، باید عملگر هامیلتونی کل $H = H_0 + W$ را که ماتریس آن عبارت است از

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & -A \\ -A & E_1 \end{pmatrix} \quad (22)$$

قطری کرد. یک محاسبه مقدماتی، ویژه‌مقدارها و ویژه بردارهای H را به دست می‌دهد

$$\begin{aligned} E_1 + A & \text{ متناظر با ویژه‌کت } |\varphi_0\rangle \\ E_1 - A & \text{ متناظر با ویژه‌کت } |\varphi_1\rangle \end{aligned} \quad (23)$$

دیده می‌شود که بر اثر پریشیدگی W ، دو تراز که به هنگام صفر بودن A واگن بودند، از هم جدا می‌شوند. یک اختلاف انرژی برابر با $2A$ به وجود می‌آید و ویژه‌حالت‌های نوین عبارت‌اند از $|\varphi_0\rangle$ و $|\varphi_1\rangle$. بنابراین، نتایج بخش ۲ دوباره به دست می‌آیند.

۱. در واقع برای پیدا کردن وضع نسبی ترازهای E_0^1 و E_0^2 شکل ۶ ناچاریم فرض کنیم $A > 0$ [ویژه‌مقدارهای (۲۳) را نگاه کنید].

اگر مولکول را در لحظه $t = 0$ در حالت $|\varphi_1\rangle$ فرض کنیم

$$|\psi(t=0)\rangle = |\varphi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\varphi_0\rangle + |\varphi_a\rangle] \quad (24)$$

بردار حالت در لحظه t خواهد بود

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iE_1 t/\hbar} [e^{iAt/\hbar} |\varphi_0\rangle + e^{-iAt/\hbar} |\varphi_a\rangle] \\ &= e^{-iE_1 t/\hbar} \left[\cos\left(\frac{At}{\hbar}\right) |\varphi_1\rangle + i \sin\left(\frac{At}{\hbar}\right) |\varphi_2\rangle \right] \end{aligned} \quad (25)$$

پس به هنگام یک اندازه‌گیری در لحظه t ، احتمال $\cos^2(At/\hbar)$ وجود دارد که مولکول در حالت $|\varphi_1\rangle$ (یعنی اتم نیتروژن بالای صفحه اتمهای هیدروژن) باشد و احتمال $\sin^2(At/\hbar)$ که مولکول در حالت $|\varphi_2\rangle$ (یعنی نیتروژن در پایین صفحه) یافت شود. بدینسان به خوبی در می‌یابیم که، بر اثر جفتدگی W ، مولکول آمونیاک به‌طور تناوبی وارونه می‌شود.

یادداشت:

توصیف (پدیده‌شناسی) اثر سد پتانسیل محدود به وسیله پریشیدگی W که با (۲۱) داده شده است، دارای دقت کمتری از مطالعه‌ای است که قبلاً انجام شد. زیرا در اینجا ویژه‌تابعهای $\varphi_0(x)$ و $\varphi_a(x)$ ، برعکس χ_0^1 و χ_a^1 ، در ناحیه $(b - a/2) \leq x \leq (-b + a/2)$ صفر می‌شوند. با این همه، این توصیف بسیار ساده‌تر، امکان می‌دهد تا دو اثر فیزیکی پایه: رفع واکنی چندتابی E_1 و نوسان دوره‌ای مولکول میان حالت‌های $|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$ (وارونگی)، توضیح داده شوند. ■

ج) تأثیر یک میدان الکتریکی ایستا

در پیش دیدیم که، در حالت‌های $|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$ ، گشتاور دوقطبی الکتریکی مولکول دو مقدار مختلف‌العلامه می‌پذیرد که آنها را با $+\eta$ و $-\eta$ نشان خواهیم داد. اگر مشاهده‌پذیر وابسته به این کمیت فیزیکی را با D نشان دهیم، می‌توان فرض کرد که D در پایه $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$ با یک ماتریس قطری نمایش داده می‌شود که $+\eta$ و $-\eta$ ویژه‌مقدارهای آن هستند

$$D = \begin{pmatrix} \eta & 0 \\ 0 & -\eta \end{pmatrix} \quad (26)$$

هنگامی که مولکول به یک میدان الکتریکی ایستای \mathcal{E} برده شود، انرژی برهم‌کنش با این میدان می‌شود

$$W'(\mathcal{E}) = -\mathcal{E}D \quad (27)$$

این جملهٔ هامیلتونی^۲ در پایهٔ $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$ با ماتریس

$$W'(\mathcal{E}) = -\eta\mathcal{E} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (28)$$

نمایش داده می‌شود. اکنون می‌خواهیم، ماتریس نمایندهٔ عملگر هامیلتونی کل $H_0 + W + W'(\mathcal{E})$ را در پایهٔ $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$ بنویسیم

$$H_0 + W + W'(\mathcal{E}) = \begin{pmatrix} E_1 - \eta\mathcal{E} & -A \\ -A & E_1 + \eta\mathcal{E} \end{pmatrix} \quad (29)$$

این ماتریس را می‌توان به سادگی قطری کرد. ویژه‌انرژیهای E_+ و E_- و ویژه‌دارهای $|\psi_+\rangle$ و $|\psi_-\rangle$ آن عبارت‌اند از

$$\begin{aligned} E_+ &= E_1 + \sqrt{A^2 + \eta^2 \mathcal{E}^2} \\ E_- &= E_1 - \sqrt{A^2 + \eta^2 \mathcal{E}^2} \end{aligned} \quad (30)$$

و

$$\begin{aligned} |\psi_+\rangle &= \cos \frac{\theta}{2} |\varphi_1\rangle - \sin \frac{\theta}{2} |\varphi_2\rangle \\ |\psi_-\rangle &= \sin \frac{\theta}{2} |\varphi_1\rangle + \cos \frac{\theta}{2} |\varphi_2\rangle \end{aligned} \quad (31)$$

که در آن چنین گذارده‌ایم

$$\tan \theta = -\frac{A}{\eta\mathcal{E}} \quad 0 \leq \theta \leq \pi \quad (32)$$

۱. برای ساده‌شدن، فرض می‌کنیم که این میدان موازی با محور Ox شکل ۱ است (مدل یک‌بعدی).
 ۲. در $D.W'(\mathcal{E})$ یک مشاهده‌پذیر است در حالی که \mathcal{E} کمیتی کلاسیک است که از خارج اعمال شده است (پانوشته صفحه ۷۹ همین کتاب).

[مکمل ۲ فصل ۴، رابطه‌های (۹)، (۱۰)، و (۲۳). چون A حقیقی و منفی است، زاویه φ که در این مکمل وارد شده است در اینجا برابر با π است].
 هنگامی که \mathcal{E} صفر است، $\theta = \pi/2$ است و نتیجه‌های بخش ۳ (ب) را باز می‌یابیم، زیرا

$$\begin{aligned} E_+(\mathcal{E} = 0) &= E_1 + A \\ E_-(\mathcal{E} = 0) &= E_1 - A \end{aligned} \quad (۳۳)$$

با

$$\begin{aligned} |\psi_+(\mathcal{E} = 0)\rangle &= |\varphi_1'\rangle \\ |\psi_-(\mathcal{E} = 0)\rangle &= |\varphi_2'\rangle \end{aligned} \quad (۳۴)$$

هنگامی که \mathcal{E} دلخواه و A صفر است (که متناظر است با یک سد پتانسیل کاملاً کدر)، چنین به دست می‌آید

$$\begin{aligned} E_+(A = 0) &= E_1 + \eta |\mathcal{E}| \\ E_-(A = 0) &= E_1 - \eta |\mathcal{E}| \end{aligned} \quad (۳۵)$$

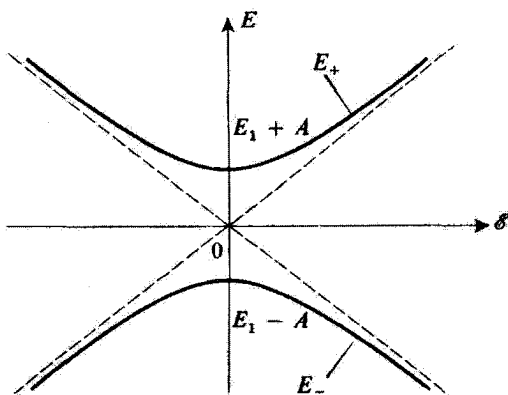
و اگر \mathcal{E} مثبت باشد^۱

$$\begin{aligned} |\psi_-(A = 0)\rangle &= |\varphi_1'\rangle \\ |\psi_+(A = 0)\rangle &= -|\varphi_2'\rangle \end{aligned} \quad (۳۶)$$

بنابراین، در این مورد، انرژی به طور خطی با \mathcal{E} تغییر می‌کند (خطهای نقطه‌چین شکل ۹). نتایج (۳۵) و (۳۶) را به طور فیزیکی به خوبی می‌توان فهمید: هنگامی که تنها میدان الکتریکی روی مولکول اثر می‌کند، اتمهای هیدروژن باردار را به بالا یا پایین اتم نیتروژن "می‌کشد". از این روست که حالت‌های مانا عبارت‌اند از $|\varphi_1'\rangle$ و $|\varphi_2'\rangle$.

هنگامی که میدان الکتریکی \mathcal{E} و ثابت جفت‌دگی A هر دو دلخواه‌اند، حالت‌های $|\psi_+\rangle$ و $|\psi_-\rangle$ برهم‌نهیهای خطی حالت‌های $|\varphi_1'\rangle$ و $|\varphi_2'\rangle$ (و همچنین حالت‌های $|\varphi_1'\rangle$ و $|\varphi_2'\rangle$) هستند. این وضع از سازش میان عمل میدان الکتریکی، که می‌کوشد هیدروژنها را به یک طرف اتم نیتروژن بکشد و عمل جفت‌دگی W ، که می‌کوشد اتم نیتروژن را از میان سد پتانسیل بگذرانند، پدید می‌آید.

۱. اگر \mathcal{E} منفی باشد، نقش‌های $|\varphi_1'\rangle$ و $|\varphi_2'\rangle$ در رابطه (۳۶) وارونه می‌شوند.



شکل ۹ تأثیر یک میدان الکتریکی \mathcal{E} بر روی دو تراز نخست مولکول آمونیاک (جدایی $2A$ آنها در میدان صفر به علت جفتیدگی به وسیلهٔ اثر تونل است). برای \mathcal{E} ضعیف، مولکول یک گشتاور دوقطبی متناسب با \mathcal{E} به دست می‌آورد و انرژی متناظر به صورت \mathcal{E}^2 تغییر می‌کند. برای \mathcal{E} قوی، گشتاور قطبی به حدی میل می‌کند (که متناظر با وضع دو نیتروژن در بالا یا در پایین صفحهٔ هیدروژنهاست) و انرژی تابعی خطی از \mathcal{E} می‌شود.

تغییرات انرژی E_+ و E_- به طور ترسیمی در شکل ۹ نشان داده شده است، که از آن پدیدهٔ عدم تقاطع ناشی از جفتیدگی W پدیدار می‌شود (بخش ۴-۳-۲ ب). E_+ و E_- متناظر با دو شاخهٔ یک هذلولی هستند که مجانبهای آن با نقطه چین رسم شده‌اند و به انرژیها در غیاب جفتیدگی وابسته هستند.

سرانجام، می‌توان اندازهٔ میانگین گشتاور دوقطبی الکتریکی را در هر یک از حالت‌های مانای $|\psi_+ \rangle$ و $|\psi_- \rangle$ محاسبه کرد. با به کار بردن (۲۶) و (۳۱) خواهیم یافت

$$\langle \psi_+ | D | \psi_+ \rangle = -\langle \psi_- | D | \psi_- \rangle = \eta \cos \theta \quad (۳۷)$$

که بنابر (۳۲) نتیجه می‌دهد

$$\langle \psi_+ | D | \psi_+ \rangle = -\langle \psi_- | D | \psi_- \rangle = -\frac{\eta^2 \mathcal{E}}{\sqrt{A^2 + \eta^2 \mathcal{E}^2}} \quad (۳۸)$$

برای $\mathcal{E} = 0$ ، این دو اندازهٔ میانگین صفرند، و با این واقعیت متناظر است که ذره در حالت‌های $|\varphi_{1,a} \rangle$ دارای احتمال یکسانی است که در یکی از دو چاه پیدا شود. برعکس، هنگامی که $A \gg \eta \mathcal{E}$ است، گشتاور دوقطبی $+\eta$ (یا $-\eta$) متناظر با حالت $|\varphi_1 \rangle$ (یا $|\varphi_2 \rangle$) را باز می‌یابیم.

هنگامی که میدان الکتریکی ضعیف است ($\eta \mathcal{E} \ll A$)، می‌توان فرمولهای (۳۸) را بدین شکل نوشت

$$\langle \psi_+ | D | \psi_+ \rangle = -\langle \psi_- | D | \psi_- \rangle = \frac{\eta^2}{A} \mathcal{E}^2 \quad (39)$$

دیده می‌شود که مولکول، در حالت مانای $|\psi_+\rangle$ (یا $|\psi_-\rangle$) یک گشتاور دوقطبی الکتریکی متناسب با میدان خارجی \mathcal{E} به دست می‌آورد. اگر پذیرفتاری الکتریکی مولکول در حالت $|\psi_-\rangle$ را با رابطه

$$\langle \psi_- | D | \psi_- \rangle = \varepsilon_- \mathcal{E} \quad (40)$$

تعریف کنیم، از (۳۹) خواهیم یافت

$$\varepsilon_- = \frac{\eta^2}{A} \mathcal{E}^2 \quad (41)$$

(همین محاسبات برای $|\psi_+\rangle$ معتبر هستند و نتیجه می‌دهند $\varepsilon_+ = -\varepsilon_-$).

یادداشت:

در میدان ضعیف می‌توان فرمولهای (۳۰) را برحسب توانهای $\eta \mathcal{E}/A$ بسط داد

$$E_- = E_1 - A - \frac{1}{2} \frac{\eta^2 \mathcal{E}^2}{A} + \dots \quad (\text{الف-۴۲})$$

$$E_+ = E_1 + A + \frac{1}{2} \frac{\eta^2 \mathcal{E}^2}{A} + \dots \quad (\text{ب-۴۲})$$

اکنون مولکولهای آمونیاکی را در نظر بگیریم که، در ناحیه‌ای که \mathcal{E} ضعیف است ولی \mathcal{E}^2 در راستای Ox محور بلورها دارای گرادیانی قوی است، جابه‌جا می‌شوند

$$\frac{d}{dx}(\mathcal{E}^2) = \lambda \quad (43)$$

بنابر (الف-۴۲)، مولکولهایی که در حالت $|\psi_-\rangle$ هستند تحت تأثیر نیروی موازی با Ox قرار می‌گیرند که برابر است با

$$F_- = -\frac{dE_-}{dx} = \frac{1}{2} \lambda \frac{\eta^2}{A} \quad (44)$$

برابری (۴۲-ب) نشان می‌دهد مولکولهایی که در حالت (ψ_+) هستند، تحت تأثیر نیروی مخالف

$$F_+ = -\frac{dE_+}{dx} = -F_- \quad (45)$$

قرار می‌گیرند. این نتیجه اساس روشی است که در میز آمونیاک برای جداسازی مولکولها و گزینش آنهايي که در بالاترين تراز انرژی قرار دارند به‌کار می‌رود. دستگاهی که به‌کار می‌رود مشابه دستگاه اشترن-گراخ است: باریکه‌ای از مولکولهای آمونیاک از ناحیه‌ای که در آن یک گرادیان قوی میدان الکتریکی حکمفرماست می‌گذرد. مولکولها بسته به اینکه در یک حالت یا حالت دیگری باشند، مسیرهای مختلفی را می‌پیمایند و می‌توان به کمک میان‌بند مناسبی یکی از حالت‌های دلخواه را جدا ساخت.

مراجع برای مطالعه بیشتر

برای مراجع مقاله‌های اصلی در مورد میز نگاه کنید به

Feynman III (1.2), §8-6 and chap. 9; Alonso and Finn III (1.4), §2-8; article by Vuylsteke (1.34);

و مقاله‌هایی از

Townes and Schawlow (12.10), chap. 12;

همچنین نگاه کنید به

(15.11) for references to original articles on masers; articles by Lyons (15.14), Gordon (15.15), and Turner (12.14). See also Encrenaz (12.11). chap. VI.

مکمل ۸

اثرهای جفتیدگی میان یک حالت پایدار و یک حالت ناپایدار

۱. مقدمه. نمادگذاری
۲. تأثیر جفتیدگی ضعیف روی حالت‌های با انرژیهای مختلف
۳. تأثیر جفتیدگی دلخواه بر حالت‌های هم‌انرژی

۱. مقدمه. نمادگذاری

اثرهای یک جفتیدگی میان حالت‌های $|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$ با انرژیهای E_1 و E_2 به تفصیل در بخش ۳-۴ بحث شدند. هنگامی که یکی از دو حالت، مثلاً $|\varphi_1\rangle$ ناپایدار است، چه تغییراتی پدید می‌آید؟

مفهوم‌های حالت ناپایدار طول عمر در مکمل K_{III} وارد شده‌اند. به‌عنوان مثال، فرض می‌کنیم که $|\varphi_1\rangle$ یک حالت اتمی برانگیخته است. هنگامی که اتم در این حالت است، می‌تواند با گسیل خود به خود یک یا چند فوتون، با یک احتمال $1/\tau$ در واحد زمان، به تراز با انرژی پایینتر برود: τ_1 طول عمر حالت ناپایدار $|\varphi_1\rangle$ است. برعکس، فرض می‌کنیم که، در غیاب جفتیدگی W ، حالت $|\varphi_2\rangle$ پایدار باشد (τ_2 بینهایت است).

در مکمل K_{III} فصل سوم دیدیم که یک شیوه ساده برای به حساب آوردن ناپایداری یک حالت، این است که یک جمله موهومی به انرژی متناظر افزوده شود. بدینسان، به جای انرژی E_1 حالت $|\varphi_1\rangle$ می‌گذاریم

$$E_1' = E_1 - i\frac{\hbar}{\tau_1} \quad (1)$$

با

$$\gamma_1 = \frac{1}{\tau_1} \quad (2)$$

(چون τ_2 بینهایت است، γ_2 برابر است با صفر و $E_2' = E_2$). بنابراین، در غیاب جفتیدگی، ماتریس

نماینده "هامیلتونی" H_0 دستگاه در پایه $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$ چنین نوشته می‌شود^۱

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1' & 0 \\ 0 & E_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_1 - i\frac{\hbar}{\gamma} \gamma_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} \quad (3)$$

۲. تأثیر جفتیدگی ضعیف روی حالت‌های با انرژیهای مختلف

اکنون فرض کنیم که مشابه با بخش ۳-۴، به H_0 یک پیرشیدگی W بیفزاییم که ماتریس آن در پایه $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$ عبارت است از

$$W = \begin{pmatrix} 0 & W_{12} \\ W_{21} & 0 \end{pmatrix} \quad (4)$$

در این صورت، انرژیها و طول عمرهای ترازها به چه صورتی درمی‌آیند؟
ویژه‌مقدارهای ε_1' و ε_2' ماتریس

$$H = H_0 + W = \begin{pmatrix} E_1 - i\frac{\hbar}{\gamma} \gamma_1 & W_{12} \\ W_{21} & E_2 \end{pmatrix} \quad (5)$$

را حساب می‌کنیم. ε_1' و ε_2' جوابهای معادله

$$\varepsilon^2 - \varepsilon \left(E_1 + E_2 - i\frac{\hbar}{\gamma} \gamma_1 \right) + E_1 E_2 - i\frac{\hbar}{\gamma} \gamma_1 E_2 - |W_{12}|^2 = 0 \quad (6)$$

هستند. برای ساده‌کردن محاسبات، موردی را در نظر می‌گیریم که جفتیدگی ضعیف است

$$\left(|W_{12}| \ll \sqrt{(E_1 - E_2)^2 + \frac{\hbar^2}{\gamma^2} \gamma_1^2} \right)$$

۱. عملگر H_0 هرمیتی نیست و بنابراین یک هامیلتونی واقعی نیست (نگاه کنید به یادداشت پایان مکمل KIII فصل سوم).

در این صورت خواهیم یافت

$$\begin{aligned} \varepsilon'_1 &\simeq E_1 - i\frac{\hbar}{\Psi}\gamma_1 + \frac{|W_{12}|^2}{E_1 - E_2 - i\frac{\hbar}{\Psi}\gamma_1} \\ \varepsilon'_2 &\simeq E_2 + \frac{|W_{12}|^2}{E_2 - E_1 + i\frac{\hbar}{\Psi}\gamma_1} \end{aligned} \quad (7)$$

انرژیهای ویژه حالتها با بودن جفتیدگی، بخشهای حقیقی ε'_1 و ε'_2 هستند و طول عمرها با بخشهای موهومی آنها به طور معکوس متناسباند. از (۷) پیداست که جفتیدگی، تا مرتبه دوم $|W_{12}|$ ، هم انرژیها و هم طول عمرها را تغییر می دهد. به ویژه دیده می شود هنگامی که $|W_{12}|$ صفر نیست، ε'_1 و ε'_2 هر دو مختلط هستند؛ بنابراین در حضور جفتیدگی، دیگر حالت پایداری وجود ندارد. ε'_2 را می توان بدین شکل نوشت

$$\varepsilon'_2 = \Delta_2 - i\frac{\hbar}{\Psi}\Gamma_2 \quad (8)$$

با

$$\Delta_2 = E_2 + \frac{(E_2 - E_1) |W_{12}|^2}{(E_2 - E_1)^2 + \frac{\hbar^2}{\Psi}\gamma_1^2} \quad (9\text{-الف})$$

$$\Gamma_2 = \gamma_1 \frac{|W_{12}|^2}{(E_2 - E_1)^2 + \frac{\hbar^2}{\Psi}\gamma_1^2} \quad (9\text{-ب})$$

پس حالت $|\varphi_2\rangle$ ، بر اثر جفتیدگی، طول عمر محدودی می یابد که عکس آن با (۹-ب) (فرمول بت) داده شده است. این نتیجه از دید فیزیکی به خوبی فهمیده می شود: اگر دستگاه در لحظه $t = 0$ در حالت پایدار $|\varphi_2\rangle$ باشد. احتمال غیرصفری وجود دارد که در لحظه t بعدی در حالت $|\varphi_1\rangle$ ، که در آن دارای طول عمر محدودی است، یافت شود. گاهی به طور مجازی گفته می شود که "جفتیدگی بخشی از ناپایداری تراز دیگر را به تراز پایدار منتقل می سازد". وانگهی، از عبارتهای (۷) دیده می شود که، همچون موردی که در بخش ۳-۴ بررسی شد، هرچه اختلاف انرژی ناپیشیده E_2 و E_1 کمتر باشد، پریشیدگی بر انرژیها و طول عمرها مؤثرتر عمل می کند. بدینسان، موردی را در بخش آینده بررسی خواهیم کرد که این اختلاف صفر است.

۳. تأثیر جفتیدگی دلخواه بر حالت‌های هم‌انرژی

هنگامی که انرژی‌های E_1 و E_2 برابرند، عملگر H ، اگر رد آن را مشابه با بخش ۲ مکمل ۲، تصریح کنیم، چنین نوشته می‌شود

$$H = \left(E_1 - i \frac{\hbar}{\tau} \gamma_1 \right) \mathbb{1} + K \quad (10)$$

که در آن $\mathbb{1}$ عملگر همانی و K عملگری است که در پایه $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$ دارای ماتریس

$$(K) = \begin{pmatrix} -i \frac{\hbar}{\tau} \gamma_1 & W_{12} \\ W_{12}^* & i \frac{\hbar}{\tau} \gamma_1 \end{pmatrix} \quad (11)$$

است. ویژه‌مقدارهای k_1 و k_2 از عملگر K دو پاسخ معادله سرشتی

$$k^2 = |W_{12}|^2 - \frac{\hbar^2}{16} \gamma_1^2 \quad (12)$$

هستند، و بنابراین قرینه‌اند

$$k_1 = -k_2 \quad (13)$$

که برای ویژه‌مقدارهای H می‌دهند

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= E_1 - i \frac{\hbar}{\tau} \gamma_1 + k_1 \\ \varepsilon_2 &= E_1 - i \frac{\hbar}{\tau} \gamma_1 - k_1 \end{aligned} \quad (14)$$

ویژه‌بردارهای H و K یکی هستند و یک محاسبه ساده، $|\psi'_1\rangle$ و $|\psi'_2\rangle$ را به دست می‌دهد^۱

$$\begin{aligned} |\psi'_1\rangle &= W_{12} |\varphi_1\rangle + \left(k_1 + i \frac{\hbar}{\tau} \gamma_1 \right) |\varphi_2\rangle \\ |\psi'_2\rangle &= W_{12} |\varphi_1\rangle + \left(-k_1 + i \frac{\hbar}{\tau} \gamma_1 \right) |\varphi_2\rangle \end{aligned} \quad (15)$$

۱. در محاسبه‌ای که در اینجا انجام می‌دهیم، بهنجار کردن $|\psi'_1\rangle$ و $|\psi'_2\rangle$ ضروری نیست. از سوی دیگر باید توجه داشت که چون H هرمیتی نیست، $|\psi'_1\rangle$ و $|\psi'_2\rangle$ بر هم عمود نیستند.

فرض کنیم که دستگاه در لحظه $t = 0$ در حالت $|\varphi_2\rangle$ (که در غیاب جفتدگی پایدار است) باشد

$$|\psi(t=0)\rangle = |\varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}k_1} [|\psi_1'\rangle - |\psi_2'\rangle] \quad (16)$$

با به کار بردن (۱۴) دیده می شود که بردار حالت در لحظه t عبارت است از

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}k_1} e^{-iE_1 t/\hbar} e^{-\gamma_1 t/2} [e^{-ik_1 t/\hbar} |\psi_1'\rangle - e^{ik_1 t/\hbar} |\psi_2'\rangle] \quad (17)$$

احتمال $\mathcal{P}_{21}(t)$ برای اینکه دستگاه در لحظه t در حالت $|\varphi_1\rangle$ باشد چنین است.

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{21}(t) &= |\langle \varphi_1 | \psi(t) \rangle|^2 \\ &= \frac{1}{4 |k_1|^2} e^{-\gamma_1 t} |e^{-ik_1 t/\hbar} \langle \varphi_1 | \psi_1' \rangle - e^{ik_1 t/\hbar} \langle \varphi_1 | \psi_2' \rangle|^2 \quad (18) \\ &= \frac{1}{4 |k_1|^2} e^{-\gamma_1 t} |W_{12}|^2 |e^{-ik_1 t/\hbar} - e^{ik_1 t/\hbar}|^2 \end{aligned}$$

اکنون چندین مورد را از هم تمیز می دهیم:
الف) هنگامی که شرط

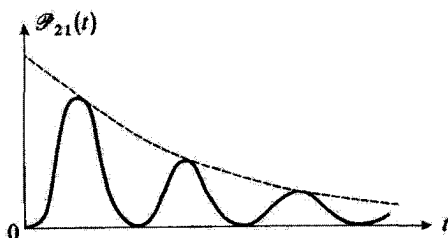
$$|W_{12}| > \frac{\hbar}{4} \gamma_1 \quad (19)$$

برقرار است، با استفاده از (۱۲) مستقیماً به دست می آید

$$k_1 = -k_2 = \sqrt{|W_{12}|^2 - \left(\frac{\hbar}{4} \gamma_1\right)^2} \quad (20)$$

و ویژه مقدارهای ε_1' و ε_2' از روابط زیر تعیین می شوند

$$\begin{aligned} \varepsilon_1' &= E_1 + \sqrt{|W_{12}|^2 - \left(\frac{\hbar}{4} \gamma_1\right)^2} - i \frac{\hbar}{4} \gamma_1 \\ \varepsilon_2' &= E_1 - \sqrt{|W_{12}|^2 - \left(\frac{\hbar}{4} \gamma_1\right)^2} - i \frac{\hbar}{4} \gamma_1 \end{aligned} \quad (21)$$



شکل ۱ اثر یک جفت‌شدگی قوی بین حالت پایدار $|\varphi_1\rangle$ و حالت ناپایدار $|\varphi_2\rangle$. اگر سیستم ابتدا در حالت $|\varphi_2\rangle$ باشد، احتمال $P_{21}(t)$ آنکه در زمان t در حالت $|\varphi_1\rangle$ باشد نوسانهای میرا را نشان می‌دهد.

قسمتهای موهومی ϵ'_1 و ϵ'_2 یکسان اما قسمتهای حقیقی آنها متفاوت‌اند. بنابراین، حالت‌های $|\psi'_1\rangle$ و $|\psi'_2\rangle$ نیمه عمر یکسانی برابر با $2\tau_1$ دارند، اما انرژیهایشان مختلف است. با جانشانی (۲۰) در (۱۸) به دست می‌آوریم

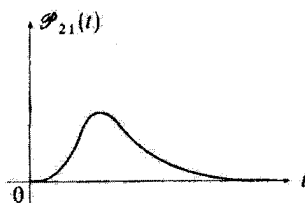
$$P_{21}(t) = \frac{|W_{12}|^2}{|W_{12}|^2 - \left(\frac{\hbar}{4}\gamma_1\right)^2} e^{-\gamma_1 t/2} \sin^2 \left(\sqrt{|W_{12}|^2 - \left(\frac{\hbar}{4}\gamma_1\right)^2} \frac{t}{\hbar} \right) \quad (22)$$

شکل این فرمول یادآور فرمول رابی است [معادله (۴-۸۰)]. تابع $P_{21}(t)$ با نوسانات سینوسی میرا با ثابت زمانی $2\tau_1$ نمایش داده می‌شود (شکل ۱). از این رو شرایط (۱۹) حاکی از آن است که جفت‌شدگی به اندازه‌ای قوی است که بتواند سیستم را قبل از اینکه ناپایداری حالت $|\varphi_1\rangle$ احساس شود، وادار به نوسان بین حالت‌های $|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$ کند. (ب) از طرف دیگر، اگر شرط زیر صادق باشد

$$|W_{12}| < \frac{\hbar}{4}\gamma_1 \quad (23)$$

آنگاه داریم

$$k_1 = -k_2 = i\sqrt{\left(\frac{\hbar}{4}\gamma_1\right)^2 - |W_{12}|^2} \quad (24)$$



شکل ۲ هنگامی که جفتیدگی ضعیف است. نوسانهای میان حالتهای $|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$ فرصت رخدادن ندارند.

و

$$\begin{aligned} \epsilon'_1 &= E_1 - i \left[\frac{\hbar}{\mathcal{F}} \gamma_1 - \sqrt{\left(\frac{\hbar}{\mathcal{F}} \gamma_1\right)^2 - |W_{12}|^2} \right] \\ \epsilon'_2 &= E_1 - i \left[\frac{\hbar}{\mathcal{F}} \gamma_1 + \sqrt{\left(\frac{\hbar}{\mathcal{F}} \gamma_1\right)^2 - |W_{12}|^2} \right] \end{aligned} \quad (25)$$

در این صورت $|\psi'_1\rangle$ و $|\psi'_2\rangle$ دارای انرژیهای یکسان و طول عمرهای مختلفی هستند. فرمول (۱۸) چنین می شود

$$\mathcal{P}_{21}(t) = \frac{|W_{12}|^2}{\left(\frac{\hbar}{\mathcal{F}} \gamma_1\right)^2 - |W_{12}|^2} e^{-\gamma_1 t / \mathcal{F}} \sinh^2 \left(\sqrt{\left(\frac{\hbar}{\mathcal{F}} \gamma_1\right)^2 - |W_{12}|^2} \frac{t}{\hbar} \right) \quad (26)$$

این $\mathcal{P}_{21}(t)$ بار مجموعی از توابع نمایی میراست (شکل ۲).

این نتیجه دارای تعبیر فیزیکی ساده‌ای است: شرط (۲۳) بیان می‌کند که طول عمر τ_1 آن قدر کوتاه است که دستگاه را، پیش از آنکه جفتیدگی W فرصت یابد آن را میان حالتهای $|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$ به نوسان درآورد، میرا می‌کند.

چ) سرانجام موردی را بررسی کنیم که دقیقاً داشته باشیم

$$|W_{12}| = \frac{\hbar}{\mathcal{F}} \gamma_1 \quad (27)$$

از (۱۴) پیداست که حالتهای $|\psi'_1\rangle$ و $|\psi'_2\rangle$ در این صورت، هم دارای انرژی یکسان E_1 و هم طول عمر یکسان τ_1 هستند.

معادله‌های (۲۲) و (۲۶) در این مورد مبهم هستند، و هر دو پس از حل می‌دهند

$$\mathcal{P}_{r_1}(t) = \frac{|W_{r_2}|^2}{\hbar^2} t^2 e^{-\gamma t/2} \quad (28)$$

یادداشت:

بررسی پیشین بسیار شبیه به بررسی حرکت کلاسیک یک نوسانگر هماهنگ میراست. شرطهای (۱۹)، (۲۳)، و (۲۷) به ترتیب با میرایی ضعیف، قوی، و بحرانی متناظر هستند. ■

مراجع برای مطالعه بیشتر

کاربرد مهم پدیده‌ای که در این مکمل از آن بحث شد کوتاه‌شدن نیمه‌عمر حالت شبه‌پایدار در میدان الکتریکی است. مراجع زیر را ببینید

Lamb and Retherford (3.11), App.II; Sobel'man (11.12), chap. 8, §28-5.

مکمل ۹

تمرینات

۱. ذره‌ای با اسپین $1/2$ و گشتاور مغناطیسی $\mathbf{M} = \gamma \mathbf{S}$ را در نظر بگیریم. فضای حالت‌های اسپین در پایه بردارهای $|+\rangle$ و $|-\rangle$ ، ویژه بردارهای S_z با ویژه مقادیرهای $+\hbar/2$ و $-\hbar/2$ ، بیان شده است. حالت دستگاه در لحظه $t = 0$ عبارت است از $|+\rangle = |\psi(t=0)\rangle$
الف) اگر در لحظه $t = 0$ مشاهده پذیر S_x اندازه‌گیری شود، چه نتایجی، و با چه احتمال‌هایی را می‌توان به دست آورد؟

ب) به جای اندازه‌گیری پیشین، دستگاه را تحت تأثیر یک میدان مغناطیسی موازی با Oy به قدرمطلق B قرار می‌دهیم تا آزادانه تحول یابد. حالت دستگاه را در پایه $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ در لحظه t حساب کنید.

ج) در این لحظه t ، مشاهده پذیرهای S_x ، S_y ، و S_z را اندازه می‌گیریم. چه اندازه‌هایی را، و با چه احتمال‌هایی، می‌توان به دست آورد؟ چه رابطه‌ای باید میان B و t وجود داشته باشد تا یکی از اندازه‌گیریها نتیجه از پیش مسلمی به دست دهد؟ چه تغییر فیزیکی از این شرط دارید؟

۲. یک اسپین $1/2$ را همانند تمرین پیشین در نظر می‌گیریم و همان نمادگذاریها را به کار می‌بریم. الف) در لحظه $t = 0$ ، مقدار S_y را اندازه می‌گیریم و $+\hbar/2$ را به دست می‌آوریم. بردار حالت $|\psi(0)\rangle$ ، بلافاصله بعد از اندازه‌گیری، چیست؟

ب) بلافاصله پس از اندازه‌گیری، یک میدان یکنواخت موازی با Oz و وابسته به زمان، اعمال می‌کنیم. عملگر هامیلتونی $H(t)$ اسپین در این صورت می‌شود

$$H(t) = \omega_0(t) S_z$$

فرض می‌کنیم که $\omega_0(t)$ برای $t < 0$ و $t > T$ صفر است و هنگامی که $0 \leq t \leq T$ باشد، به‌طور خطی از صفر تا ω افزایش می‌یابد (T یک پارامتر داده شده و هم بعد با زمان است). نشان دهید که در لحظه t بردار حالت چنین نوشته می‌شود

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{i\theta(t)} |+\rangle + i e^{-i\theta(t)} |-\rangle]$$

که در آن $\theta(t)$ تابعی حقیقی از زمان است که باید محاسبه شود.

ج) در یک لحظه $t = \tau > T$ مقدار S_y را اندازه می‌گیریم. چه نتایجی را، و با چه احتمالهایی، می‌توان به‌دست آورد؟ رابطه‌ای را به‌دست آورید که باید میان ω و T وجود داشته باشد تا از نتیجه اندازه‌گیری مطمئن باشیم؟ چه تعبیر فیزیکی دارید؟

۳. یک اسپین $1/2$ را در نظر می‌گیریم که در یک میدان مغناطیسی B_0 با مؤلفه‌های:

$$\begin{cases} B_x = \frac{1}{\sqrt{2}} B_0 \\ B_y = 0 \\ B_z = \frac{1}{\sqrt{2}} B_0 \end{cases}$$

قرار دارد. نمادگذاریها همانهایی هستند که در تمرین ۱ به‌کار برده شده‌اند.

الف) ماتریس نماینده عملگر هامیلتونی H دستگاه را در پایه $\{|-\rangle, |+\rangle\}$ حساب کنید. ب) ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای H را حساب کنید.

ج) دستگاه در لحظه $t = 0$ در حالت $|-\rangle$ است. هرگاه انرژی را اندازه بگیریم چه اندازه‌هایی را، و با چه احتمالهایی، می‌توانیم به‌دست آوریم؟

د) بردار حالت $|\psi(t)\rangle$ را در لحظه t حساب کنید. در این لحظه S_x را اندازه می‌گیریم. اندازه میانگین نتایجی را که می‌توان به‌دست آورد چیست؟ تعبیری هندسی ارائه دهید.

۴. وسیله تجربی را که در بخش ۴-۲-۲-ب توصیف شد در نظر می‌گیریم (شکل ۸-۴): یک باریکه از اتمهای دارای اسپین $1/2$ نخست از دستگاهی عبور می‌کند که به‌عنوان "قطبی‌کننده" در راستایی که با Oz زاویه θ می‌سازد به‌کار می‌رود و سپس از دستگاه دیگری به‌عنوان تجزیه‌گر که مؤلفه S_x را اندازه می‌گیرد عبور می‌کند. در این تمرین فرض می‌کنیم که میان قطبی‌کننده و تجزیه‌گر، یک میدان مغناطیسی یکنواخت B_0 موازی با Ox در طول L بر باریکه اتمی اعمال می‌شود. v را سرعت اتمها و $T = L/v$ را زمانی می‌نامیم که در آن مدت اتمها تحت تأثیر میدان B_0 قرار می‌گیرند. قرار می‌دهیم $\omega_0 = -\gamma B_0$.

الف) بردار حالت $|\psi_1\rangle$ یک اسپین در لحظه‌ای که به تجزیه‌گر وارد می‌شود، چیست؟
 ب) نشان دهید که هنگام اندازه‌گیری در تجزیه‌گر، احتمالی برابر با $1/2(1 + \cos\theta \cos\omega_0 T)$ وجود دارد که $+\hbar/2$ و احتمالی برابر با $1/2(1 - \cos\theta \cos\omega_0 T)$ وجود دارد که $-\hbar/2$ به‌دست آید. تعبیری فیزیکی ارائه دهید.

ج) (این پرسش و پرسش بعدی مفهوم عملگر چگالی را که در مکمل EIII تعریف شده است، وارد می‌کند. همچنین توصیه می‌شود که خواننده به مکمل ۵ همین فصل مراجعه کند). نشان دهید

که ماتریس چگالی ρ_1 یک اسپین، که در تجزیه‌گر وارد می‌شود، در پایه $\{| + \rangle, | - \rangle\}$ چنین نوشته می‌شود

$$\rho_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \cos \theta \cos \omega_0 T & \sin \theta + i \cos \theta \sin \omega_0 T \\ \sin \theta - i \cos \theta \sin \omega_0 T & 1 - \cos \theta \cos \omega_0 T \end{pmatrix}$$

ρ_1 چگالی عملگر چگالی $\text{Tr}\{\rho_1 S_x\}$ ، $\text{Tr}\{\rho_1 S_y\}$ و $\text{Tr}\{\rho_1 S_z\}$ را حساب کنید. آنها را تعبیر کنید. آیا عملگر چگالی ρ_1 حالت خالصی را بیان می‌کند؟

د) اکنون فرض می‌کنیم که سرعت یک اتم کمیتی کتره‌ای است و از این رو زمان T تنها با یک عدم قطعیت ΔT معلوم است. به علاوه فرض می‌شود که میدان B_0 به اندازه کافی بزرگ است تا $\omega_0 \Delta T \gg 1$ باشد. اندازه‌های ممکن حاصلضرب $\omega_0 T$ ، در این صورت، تمام اندازه‌های میان 0 و 2π (با تقریب افزایشی مضربی از 2π) هستند و هم‌احتمال‌اند.

در این مورد، عملگر چگالی ρ_2 یک اتم در لحظه ورود به تجزیه‌گر چیست؟ آیا ρ_2 متناظر با یک مورد خالص است؟ کمیت‌های $\text{Tr}\{\rho_2 S_x\}$ ، $\text{Tr}\{\rho_2 S_y\}$ و $\text{Tr}\{\rho_2 S_z\}$ را حساب کنید. تعبیر چیست؟ در چه موردی عملگر چگالی یک اسپین کاملاً قطبی، یا برعکس کاملاً غیرقطبی را توصیف می‌کند؟

پدیده‌های مشاهده شده در خروجی تجزیه‌گر را، هنگامی که ω_0 از صفر تا اندازه‌ای که برای آن شرط $\omega_0 \Delta T \gg 1$ برقرار است، تغییر می‌کند، به‌طور کیفی بیان کنید.

۵. عملگر تحول یک اسپین $1/2$ (مکمل FIII را ببینید).

یک اسپین $1/2$ با گشتاور مغناطیسی $\mathbf{M} = \gamma \mathbf{S}$ در نظر می‌گیریم که در یک میدان مغناطیسی \mathbf{B}_0 با مؤلفه‌های $B_x = -\omega/\gamma$ ، $B_y = -\omega_y/\gamma$ ، $B_z = -\omega/\gamma$ قرار دارد. می‌گذاریم:

$$\omega_0 = -\gamma |\mathbf{B}_0|$$

الف) نشان دهید که عملگر تحول این اسپین می‌شود

$$U(t, 0) = e^{-iMt}$$

که در آن M عملگر

$$M = \frac{1}{\hbar} [\omega_x S_x + \omega_y S_y + \omega_z S_z] = \frac{1}{\hbar} [\omega_x \sigma_x + \omega_y \sigma_y + \omega_z \sigma_z]$$

است. σ_x ، σ_y و σ_z سه ماتریس پائولی هستند (مکمل ۱ همین فصل).

ماتریس نماینده M را در پایه $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ ویژه‌بردارهای S_z حساب کنید. نشان دهید که

$$M^2 = \frac{1}{4}[\omega_x^2 + \omega_y^2 + \omega_z^2] = \left(\frac{\omega_0}{2}\right)^2$$

(ب) عملگر تحول را به شکل زیر درآورید

$$U(t, 0) = \cos\left(\frac{\omega_0 t}{2}\right) - \frac{2i}{\omega_0} M \sin\left(\frac{\omega_0 t}{2}\right)$$

(ج) اسپین را که در لحظه $t = 0$ در حالت $|+\rangle$ است در نظر می‌گیریم. نشان دهید که احتمال $\mathcal{P}_{++}(t)$ برای یافتن اسپین در لحظه t در حالت $|+\rangle$ عبارت است از

$$\mathcal{P}_{++}(t) = |\langle + | U(t, 0) | + \rangle|^2$$

و رابطه زیر را به دست آورید

$$\mathcal{P}_{++}(t) = 1 - \frac{\omega_x^2 + \omega_y^2}{\omega_0^2} \sin^2\left(\frac{\omega_0 t}{2}\right)$$

تعبیری هندسی ارائه دهید.

۶. دستگاهی را که از دو اسپین $1/2$ ، S_1 و S_2 تشکیل شده است و پایه چهاربرداری $|\pm, \pm\rangle$ را که در مکمل ۴ تعریف شده است، در نظر می‌گیریم. دستگاه در لحظه $t = 0$ در حالت زیر است

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{4} |++\rangle + \frac{1}{4} |+-\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |--\rangle$$

الف) در لحظه $t = 0$ ، S_{1z} اندازه‌گیری می‌شود، احتمال یافتن $-\hbar/2$ چیست؟ بردار حالت پس از این اندازه‌گیری چیست؟ اگر پس از آن S_{1z} اندازه‌گیری شود، چه نتایجی را با چه احتمالهایی می‌توان یافت؟ به همین پرسشها هرگاه اندازه‌گیری S_{1z} مقدار $+\hbar/2$ را داده باشد، پاسخ دهید. (ب) در حالی که دستگاه در حالت $|\psi(0)\rangle$ توصیف شده در بالاست، S_{1z} و S_{2z} را همزمان اندازه می‌گیریم. احتمال آنکه نتایج مخالف به دست آید، چیست؟ احتمال نتایج همسان چیست؟

ج) به جای اندازه‌گیرهای پیشین، می‌گذاریم دستگاه تحت تأثیر هامیلتونی

$$H = \omega_1 S_{1z} + \omega_2 S_{2z}$$

تحول یابد. بردار حالت $|\psi(t)\rangle$ در لحظه t چیست؟ اندازه‌های میانگین $\langle S_1 \rangle$ و $\langle S_2 \rangle$ را در لحظه t محاسبه کنید. تعبیری فیزیکی ارائه دهید.

د) نشان دهید که طول بردارهای $\langle S_1 \rangle$ و $\langle S_2 \rangle$ کوچکتر از $\hbar/2$ است. شکل $\langle \psi(0) | \psi(0) \rangle$ چگونه باید باشد تا این طولها هر دو برابر با $\hbar/2$ باشند؟

۷. همان دستگاه دو اسپین $1/2$ را همانند تمرین پیشین در نظر می‌گیریم. فضای حالتها برحسب پایه چهار حالت (\pm, \pm) بیان می‌شود.

الف) ماتریس 4×4 نماینده عملگر S_{1y} را در این پایه بنویسید. ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای این عملگر چیست؟

ب) حالت بهنجارشده دستگاه می‌شود

$$|\psi\rangle = \alpha |++\rangle + \beta |+-\rangle + \gamma |-+\rangle + \delta |--\rangle$$

که در آن $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ ضرایب مختلط داده شده‌ای هستند. S_{1x} و S_{2y} را همزمان اندازه می‌گیریم، چه نتایجی را با چه احتمالی می‌توان یافت؟ هرگاه $|\psi\rangle$ حاصلضرب تانسوری یک بردار از فضای حالتهای اسپین نخست در یک بردار از فضای حالتهای اسپین دوم باشد این احتمالها چه خواهند شد؟

ج) به همین پرسشها هرگاه S_{1y} و S_{2y} اندازه‌گیری شوند پاسخ دهید.

د) به جای اندازه‌گیرهای پیشین، تنها S_{2y} را اندازه می‌گیریم. از نتایج (ب) و سپس از نتایج

(ج) احتمال یافتن $-\hbar/2$ را حساب کنید.

۸. الکترونی از یک مولکول سه اتمی خطی را که از سه اتم هم فاصله تشکیل شده است در نظر می‌گیریم. سه حالت راست‌هنجار این الکترون را، که به ترتیب با سه تابع موج جایگزین شده به دور هسته‌های A, B, C و متناظر هستند، با $|\varphi_A\rangle, |\varphi_B\rangle, |\varphi_C\rangle$ نشان می‌دهیم. در آنچه می‌آید بررسی خود را به زیرفضایی از فضای حالت که از $|\varphi_A\rangle, |\varphi_B\rangle, |\varphi_C\rangle$ پدید می‌آید محدود می‌کنیم.



هنگامی که از امکان جهش الکترون از هسته‌ای به هسته دیگر صرف‌نظر می‌کنیم، انرژی الکترون با هامیلتونی H_0 که ویژه‌حالتهای آن سه حالت $|\varphi_A\rangle, |\varphi_B\rangle, |\varphi_C\rangle$ با ویژه‌مقدار همسان

E_0 است، بیان می‌شود. جفت‌دگی میان حالت‌های $|\varphi_A\rangle$ ، $|\varphi_B\rangle$ ، و $|\varphi_C\rangle$ با یک هامیلتونی اضافی W توصیف می‌شود که چنین تعریف شده است

$$W |\varphi_A\rangle = -a |\varphi_B\rangle$$

$$W |\varphi_B\rangle = -a |\varphi_A\rangle - a |\varphi_C\rangle$$

$$W |\varphi_C\rangle = -a |\varphi_B\rangle$$

که در آن a یک ثابت حقیقی مثبت است.

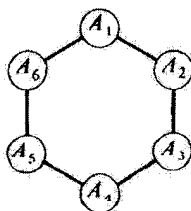
الف) انرژی‌ها و حالت‌های مانای هامیلتونی $H = H_0 + W$ را حساب کنید.

ب) الکترون در لحظه $t = 0$ در حالت $|\varphi_A\rangle$ است. در مورد جایگزینی الکترون در لحظه‌های بعدی t ، به‌طور کیفی بحث کنید. آیا لحظه‌هایی وجود دارد که الکترون در آن لحظه‌ها کاملاً در پیرامون اتم A ، B ، و C جایگزین شده باشد؟

ج) D را مشاهده‌پذیری بپذیرید که ویژه‌حالت‌های آن $|\varphi_A\rangle$ ، $|\varphi_B\rangle$ ، و $|\varphi_C\rangle$ با ویژه‌مقدارهای $-d$ ، 0 ، و d باشند. D در لحظه t اندازه‌گیری می‌شود، چه اندازه‌هایی را با چه احتمال‌هایی می‌توان به‌دست آورد؟

د) هنگامی که حالت آغازی الکترون دلخواه است، بسامدهای بور که می‌توانند در تحول (D) پدید آیند، کدام‌اند؟ تعبیری فیزیکی از D ارائه دهید. چه بسامدهایی از موج‌های الکترومغناطیسی می‌توانند به‌وسیلهٔ مولکول جذب یا گسیل شوند؟

۹. مولکولی از شش اتم همانند $A_1, A_2, A_3, A_4, A_5, A_6$ ، و A_6 که یک شش ضلعی منظم می‌سازند، پدید آمده است. الکترونی را در نظر می‌گیریم که می‌تواند روی هر یک از این اتم‌ها جایگزین شود. $|\varphi_n\rangle$ را حالتی می‌نامیم که در آن الکترون روی n امین اتم ($n = 1, 2, \dots, 6$) جایگزیده است. برای حالت‌های الکترون به فضایی بسنده می‌کنیم که از $|\varphi_n\rangle$ ها، که راست‌هنجار فرض شده‌اند، پدید آمده است.



الف) عملگر R را با روابط

$$R | \varphi_1 \rangle = | \varphi_2 \rangle; R | \varphi_2 \rangle = | \varphi_3 \rangle; \dots; R | \varphi_6 \rangle = | \varphi_1 \rangle$$

تعریف می‌کنیم. ویژه‌مقدارها و ویژه‌حالت‌های R را به دست آورید. نشان دهید که ویژه‌بردارهای R یک پایه از فضای حالتها تشکیل می‌دهند.

ب) هنگامی که از امکان رفتن الکترون از یک جایگاه به جایگاه دیگر صرف‌نظر می‌کنیم، انرژی الکترون با هامیلتونی H_0 که ویژه‌حالت‌های آن شش حالت $| \varphi_n \rangle$ با ویژه‌مقدار یکسان E_0 است، بیان می‌شود. همانند تمرین پیشین، امکان جهش الکترون را از اتمی به اتم دیگر با افزودن یک پیرشیدگی W به هامیلتونی H_0 ، بیان می‌کنیم. W چنین تعریف می‌شود

$$W | \varphi_1 \rangle = -a | \varphi_6 \rangle - a | \varphi_2 \rangle; W | \varphi_2 \rangle = -a | \varphi_1 \rangle - a | \varphi_3 \rangle; \\ \dots \dots; W | \varphi_6 \rangle = -a | \varphi_5 \rangle - a | \varphi_1 \rangle$$

نشان دهید که R با هامیلتونی کل $H = H_0 + W$ جابه‌جاشدنی است. از آن، ویژه‌حالت‌ها و ویژه‌مقدارهای H را نتیجه بگیرید. آیا در این ویژه‌حالت‌ها الکترون جایگزین شده است؟ ملاحظات پیشین را دربارهٔ مولکول بنزن به کار بندید.

مرجع

Feynman III (1.2), §15-4.

۵

نوسانگر هماهنگ یک بعدی

۱-۵ پیشگفتار

- ۱-۱-۵ اهمیت نوسانگر هماهنگ در فیزیک
 ۲-۱-۵ نوسانگر هماهنگ در مکانیک کلاسیک
 ۳-۱-۵ خواص عمومی هامیلتونی کوانتومی

۲-۵ ویژه‌مقدارهای هامیلتونی

- ۱-۲-۵ نمادگذاریها
 الف) عملگرهای \hat{X} و \hat{P}
 ب) عملگرهای a ، a^\dagger و N
 ۲-۲-۵ تعیین طیف
 الف) لمها
 ب) طیف N از اعداد درست غیرمنفی (یا صفر) تشکیل شده است
 ج) تعبیر عملگرهای a و a^\dagger
 ۳-۲-۵ واگنی ویژه‌مقدارها
 الف) حالت پایه غیرواگن است
 ب) همه ترازها غیرواگن هستند

۳-۵ ویژه‌حالت‌های هامیلتونی

- ۱-۳-۵ نمایش $\{|\varphi_n\rangle\}$
 الف) عبارت بردارهای پایه بر حسب $|\varphi_0\rangle$
 ب) رابطه‌های راست‌هنجاری و بستاری
 ج) کنش عملگرهای گوناگون
 ۲-۳-۵ توابع موج وابسته به حالت‌های مانا

۴-۵ بحث فیزیکی

- ۱-۴-۵ اندازه‌های میانگین و انحراف‌های ریشه میانگین
 مربعی X و P در یک حالت $|\varphi_n\rangle$
 ۲-۴-۵ خواص حالت پایه
 ۳-۴-۵ تحول اندازه‌های میانگین در زمان

۱-۵ پیشگفتار

۱-۱-۵ اهمیت نوسانگر هماهنگ در فیزیک

این فصل به مطالعه یک دستگاه فیزیکی به ویژه مهم اختصاص داده شده است: نوسانگر هماهنگ یک بعدی.

ساده ترین مثال چنین دستگاهی، ذره ای به جرم m است که در پتانسیلی که تنها به x وابسته است و دارای شکل

$$V(x) = \frac{1}{2} kx^2 \quad (1-5)$$

است، جابه جا می شود (k ثابت حقیقی مثبتی است). ذره به سوی صفحه $x = 0$ [مینیموم $V(x)$] متناظر با وضعهای ترازمندی پایدار دستگاه] با نیروی بازگرداننده

$$F_x = -\frac{dV}{dx} = -kx \quad (2-5)$$

که با فاصله x میان ذره و صفحه $x = 0$ متناسب است، کشیده می شود. می دانیم که در مکانیک کلاسیک تصویر حرکت ذره بر روی Ox یک نوسان سینوسی پیرامون $x = 0$ با بسامد زاویه ای زیر صورت می گیرد

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (3-5)$$

در عمل، شمار بزرگی از دستگاهها (دست کم به طور تقریبی) از معادله های نوسانگر هماهنگ پیروی می کنند. در واقع هر بار که رفتار یک دستگاه فیزیکی در نزدیکی یک وضع ترازمندی پایدار را مطالعه می کنیم معادلاتی می یابیم که، در حد نوسانهای کوچک، معادله های نوسانگر هماهنگ هستند (بخش ۱-۵-۲ را ببینید). بنابراین، نتایجی را که در این فصل می یابیم، بر یک رشته از پدیده های فیزیکی مهم قابل اعمال هستند. برای مثال، ارتعاشهای اتمهای یک مولکول پیرامون وضع ترازمندی آن و نوسان اتمها یا یونهای یک شبکه بلورین (فونونها) را نام ببریم.^۱

نوسانگر هماهنگ در بررسی میدان الکترومغناطیسی نیز به کار می رود. در واقع، می دانیم که در یک حفره، بینهایت موج مانای ممکن (مدهای طبیعی حفره) وجود دارد. میدان مغناطیسی را می توان برحسب این مدها بسط داد و به کمک معادله های ماکسول نشان داده می شود که هر کدام

۱. مکمل ۱ همین فصل به مطالعه کیفی چند مثال فیزیکی از نوسانگر هماهنگ اختصاص داده شده است.

از ضریبهای این بسط (که حالت میدان را در هر لحظه توصیف می‌کنند) از معادله دیفرانسیلی همانند با معادله نوسانگر هماهنگ که بسامد زاویه‌ای آن همان بسامد زاویه‌ای گونه ویژه وابسته است، پیروی می‌کنند. به بیان دیگر میدان الکترومغناطیسی به طور صوری با مجموعه‌ای از نوسانگرهای هماهنگ مستقل هم‌ارز است (مکمل ۱۱ همین فصل را ببینید). کوانتس میدان به طور ساده از کوانتس این نوسانگرهای وابسته به گونه‌های ویژه متفاوت حفره، به دست می‌آید. وانگهی یادآور می‌شویم که، به طور تاریخی، مطالعه این نوسانگرها در ترازمندی گرمایی (تابش جسم سیاه) بود که پلانک را رهنمون شد تا نخستین بار در فیزیک، ثابت h را که به نام اوست، وارد کند. در واقع خواهیم دید (مکمل ۱۲ همین فصل را ببینید) که انرژی میانگین یک نوسانگر هماهنگ در ترازمندی ترمودینامیکی در دمای T بسته به اینکه نوسانگر کلاسیک یا کوانتومی باشد، یکی نیست.

نوسانگر هماهنگ، همچنین، در توصیف مجموعه‌ای از ذره‌های همسان که همگی در یک حالت کوانتومی هستند، دارای نقش مهمی است (پیداست که موضوع فقط مربوط به بوزونهاست، فصل ۱۴ را ببینید). چنانکه بعد خواهیم دید، این کیفیت بدان سبب است که ترازهای انرژی نوسانگر هماهنگ هم فاصله هستند و فاصله‌ای که دو تراز پیاپی را از یکدیگر جدا می‌کنند برابر $\hbar\omega$ است. در این صورت، به تراز انرژی که با عدد درست n نشانه‌گذاری شده (و در فاصله $n\hbar\omega$ از حالت پایه قرار دارد)، می‌توان مجموعه‌ای از n ذره (یا کوانتوم) همسان نسبت داد که هر یک دارای انرژی $\hbar\omega$ باشد. گذر نوسانگر از تراز n به تراز $n+1$ یا $n-1$ با آفرینش یا نابودی یک کوانتوم انرژی $\hbar\omega$ متناظر است. در این فصل عملگرهای a^\dagger و a را، که امکان می‌دهند تا گذر از تراز n به تراز $n+1$ یا $n-1$ را توصیف کنیم، وارد خواهیم کرد. این عملگرها که عملگرهای آفرینش و نابودی نام دارند به طور جاری در مکانیک آماری کوانتومی و نظریه کوانتومی میدانها به کار می‌رود.^۱

بنابراین، مطالعه تفصیلی نوسانگر هماهنگ در مکانیک کوانتومی از دیدگاه فیزیکی بینهایت اهمیت دارد. به علاوه، با یک دستگاه کوانتومی سروکار داریم که معادله شرودینگر آن را می‌توان به دقت حل کرد. پس از مطالعه اسپین ۱/۲ و دستگاههای دوترازه که در فصل ۴ گسترش داده شد، اکنون مثال ساده دیگری را بررسی می‌کنیم که با آن می‌توان صورتبندی عمومی نظریه کوانتومی را روشن نمود. به ویژه نشان خواهیم داد که چگونه می‌توان یک معادله ویژه مقدراری را به شیوه کاملاً عملگری تنها بر پایه روابط جابه‌جایی حل کرد. (روشی که در فصل ۶ نیز برای تکانه زاویه‌ای به کار خواهد رفت). همچنین حرکت بسته‌های موج را، به ویژه در حد کلاسیک، به تفصیل مطالعه خواهیم کرد (مکمل ۷ همین فصل در مورد حالت‌های شبه کلاسیک را ببینید).

۱. هدف نظریه کوانتومی میدان، توصیف برهم‌کنش میان ذره‌ها، به ویژه برهم‌کنش میان الکترون، پوزیترون، و فوتون، در گستره نسبیتی است. روشن است که عملگرهای آفرینش و نابودی ذره‌ها می‌توانند نقش مهمی بازی کنند، زیرا چنین فرایندهایی واقعاً به طور تجربی مشاهده می‌شوند (جذب یا گسیل فوتون، آفرینش زوج، یا جفت ...).

در بخش ۱-۵، ما نتایجی چند از نوسانگر کلاسیک را، پیش از بیان برخی از خواص عمومی ویژه مقادارهای هامیلتونی H (بخش ۱-۵-۳)، یادآوری می‌کنیم. سپس در بخشهای ۱-۵-۲ و ۱-۵-۳ این ویژه مقادارها و ویژه بردارها را، با وارد کردن عملگرهای آفرینش و نابودی و تنها با به کار بردن پیامدهای رابطه جابه‌جایی بنیادی $[X, P] = i\hbar$ و همچنین شکل ویژه H ، تعیین خواهیم کرد. بخش ۱-۵-۴ به مطالعه فیزیکی حالت‌های مانای نوسانگر و بسته موج‌های حاصل از برهم‌نهی خطی این حالت‌های مانا تخصیص داده شده است.

۱-۵-۲ نوسانگر هماهنگ در مکانیک کلاسیک

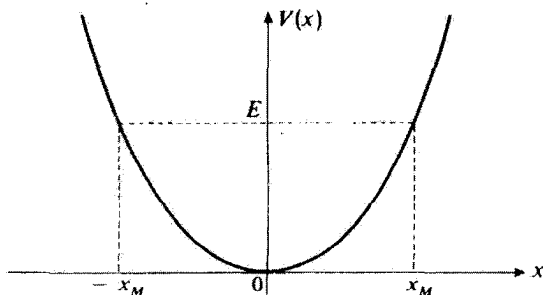
انرژی پتانسیل $V(x)$ [فرمول (۱-۵)] در شکل ۱-۵ نشان داده شده است. حرکت ذره از معادله دینامیک زیر پیروی می‌کند

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -\frac{dV}{dx} = -kx \quad (۴-۵)$$

پاسخ عمومی این معادله به شکل

$$x = x_M \cos(\omega t - \varphi) \quad (۵-۵)$$

است که در آن ω با رابطه (۳-۵) تعریف شده و ثابت‌های انتگرال‌گیری x_M و φ با شرایط آغازی تعیین می‌شوند. بنابراین ذره دارای حرکت نوسانی سینوسی پیرامون نقطه O با دامنه x_M و بسامد زاویه‌ای ω است.



شکل ۱-۵ انرژی پتانسیل $V(x)$ یک نوسانگر هماهنگ در فضای یک‌بعدی. دامنه یک حرکت کلاسیک با انرژی E عبارت است از x_M .

انرژی جنبشی ذره عبارت است از

$$T = \frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 = \frac{p^2}{2m} \quad (6-5)$$

که در آن $p = m dx/dt$ تکانه ذره است. بنابراین انرژی کل چنین است

$$E = T + V = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (7-5)$$

با جایگزینی پاسخ (5-5) در این رابطه، به دست می آید

$$E = \frac{1}{2} m \omega^2 x_M^2 \quad (8-5)$$

بنابراین، انرژی دستگاه مستقل از زمان است (که یکی از خواص دستگاههای پایستار است) و می تواند هر مقدار مثبت یا صفری را بپذیرد، زیرا x_M می تواند از پیش دلخواه باشد.

اگر انرژی کل E را ثابت نگه داریم، حدهای $x = \pm x_M$ حرکت کلاسیک را می توان از روی شکل ۱-۵، از محل برخورد سهمی با خط موازی محور Ox به عرض E ، تعیین کرد. در نقطه های $x = \pm x_M$ ، انرژی پتانسیل ماکزیموم و برابر با E و انرژی جنبشی صفر است. برعکس، در $x = 0$ انرژی پتانسیل صفر و انرژی جنبشی ماکزیموم است.

یادداشت:

پتانسیل غیر مشخص $V(x)$ را که در $x = x_0$ دارای مینیمومی است در نظر گیریم (شکل ۲-۵). تابع $V(x)$ را به سری تایلور بیرامون x_0 بسط می دهیم

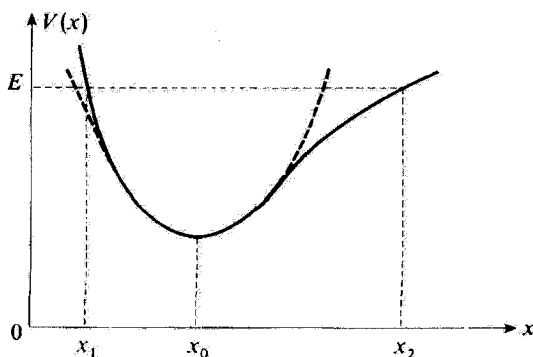
$$V(x) = a + b(x - x_0)^2 + c(x - x_0)^3 + \dots \quad (9-5)$$

ضریبهای این بسط عبارت اند از

$$a = V(x_0)$$

$$b = \frac{1}{2} \left(\frac{d^2 V}{dx^2} \right)_{x=x_0}$$

$$c = \frac{1}{3!} \left(\frac{d^3 V}{dx^3} \right)_{x=x_0} \quad (10-5)$$



شکل ۲-۵ در نزدیکی یک مینیموم، هر پتانسیل $V(x)$ را می‌توان با یک پتانسیل سهمی تقریب کرد (نقطه چین). در پتانسیل $V(x)$ یک ذره کلاسیک دارای انرژی E میان x_1 و x_2 نوسان می‌کند.

جمله خطی برحسب $(x - x_0)$ صفر است، زیرا x_0 با مینیمومی از $V(x)$ متناظر است. نیرویی که از پتانسیل $V(x)$ مشتق می‌شود در پیرامون x_0 چنین نوشته می‌شود

$$F_x = -\frac{dV}{dx} = -2b(x - x_0) - 3c(x - x_0)^2 + \dots \quad (11-5)$$

چون $V(x)$ در نقطه $x = x_0$ مینیموم دارد، ضریب b صفر است.

نقطه $x = x_0$ متناظر با یک وضع ترازمندی پایدار ذره است؛ در واقع F_x برای $x = x_0$ صفر است و به علاوه، برای $x - x_0$ به اندازه کافی کوچک، F_x و $(x - x_0)$ دارای علامت مختلف‌اند زیرا b مثبت است.

اگر دامنه حرکت ذره پیرامون x_0 آن قدر کوچک باشد که بتوان از جمله $(x - x_0)^2$ در رابطه (۹-۵) [و در نتیجه از جمله متناظر با آن برحسب $(x - x_0)^2$ در (۱۱-۵)] در برابر جمله‌های پیش از آن چشمپوشی کرد، با یک نوسانگر هماهنگ سروکار داریم زیرا در این صورت معادله دینامیک به طور تقریبی نوشته می‌شود

$$m \frac{d^2x}{dt^2} \simeq -2b(x - x_0) \quad (12-5)$$

بسامد زاویه‌ای ω متناظر، به مشتق دوم $V(x)$ در $x = x_0$ با فرمول

$$\omega = \sqrt{\frac{2b}{m}} = \sqrt{\frac{1}{m} \left(\frac{d^2V}{dx^2} \right)_{x=x_0}} \quad (13-5)$$

مرتبط می‌شود. چون دامنه نوسان باید کوچک بماند، انرژی نوسانگر هماهنگ ضعیف خواهد بود. برای انرژیهای E بیشتر، ذره میان نقاط انتهایی x_1 و x_2 (شکل ۲-۵) دارای یک حرکت دوره‌ای ولی غیرسینوسی است. اگر تابع $x(t)$ را که موضع ذره را می‌دهد به سری فوریه بسط دهیم، نه تنها یک جمله بلکه چندین جمله سینوسی، با بسامدهای مضارب یکدیگر، خواهیم یافت. در این هنگام گفته می‌شود که با یک نوسانگر ناهماهنگ سروکار داریم. وانگهی توجه کنید که در این مورد، دوره حرکت عموماً با $2\pi/\omega$ که ω با فرمول (۱۳-۵) داده می‌شود، متفاوت است. ■

۳-۱-۵ خواص عمومی هامیلتونی کوانتومی

در مکانیک کوانتومی کمیت‌های کلاسیک x و p به ترتیب به وسیله عملگرهای فیزیکی X و P که از برابری

$$[X, P] = i\hbar \quad (14-5)$$

پیروی می‌کنند، جانشین می‌شوند. بدین ترتیب، عملگر هامیلتونی دستگاه به آسانی از (۷-۵) به دست می‌آید

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 \quad (15-5)$$

چون H مستقل از زمان است (دستگاه پایستار)، مطالعه کوانتومی نوسانگر هماهنگ به حل معادله ویژه مقدری

$$H | \varphi \rangle = E | \varphi \rangle \quad (16-5)$$

می‌انجامد، که در نمایش $\{|x\rangle\}$ چنین نوشته می‌شود

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right] \varphi(x) = E \varphi(x) \quad (17-5)$$

پیش از پرداختن به بررسی تفصیلی معادله (۱۶-۵)، چند خاصیت مهم را که می‌توان از شکل (۱۱-۵) تابع پتانسیل به دست آورد، یادآوری می‌کنیم:

۱. ویژه مقدرهای هامیلتونی مثبت هستند. در واقع می‌توان به شیوه‌ای عمومی نشان داد (مکمل MIII فصل سوم) که اگر تابع پتانسیل $V(x)$ از پایین کراندار باشد، ویژه مقدرهای E

هامیلتونی $H = P^2/2m + V(X)$ بزرگتر از مینیموم $V(x)$ خواهند بود

$$E > V_m \quad \text{مستلزم} \quad V(x) \geq V_m \quad (18-5)$$

در مورد نوسانگر هماهنگ که در اینجا مورد نظر ماست، مبدأ انرژی چنان انتخاب شده است که V_m صفر باشد.

۲. ویژه‌تابعهای H دارای پاریته معینی هستند. این کیفیت بدین واقعیت مربوط است که $V(x)$ تابع زوجی است:

$$V(-x) = V(x) \quad (19-5)$$

در این صورت می‌توان (مکملهای F_{II} فصل دوم و ۳ همین فصل را ببینید) ویژه‌تابعهای H را در نمایش $\{|x\rangle\}$ از میان تابعهایی که دارای پاریته معینی هستند جستجو کرد (در واقع، دیده خواهد شد که ویژه‌مقدارهای H واگن نیستند و در نتیجه، تابع موجهای وابسته به حالت‌های مانا الزاماً یا زوج هستند یا فرد).

۳. طیف انرژی گسسته است. در واقع، انرژی کل هر چه باشد، حرکت کلاسیک ذره در یک ناحیه کراندار محور Ox انجام می‌گیرد (شکل ۱-۵) و می‌توان نشان داد (مکمل M_{III} فصل سوم) که در این مورد، ویژه‌مقدارهای هامیلتونی یک مجموعه گسسته تشکیل می‌دهند.

البته این خواص را (به شکل دقیقتری) در میان نتایج بخش آینده باز خواهیم یافت. با این همه جالب است گفته شود که این خواص را می‌توان با به‌کار بستن قضیه‌های عمومی مربوط به مسائل یک‌بعدی به نوسانگر هماهنگ، به‌سادگی به‌دست آورد.

۲-۵ ویژه‌مقدارهای هامیلتونی

اکنون معادله ویژه‌مقداری (۱۶-۵) را مطالعه می‌کنیم. قبل از همه، با به‌کار بردن تنها رابطه جابه‌جایی بندادی (۱۴-۵)، طیف هامیلتونی H را که به صورت (۱۵-۵) نوشته شده است، به‌دست می‌آوریم.

۱-۲-۵ نمادگذاریها

مطلب را با وارد کردن چند نمادگذاری، که سودمندی آنها بعد روشن خواهد شد، آغاز می‌کنیم.

الف) عملگر \hat{X} و \hat{P}

مشاهده‌پذیرهای X و P البته دارای بعد هستند (به ترتیب، بعد طول و بعد تکانه). چون ω دارای بعد عکس زمان و \hbar دارای بعد کنش (حاصلضرب انرژی در زمان) است، به آسانی می‌توان دید که عملگرهای \hat{X} و \hat{P} که به صورت

$$\begin{aligned}\hat{X} &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X \\ \hat{P} &= \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} P\end{aligned}\quad (20-5)$$

تعریف می‌شوند، بی‌بعد هستند.

اگر این عملگرهای جدید را به‌کار ببریم، رابطهٔ جابه‌جایی بندادی نوشته می‌شود

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i \quad (21-5)$$

و هامیلتونی می‌شود

$$H = \hbar\omega \hat{H} \quad (22-5)$$

با

$$\hat{H} = \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2) \quad (23-5)$$

بنابراین پاسخهای معادلهٔ ویژه‌مقداری

$$\hat{H} | \varphi_\nu^i \rangle = \varepsilon_\nu | \varphi_\nu^i \rangle \quad (24-5)$$

را که در آن عملگر \hat{H} و ویژه‌مقدارهای ε_ν بی‌بعد هستند، جستجو می‌کنیم. شاخص ν می‌تواند از پیش به مجموعه‌ای گسسته یا پیوسته متعلق باشد و شاخص بالایی i امکان می‌دهد تا احیاناً ویژه‌بردارهای گوناگون عمود بر هم مربوط به یک ویژه‌مقدار ε_ν را، از یکدیگر متمایز کنیم.

ب) عملگرهای a ، a^\dagger و N

اگر \hat{X} و \hat{P} عدد بودند نه عملگر، امکان داشت $\hat{X}^2 + \hat{P}^2$ را، که در عبارت (23-5) هامیلتونی دیده می‌شود، به شکل حاصلضربی از جمله‌های خطی به صورت $(\hat{X} - i\hat{P})(\hat{X} + i\hat{P})$

نوشت. در واقع، چون \hat{X} و \hat{P} عملگرهایی هستند که جابه‌جا نمی‌شوند، $\hat{X}^2 + \hat{P}^2$ برابر با $(\hat{X} - i\hat{P})(\hat{X} + i\hat{P})$ نیست. با این همه، نشان خواهیم داد که وارد کردن عملگرهایی متناسب با $\hat{X} + i\hat{P}$ و $\hat{X} - i\hat{P}$ امکان می‌دهد تا جستجوی ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای \hat{H} فوق‌العاده ساده شود.

بنابراین، چنین می‌گذاریم^۱

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P}) \quad (۵-۲۵الف)$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P}) \quad (۵-۲۵ب)$$

با معکوس کردن این فرمولها، فوراً به دست می‌آید

$$\hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a) \quad (۵-۲۶الف)$$

$$\hat{P} = \frac{i}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a) \quad (۵-۲۶ب)$$

در حالی که \hat{X} و \hat{P} هرمیتی هستند. a و a^\dagger (به سبب ضریب i) هرمیتی نیستند ولی الحاقی یکدیگرند.

جابه‌جاگر a و a^\dagger به سادگی از (۵-۲۵) و (۵-۲۱) محاسبه می‌شود

$$\begin{aligned} [a, a^\dagger] &= \frac{1}{2}[\hat{X} + i\hat{P}, \hat{X} - i\hat{P}] \\ &= \frac{i}{2}[\hat{P}, \hat{X}] - \frac{i}{2}[\hat{X}, \hat{P}] \end{aligned} \quad (۵-۲۷)$$

یعنی

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad (۵-۲۸)$$

این برابری کاملاً هم‌ارز رابطهٔ جابه‌جایی پندادی (۵-۱۴) است.

۱. تاکنون عملگرها را با حروف درشت نمایش داده‌ایم. با وجود این، برای هماهنگی با استعمال رایج، حروف ریز a و a^\dagger را برای عملگرهای (۵-۲۵) به‌کار خواهیم برد.

سرانجام چند فرمول ساده را که در دنباله این فصل سودمند خواهند بود به دست می آوریم. نخست $a^\dagger a$ را حساب کنیم

$$\begin{aligned} a^\dagger a &= \frac{1}{\sqrt{\hbar}}(\hat{X} - i\hat{P})(\hat{X} + i\hat{P}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\hbar}}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2 + i\hat{X}\hat{P} - i\hat{P}\hat{X}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\hbar}}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2 - \hbar) \end{aligned} \quad (29-5)$$

از مقایسه با عبارت (۲۳-۵)، پیداست که

$$\hat{H} = a^\dagger a + \frac{1}{2} = \frac{1}{\sqrt{\hbar}}(\hat{X} - i\hat{P})(\hat{X} + i\hat{P}) + \frac{1}{2} \quad (30-5)$$

برخلاف مورد کلاسیک، \hat{H} را نمی توان به صورت حاصلضرب جمله های خطی درآورد. جابه جایی ناپذیری \hat{X} و \hat{P} منشأ جمله اضافی $\hbar/2$ است که در طرف دوم (۳۰-۵) دیده می شود. همچنین نشان داده می شود که

$$\hat{H} = aa^\dagger - \frac{1}{2} \quad (31-5)$$

اکنون عملگر N را چنین تعریف کنیم

$$N = a^\dagger a \quad (32-5)$$

این عملگر هرمیتی است، زیرا

$$N^\dagger = a^\dagger (a^\dagger)^\dagger = a^\dagger a = N \quad (33-5)$$

به علاوه، بنابر (۳۰-۵) داریم

$$\hat{H} = N + \frac{1}{2} \quad (34-5)$$

در نتیجه، ویژه بردارهای \hat{H} ویژه بردارهای N هستند و برعکس.

سرانجام جابه‌جاگرهای N با a و a^\dagger را محاسبه می‌کنیم

$$\begin{aligned} [N, a] &= [a^\dagger a, a] = a^\dagger [a, a] + [a^\dagger, a] a = -a \\ [N, a^\dagger] &= [a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger [a, a^\dagger] + [a^\dagger, a^\dagger] a = a^\dagger \end{aligned} \quad (۳۵-۵)$$

یعنی

$$\begin{aligned} [N, a] &= -a & (۳۶-۵ \text{ الف}) \\ [N, a^\dagger] &= a^\dagger & (۳۶-۵ \text{ ب}) \end{aligned}$$

بررسی نوسانگر هماهنگ که ارائه خواهیم داد، بر پایه کاربرد عملگرهای a ، a^\dagger و N استوار است. در اینجا به‌گونه‌ای معادله ویژه‌مقداری H را که نخست به شکل (۲۴-۵) نوشتیم، با معادله ویژه‌مقداری N جایگزین کرده‌ایم

$$N | \varphi_\nu^\pm \rangle = \nu | \varphi_\nu^\pm \rangle \quad (۳۷-۵)$$

هنگامی که این معادله حل شود، خواهیم دانست که ویژه‌بردار $| \varphi_\nu^\pm \rangle$ از N نیز یک ویژه‌بردار H با ویژه‌مقدار $E_\nu = (\nu + 1/2)\hbar\omega$ است [فرمولهای (۲۲-۵) و (۳۴-۵)]:

$$H | \varphi_\nu^\pm \rangle = (\nu + 1/2)\hbar\omega | \varphi_\nu^\pm \rangle \quad (۳۸-۵)$$

حل معادله (۳۷-۵) بر پایه رابطه جابه‌جایی (۲۸-۵)، که هم‌ارز رابطه آغازی (۳۳-۵) است و بر پایه فرمولهای (۳۶-۵) که پیامدهایی از آن هستند، استوار خواهد بود.

۲-۲-۵ تعیین طیف

الف) لها

۱. لم یکم (خاصیت ویژه‌مقدارهای N)

ویژه‌مقدارهای ν از عملگر N مثبت یا صفرند.

ویژه‌بردار $| \varphi_\nu^\pm \rangle$ دلخواهی از N را در نظر می‌گیریم و بنویسیم که مربع هنجار بردار $| \varphi_\nu^\pm \rangle$ مثبت یا صفر است

$$\| a | \varphi_\nu^\pm \rangle \|^2 = \langle \varphi_\nu^\pm | a^\dagger a | \varphi_\nu^\pm \rangle \geq 0 \quad (۳۹-۵)$$

اکنون تعریف (۳۲-۵) از N را به کار ببریم

$$\langle \varphi_\nu^{\pm} | a^{\dagger} a | \varphi_\nu^{\pm} \rangle = \langle \varphi_\nu^{\pm} | N | \varphi_\nu^{\pm} \rangle = \nu \langle \varphi_\nu^{\pm} | \varphi_\nu^{\pm} \rangle \quad (۴۰-۵)$$

چون $\langle \varphi_\nu^{\pm} | \varphi_\nu^{\pm} \rangle$ مثبت است، مقایسه (۳۹-۵) با (۴۰-۵) نشان می‌دهد که

$$\nu \geq 0 \quad (۴۱-۵)$$

۲. لم دوم (خاصیت بردار $(a | \varphi_\nu^{\pm})$)

فرض کنید $(\varphi_\nu^{\pm} | \varphi_\nu^{\pm})$ یک ویژه بردار (غیر صفر) N با ویژه مقدار ν است. می‌خواهیم موارد زیر را اثبات کنیم:

(الف) اگر $\nu = 0$ باشد، کیت $(\varphi_0^{\pm} | a | \varphi_0^{\pm})$ صفر است.

(ب) اگر $\nu > 0$ باشد، کیت $(\varphi_\nu^{\pm} | a | \varphi_\nu^{\pm})$ ویژه بردار غیر صفری از N با ویژه مقدار $\nu - 1$ است.

(الف) بنابر (۴۰-۵)، توان دوم هنجار $(\varphi_\nu^{\pm} | a | \varphi_\nu^{\pm})$ در صورتی صفر است که $\nu = 0$ باشد. به علاوه هنجار یک بردار هنگامی صفر است که تنها و تنها آن بردار صفر باشد. در نتیجه، اگر $\nu = 0$ ویژه مقدار N باشد، همه ویژه بردارهای $(\varphi_0^{\pm} | \varphi_0^{\pm})$ وابسته به این ویژه مقدار از رابطه زیر پیروی می‌کنند

$$a | \varphi_0^{\pm} \rangle = 0 \quad (۴۲-۵)$$

وانگهی می‌توان نشان داد که برابری (۴۲-۵) مشخصه این ویژه بردارهاست. در واقع، بردار

$(\varphi | \varphi)$ را که از

$$a | \varphi \rangle = 0 \quad (۴۳-۵)$$

پیروی می‌کند در نظر بگیریم. دو طرف این معادله را از چپ در a^{\dagger} ضرب کنیم

$$a^{\dagger} a | \varphi \rangle = N | \varphi \rangle = 0 \quad (۴۴-۵)$$

بنابراین، هر برداری که از (۴۳-۵) پیروی کند، یک ویژه بردار از N با ویژه مقدار $\nu = 0$ است.

(ب) اکنون فرض کنیم که ν بی‌چون و چرا مثبت است. بنابر (۴۰-۵)، بردار $(\varphi_\nu^{\pm} | a | \varphi_\nu^{\pm})$ در این صورت غیر صفر خواهد بود. زیرا توان دوم هنجار آن غیر صفر است.

حال نشان دهیم که $a | \varphi_\nu^i \rangle$ ویژه‌بردار N است. برای این کار، برابری عملگری (۵-۳۶ الف) را به بردار $| \varphi_\nu^i \rangle$ اعمال کنیم

$$\begin{aligned} [N, a] | \varphi_\nu^i \rangle &= -a | \varphi_\nu^i \rangle \\ Na | \varphi_\nu^i \rangle &= aN | \varphi_\nu^i \rangle - a | \varphi_\nu^i \rangle \\ &= a\nu | \varphi_\nu^i \rangle - a | \varphi_\nu^i \rangle \end{aligned} \quad (۴۵-۵)$$

بنابراین

$$N[a | \varphi_\nu^i \rangle] = (\nu - 1)[a | \varphi_\nu^i \rangle] \quad (۴۶-۵)$$

این رابطه نشان می‌دهد که $a | \varphi_\nu^i \rangle$ ویژه‌بردار N با ویژه‌مقدار $\nu - 1$ است.

۳. لم سوم (خواص بردار $| \varphi_\nu^i \rangle$)
فرض کنید $| \varphi_\nu^i \rangle$ یک ویژه‌بردار (غیرصفر) N با ویژه‌مقدار ν باشد. می‌خواهیم ثابت کنیم:
الف) $\langle \varphi_\nu^i | a^\dagger | \varphi_\nu^i \rangle$ همیشه غیرصفر است.
ب) $\langle \varphi_\nu^i | a^\dagger | \varphi_\nu^i \rangle$ ویژه‌بردار N با ویژه‌مقدار $\nu + 1$ است.
الف) به‌سادگی می‌توان هنجار بردار $| \varphi_\nu^i \rangle$ را با به‌کار بردن فرمولهای (۵-۲۸) و (۵-۳۲) به‌دست آورد

$$\begin{aligned} \| a^\dagger | \varphi_\nu^i \rangle \|^2 &= \langle \varphi_\nu^i | aa^\dagger | \varphi_\nu^i \rangle \\ &= \langle \varphi_\nu^i | (N + 1) | \varphi_\nu^i \rangle \\ &= (\nu + 1) \langle \varphi_\nu^i | \varphi_\nu^i \rangle \end{aligned} \quad (۴۷-۵)$$

چون، بنابر لم یکم، ν مثبت یا صفر است، کت $a^\dagger | \varphi_\nu^i \rangle$ همیشه دارای یک هنجار غیرصفر است و در نتیجه هیچ‌گاه صفر نیست.

ب) اثبات اینکه $a^\dagger | \varphi_\nu^i \rangle$ ویژه‌بردار N است همانند اثبات آن در لم دوم می‌باشد. کافی است از برابری (۵-۳۶ ب) میان عملگرها آغاز کنیم، که می‌دهد

$$\begin{aligned} [N, a^\dagger] | \varphi_\nu^i \rangle &= a^\dagger | \varphi_\nu^i \rangle \\ Na^\dagger | \varphi_\nu^i \rangle &= a^\dagger N | \varphi_\nu^i \rangle + a^\dagger | \varphi_\nu^i \rangle = (\nu + 1)a^\dagger | \varphi_\nu^i \rangle \end{aligned} \quad (۴۸-۵)$$

ب) طیف N از اعداد درست غیرمنفی (یا صفر) تشکیل شده است

یک ویژه مقدار ν دلخواه N و یک ویژه بردار (φ_ν^i) غیرصفر وابسته به این ویژه مقدار را در نظر بگیریم. بنابر لم یکم، ν الزاماً مثبت یا صفر است. نخست فرض کنیم که ν عدد غیردرست است. نشان خواهیم داد که این چنین فرضی با لم یکم در تناقض است و در نتیجه باید آن را کنار گذاشت. در واقع، اگر ν غیردرست باشد، همیشه می توان یک عدد درست $n \geq 0$ را چنان یافت که

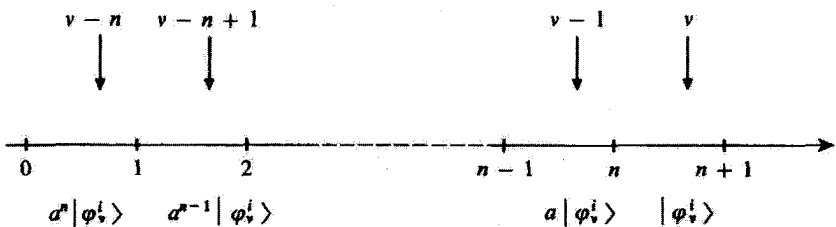
$$n < \nu < n + 1 \quad (49-5)$$

در این صورت دنباله بردارهای

$$(\varphi_\nu^i), a | \varphi_\nu^i \rangle \cdots a^n | \varphi_\nu^i \rangle \quad (50-5)$$

را در نظر بگیریم. بنابر لم دوم، هر یک از بردارهای $(\varphi_\nu^i | a^p | \varphi_\nu^i \rangle)$ (با $0 \leq p \leq n$) این دنباله غیرصفر است و یک ویژه بردار N با ویژه مقدار $\nu - p$ می باشد (شکل ۳-۵). اثبات گام به گام انجام می شود: $(\varphi_\nu^i | \varphi_\nu^i \rangle)$ بنابر فرض غیرصفر است، $a | \varphi_\nu^i \rangle$ غیرصفر است (زیرا $\nu > 0$) و متناظر با ویژه مقدار $\nu - 1$ است. \dots ، $a^p | \varphi_\nu^i \rangle$ ، با اعمال a روی $(\varphi_\nu^i | a^{p-1} | \varphi_\nu^i \rangle)$ که ویژه بردار N با ویژه مقدار $\nu - p + 1$ است، به دست می آید. ویژه مقدار اخیر اکیداً مثبت است، زیرا $p \leq n$ و $\nu > n$ است [فرمول (۴۹-۵)].

اکنون a را بر کیت $(\varphi_\nu^i | a^n | \varphi_\nu^i \rangle)$ اثر می دهیم. چون بنابر (۴۹-۵)، $\nu - n > 0$ است، عمل a بر روی $(\varphi_\nu^i | a^n | \varphi_\nu^i \rangle)$ (ویژه بردار N با ویژه مقدار $\nu - n > 0$)، یک بردار غیرصفر می دهد (لم دوم). به علاوه، همچنین بنابر لم دوم، $a^{n+1} | \varphi_\nu^i \rangle$ ویژه بردار N با ویژه مقدار $\nu - n - 1$ است که بنابر (۴۹-۵) اکیداً منفی است. بنابراین اگر ν غیردرست باشد، می توان ویژه بردار غیرصفری



شکل ۳-۵ با چند بار اثر دادن عملگر a روی کیت $(\varphi_\nu^i | \varphi_\nu^i \rangle)$ ، می توانیم ویژه بردارهای N با ویژه مقدارهای $\nu - 1$ و $\nu - 2$ و غیره را بسازیم.

از N با ویژه‌مقداری اکیداً منفی ساخت. چون این موضوع بنا بر لم یکم غیرممکن است، فرض غیردرست بودن ν را باید کنار گذاشت. اکنون ببینیم چه خواهد گذشت هرگاه داشته باشیم

$$\nu = n \quad (51-5)$$

که در آن n عدد درست مثبت یا صفر است. در دنباله بردارهای (ψ_n^i) ، $(\psi_n^i | \psi_n^i) = a^{2n}$ غیرصفر و ویژه‌بردار N با ارزش غیرصفر است. پس بنا بر لم دوم (بخش الف) داریم

$$a^{n+1} | \psi_n^i) = 0 \quad (52-5)$$

بنابراین، دنباله بردارهای به دست آمده از اثر مکرر a روی (ψ_n^i) هنگامی محدود است که n عدد درست مثبت باشد. در این صورت، هرگز نمی‌توان ویژه‌بردار غیرصفری از N را به دست آورد که با ویژه‌مقداری منفی متناظر باشد.

در نتیجه ν نمی‌تواند جز یک عدد درست غیرصفر n باشد.

سپس می‌توان لم سوم را به کار برد و نشان داد که طیف N واقعاً همه اعداد درست مثبت یا صفر را در برمی‌گیرد. در واقع، پیش از این ویژه‌برداری از N با ویژه‌مقدار صفر ساختیم $(\psi_n^i | \psi_n^i)$. کافی است $(a^\dagger)^k$ را بر یک چنین برداری اثر دهیم تا یک ویژه‌بردار N با ویژه‌مقدار k به دست آید که در آن k عدد درست مثبت دلخواهی است.

اکنون اگر به فرمول (5-38) بازگردیم، نتیجه می‌گیریم که ویژه‌مقدارهای H به شکل

$$E_n = \left(E + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad (53-5)$$

با $n = 0, 1, 2, \dots$ هستند. بنابراین، در مکانیک کوانتومی، انرژی نوسانگر هماهنگ کوانتومی است و نمی‌تواند هر اندازه دلخواهی را بپذیرد. افزون بر آن باید گوشزد کرد که کمترین مقدار انرژی ممکن (تراز پایه)، دیگر صفر نیست، بلکه برابر با $\hbar\omega/2$ است (بخش 5-4-2 زیر را ببینید).

ج) تعبیر عملگرهای a و a^\dagger

اگر از یک ویژه‌حالت (ψ_n^i) عملگر H متناظر با ویژه‌مقدار $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ آغاز کنیم، با اعمال عملگر a به یک ویژه‌بردار وابسته به ویژه‌مقدار $E_{n-1} = (n + 1/2)\hbar\omega - \hbar\omega$ می‌رسیم. اعمال a^\dagger به همین گونه، انرژی $E_{n+1} = (n + 1/2)\hbar\omega + \hbar\omega$ را به دست می‌دهد.

از این رو گویند که a یک عملگر نابودی و a^\dagger یک عملگر آفرینش است: در واقع، اثر آنها بر یک ویژه بردار N یک کوانتوم $\hbar\omega$ را ناپدید یا برعکس پدیدار می سازد.

۳-۲-۵ واگنی ویژه مقدارها

اکنون نشان خواهیم داد که ترازهای انرژی نوسانگر هماهنگ، یک بعدی که با معادله (۵۳-۵) داده شده اند، واگن نیستند.

الف) حالت پایه غیر واگن است

ویژه حالت های H وابسته به ویژه مقدار های $E_0 = \hbar\omega/2$ ، یعنی ویژه حالت های N وابسته به ویژه مقدار $n = 0$ ، باید همگی، بنابر لم دوم قسمت الف-۲ بخش ۲-۲-۵، از معادله

$$a | \varphi_0^i \rangle = 0 \quad (54-5)$$

پیروی کنند. برای یافتن واگنی تراز E_0 ، کافی است جستجو کنیم چند کیت به طور خطی مستقل وجود دارد که از (۵۴-۵) پیروی می کند.

با به کار بردن تعریف (۲۵-۵) الف) برای عملگر a و رابطه (۲۰-۵)، می توان (۵۴-۵) را به شکل زیر نوشت

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X + \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} P \right] | \varphi_0^i \rangle = 0 \quad (55-5)$$

در نمایش $\{ | x \rangle \}$ این برابری چنین می شود

$$\left(\frac{m\omega}{\hbar} x + \frac{d}{dx} \right) \varphi_0^i(x) = 0 \quad (56-5)$$

که در آن

$$\varphi_0^i(x) = \langle x | \varphi_0^i \rangle \quad (57-5)$$

بنابراین، باید یک معادله دیفرانسیل مرتبه نخست را حل کنیم. پاسخ عمومی آن عبارت است از

$$\varphi_0^i(x) = c e^{-(\sqrt{1/2})(m\omega/\hbar)x^2} \quad (58-5)$$

c ثابت انتگرال‌گیری است. دیده می‌شود که پاسخهای مختلف (۵-۵۶) همگی با یکدیگر متناسب‌اند. بنابراین، با تقریب یک ضریب، تنها یک کت (φ_0) وجود دارد که از (۵-۵۴) پیروی می‌کند: تراز پایه $E_0 = \hbar\omega/2$ واگن نیست.

ب) همه ترازها غیرواگن هستند

کمی پیش دیدیم که حالت پایه واگن نیست. به روش بازگشتی نشان می‌دهیم که برای همه ترازهای دیگر نیز وضع به همین گونه است.

برای این کار کافی است ثابت کنیم که اگر تراز $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ واگن نباشد، تراز $E_{n+1} = (n + 1 + 1/2)\hbar\omega$ نیز چنین نیست. بنابراین، فرض کنیم که، با تقریب یک ضریب، تنها یک (φ_n) به‌گونه‌ای وجود دارد که

$$N|\varphi_n\rangle = n|\varphi_n\rangle \quad (5-59)$$

در این هنگام، یک ویژه‌بردار (φ_{n+1}^i) متناظر با ویژه‌مقدار $n + 1$ در نظر می‌گیریم

$$N|\varphi_{n+1}^i\rangle = (n + 1)|\varphi_{n+1}^i\rangle \quad (5-60)$$

می‌دانیم که کت (φ_{n+1}^i) صفر نیست و ویژه‌بردار N با ویژه‌مقدار n است (لم دوم). چون این کت بنابه فرض واگن نیست، یک عدد c^i به‌گونه‌ای وجود دارد که

$$a|\varphi_{n+1}^i\rangle = c^i|\varphi_n\rangle \quad (5-61)$$

به‌آسانی می‌توان این معادله را، با اعمال a^\dagger به هر دو طرف آن، معکوس کرد

$$a^\dagger a|\varphi_{n+1}^i\rangle = c^i a^\dagger|\varphi_n\rangle \quad (5-62)$$

یعنی با در نظر گرفتن (۵-۳۲) و (۵-۶۰)، داریم

$$|\varphi_{n+1}^i\rangle = \frac{c^i}{n+1} a^\dagger|\varphi_n\rangle \quad (5-63)$$

از پیش می‌دانستیم که $a^\dagger|\varphi_n\rangle$ یک ویژه‌بردار N با ویژه‌مقدار $(n + 1)$ است. در اینجا می‌بینیم که همهٔ کتهای (φ_{n+1}^i) وابسته به ویژه‌مقدار $(n + 1)$ با $a^\dagger|\varphi_n\rangle$ متناسب‌اند. پس این بردارها با هم نیز متناسب‌اند. ویژه‌مقدار $(n + 1)$ واگن نیست.

بنابراین، چون ویژه مقدار $n = 0$ واگن نیست (بخش الف)، نه ویژه مقدار $n = 1$ واگن است، نه ویژه مقدار $n = 2$ و غیره: همه ویژه مقدارهای N و در نتیجه همه ویژه مقدارهای H ، غیر واگن اند. این به ما امکان می دهد تا $\langle \varphi_n |$ را ویژه بردار H وابسته به ویژه مقدار $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ بنویسیم.

۳-۵ ویژه حالت های هامیلتونی

در این بخش، خواص اصلی ویژه حالت های عملگر N و هامیلتونی H را مطالعه خواهیم کرد.

۱-۳-۵ نمایش $\{|\varphi_n\rangle\}$

می پذیریم که N و H مشاهده پذیر هستند. یعنی دستگاه ویژه بردارهای آنها در فضای \mathcal{E}_x ، فضای حالت های یک ذره در یک مسئله یک بعدی، یک پایه تشکیل می دهد (این واقعیت را می توان با مطالعه تابع موج های وابسته به ویژه حالت های N نشان داد، که در بخش ۲-۳-۵ محاسبه خواهیم کرد). چون هیچ یک از ویژه مقدار های N (یا H) واگن نیست (بخش ۳-۲-۵)، N (یا H) به تنهایی یک مجموعه کامل مشاهده پذیر جابه جایی پذیر در \mathcal{E}_x تشکیل می دهد.

الف) عبارت بردار های پایه بر حسب $\langle \varphi_0 |$

بردار $\langle \varphi |$ وابسته به $n = 0$ برداری از \mathcal{E}_x است که از رابطه

$$a|\varphi_0\rangle = 0 \quad (64-5)$$

پیروی می کند. این بردار با تقریب یک ضریب تعیین می شود. فرض می کنیم $\langle \varphi_0 |$ بهنجار شده است. این فرض نامشخص بودن را به یک ضریب کلی به شکل $e^{i\theta}$ ، با θ حقیقی، کاهش می دهد. بنابر لم سوم بخش ۲-۲-۵ الف، بردار $\langle \varphi_1 |$ متناظر با $n = 1$ با $a^\dagger |\varphi_0\rangle$ متناسب است

$$|\varphi_1\rangle = c_1 a^\dagger |\varphi_0\rangle \quad (65-5)$$

c_1 را چنان تعیین می کنیم که $\langle \varphi_1 |$ بهنجار شده باشد و فاز آن را (نسبت به $\langle \varphi_0 |$) چنان برمی گزینیم که c_1 حقیقی و مثبت باشد. توان دوم $\langle \varphi_1 |$ ، بنابر (۶۵-۵)، عبارت است از

$$\begin{aligned} \langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle &= |c_1|^2 \langle \varphi_0 | a a^\dagger | \varphi_0 \rangle \\ &= |c_1|^2 \langle \varphi_0 | (a^\dagger a + 1) | \varphi_0 \rangle \end{aligned} \quad (66-5)$$

که در آن (۲۸-۵) مورد استفاده قرار گرفته است. چون $|\varphi_0\rangle$ ویژه‌حالت بهنجار شده $N = a^\dagger a$ با ویژه‌مقدار صفر است، خواهیم یافت

$$\langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle = |c_1|^2 = 1 \quad (۶۷-۵)$$

با قرارداد فاز قبلی، داریم $c_1 = 1$ و در نتیجه

$$|\varphi_1\rangle = a^\dagger |\varphi_0\rangle \quad (۶۸-۵)$$

همچنین می‌توان $|\varphi_2\rangle$ را از $|\varphi_1\rangle$ ساخت

$$|\varphi_2\rangle = c_2 a^\dagger |\varphi_1\rangle \quad (۶۹-۵)$$

می‌خواهیم که $|\varphi_2\rangle$ بهنجار شده باشد و فاز آن را چنان برمی‌گزینیم که c_2 حقیقی و مثبت باشد

$$\begin{aligned} \langle \varphi_2 | \varphi_2 \rangle &= |c_2|^2 \langle \varphi_1 | a a^\dagger | \varphi_1 \rangle \\ &= |c_2|^2 \langle \varphi_1 | (a^\dagger a + 1) | \varphi_1 \rangle \\ &= 2 |c_2|^2 = 1 \end{aligned} \quad (۷۰-۵)$$

بنابراین، اگر (۶۸-۵) را به حساب آوریم، داریم

$$|\varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} a^\dagger |\varphi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (a^\dagger)^2 |\varphi_0\rangle \quad (۷۱-۵)$$

این روش به آسانی تعمیم داده می‌شود. اگر $|\varphi_{n-1}\rangle$ (بهنجار شده) را بشناسیم، بردار بهنجار شده $|\varphi_n\rangle$ نوشته می‌شود

$$|\varphi_n\rangle = c_n a^\dagger |\varphi_{n-1}\rangle \quad (۷۲-۵)$$

چون

$$\begin{aligned} \langle \varphi_n | \varphi_n \rangle &= |c_n|^2 \langle \varphi_{n-1} | a a^\dagger | \varphi_{n-1} \rangle \\ &= n |c_n|^2 = 1 \end{aligned} \quad (۷۳-۵)$$

با همان قراردادهای فازی پیشین، می‌گیریم

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{n}} \quad (۷۴-۵)$$

با این گزینشهای پایایی فازها، همه بردارهای $|\varphi_n\rangle$ را می‌توان از $|\varphi_0\rangle$ به دست آورد

$$\begin{aligned} |\varphi_n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n}} a^\dagger |\varphi_{n-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \frac{1}{\sqrt{n-1}} (a^\dagger)^2 |\varphi_{n-2}\rangle = \dots \\ &= \frac{1}{\sqrt{n}} \frac{1}{\sqrt{n-1}} \dots \frac{1}{\sqrt{2}} (a^\dagger)^n |\varphi_0\rangle \end{aligned} \quad (۷۵-۵)$$

یا

$$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |\varphi_0\rangle \quad (۷۶-۵)$$

(ب) رابطه‌های راست‌هنجاری و بستاری

چون H هرمیتی است، کتهای $|\varphi_n\rangle$ متناظر با مقادیر متفاوت n متعامد هستند. افزون بر این، چون هر یک از این کتها بهنجار شده است، از رابطه راست‌هنجاری زیر پیروی می‌کنند

$$\langle \varphi_{n'} | \varphi_n \rangle = \delta_{nn'} \quad (۷۷-۵)$$

از سوی دیگر، H یک مشاهده‌پذیر است (که ما در اینجا آن را بی‌اثبات می‌پذیریم). بنابراین، مجموعه $|\varphi_n\rangle$ یک پایه در \mathcal{E}_x می‌سازند که با رابطه بستاری زیر بیان می‌شود

$$\sum_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| = 1 \quad (۷۸-۵)$$

یادداشت:

از عبارت (۷۶-۵) می‌توان مستقیماً تحقیق کرد که کتهای $|\varphi_n\rangle$ راست‌هنجار هستند

$$\langle \varphi_{n'} | \varphi_n \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!n'}} \langle \varphi_0 | a^{n'} a^{\dagger n} | \varphi_0 \rangle \quad (۷۹-۵)$$

$$\begin{aligned}
 a^{n'} a^{\dagger n} | \varphi_0 \rangle &= a^{n'-1} (a a^\dagger) a^{\dagger n-1} | \varphi_0 \rangle \\
 &= a^{n'-1} (a^\dagger a + 1) a^{\dagger n-1} | \varphi_0 \rangle \\
 &= n a^{n'-1} a^{\dagger n-1} | \varphi_0 \rangle
 \end{aligned} \tag{۸۰-۵}$$

از این واقعیت که $| \varphi_0 \rangle a^{\dagger n-1}$ یک ویژه‌حالت $N = a^\dagger a$ با ویژه‌مقدار $n-1$ است، استفاده شده است. بدین ترتیب می‌توان نماهای a و a^\dagger را گام به گام کاهش داد. سرانجام به دست می‌آید

$$\begin{aligned}
 \text{اگر } n < n' : \langle \varphi_0 | a^{n'} a^{\dagger n} | \varphi_0 \rangle \\
 = n \times (n-1) \times \dots \times 2 \times 1 \langle \varphi_0 | a^{n'-n} | \varphi_0 \rangle
 \end{aligned} \tag{۸۱-الف}$$

$$\begin{aligned}
 \text{اگر } n > n' : \langle \varphi_0 | a^{n'} a^{\dagger n} | \varphi_0 \rangle \\
 = n \times (n-1) \dots (n-n'+1) \langle \varphi_0 | (a^\dagger)^{n-n'} | \varphi_0 \rangle
 \end{aligned} \tag{۸۱-ب}$$

$$\text{اگر } n = n' : \langle \varphi_0 | a^{n'} a^{\dagger n} | \varphi_0 \rangle = n \times (n-1) \times \dots \times 2 \times 1 \langle \varphi_0 | \varphi_0 \rangle \tag{۸۱-ج}$$

عبارت (۵۱-الف) صفر است، زیرا $\langle \varphi_0 | a = 0$. همچنین (۵۱-ب) صفر است، زیرا $\langle \varphi_0 | a^{n-n'} | \varphi_0 \rangle$ را می‌توان حاصلضرب برداری $\langle \varphi_0 |$ در برای وابسته به $a^{n-n'}$ دانست که هرگاه $n > n'$ باشد صفر است. سرانجام، اگر (۵۱-ج) در (۷۹-۵) برده شود می‌بینیم که $\langle \varphi_n | \varphi_n \rangle$ برابر است با یک. ■

ج) کنش عملگرهای گوناگون

مشاهده‌پذیر X و P ترکیبهای خطی عملگرهای a و a^\dagger هستند [رابطه‌های (۲۰-۵) و (۲۶-۵)]. در نتیجه، همه کمیت‌های فیزیکی را می‌توان به صورت تابعی از a و a^\dagger بیان کرد. اکنون می‌دانیم (و در زیر روشن خواهیم کرد) که کنش a و a^\dagger بر بردار $| \varphi_n \rangle$ به ویژه ساده است. در بیشتر موارد، بهتر است نمایش $\{ | \varphi_n \rangle \}$ برای محاسبه اجزای ماتریس و اندازه‌های میانگین مشاهده‌پذیرهای گوناگون به کار رود.

با قرارداد فازی که در قسمت الف وارد شد، کنش عملگر a و a^\dagger بر بردارهای پایه $\{ | \varphi_n \rangle \}$ می‌شود

$$a^\dagger | \varphi_n \rangle = \sqrt{n+1} | \varphi_{n+1} \rangle \tag{۸۲-الف}$$

$$a | \varphi_n \rangle = \sqrt{n} | \varphi_{n-1} \rangle \tag{۸۲-ب}$$

پیش از این (۵-۵۲الف) را ثابت کردیم: کافی است در معادله‌های (۵-۷۲) و (۵-۷۴)، $n+1$ به جای n گذارده شود. برای به دست آوردن (۵-۵۲ب)، دو طرف (۵-۷۲) را از چپ در a ضرب می‌کنیم و با توجه به (۵-۵۷) خواهیم یافت

$$a | \varphi_n \rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} a a^\dagger | \varphi_{n-1} \rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} (a^\dagger a + 1) | \varphi_{n-1} \rangle = \sqrt{n} | \varphi_{n-1} \rangle \quad (۵-۸۳)$$

یادداشت:

معادله‌های الحاقی رابطه‌های (۵-۸۲الف) و (۵-۸۲ب) عبارت‌اند از

$$\langle \varphi_n | a = \sqrt{n+1} \langle \varphi_{n+1} | \quad (۵-۸۴الف)$$

$$\langle \varphi_n | a^\dagger = \sqrt{n} \langle \varphi_{n-1} | \quad (۵-۸۴ب)$$

توجه شود که a بسته به اینکه بر روی کیت $|\varphi_n\rangle$ یا برای $\langle \varphi_n|$ اثر کند اندازه n را یک واحد کم یا زیاد می‌کند. همچنین، a^\dagger بسته به اینکه بر روی کیت $|\varphi_n\rangle$ یا برای $\langle \varphi_n|$ عمل کند مقدار n را یک واحد زیاد یا کم می‌کند.

با شروع از (۵-۸۲) و با به کار بردن (۵-۲۰) و (۵-۲۶)، فوراً عبارت کیت‌های $X | \varphi_n\rangle$ و $P | \varphi_n\rangle$ به دست می‌آید

$$\begin{aligned} X | \varphi_n \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{1}{\sqrt{2}} (a^\dagger + a) | \varphi_n \rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[\sqrt{n+1} | \varphi_{n+1} \rangle + \sqrt{n} | \varphi_{n-1} \rangle \right] \quad (۵-۸۵الف) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P | \varphi_n \rangle &= \sqrt{m\hbar\omega} \frac{i}{\sqrt{2}} (a^\dagger - a) | \varphi_n \rangle \\ &= i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \left[\sqrt{n+1} | \varphi_{n+1} \rangle - \sqrt{n} | \varphi_{n-1} \rangle \right] \quad (۵-۸۵ب) \end{aligned}$$

بنابراین، اجزای ماتریس عملگرهای a ، a^\dagger ، X ، و P در نمایش $\{ | \varphi_n \rangle \}$ عبارت‌اند از

$$\langle \varphi_{n'} | a | \varphi_n \rangle = \sqrt{n} \delta_{n',n-1} \quad (الف-۵۸۶)$$

$$\langle \varphi_{n'} | a^\dagger | \varphi_n \rangle = \sqrt{n+1} \delta_{n',n+1} \quad (ب-۵۸۶)$$

$$\langle \varphi_{n'} | X | \varphi_n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[\sqrt{n+1} \delta_{n',n+1} + \sqrt{n} \delta_{n',n-1} \right] \quad (ج-۵۸۶)$$

$$\langle \varphi_{n'} | P | \varphi_n \rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \left[\sqrt{n+1} \delta_{n',n+1} - \sqrt{n} \delta_{n',n-1} \right] \quad (د-۵۸۶)$$

ماتریس‌های نمایش‌دهنده a و a^\dagger ، همان‌طور که از عبارتهای صریح آنها دیده می‌شود، به درستی هرمیتی و همیوخ یکدیگرند،

$$(a) = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \sqrt{n} \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \quad (الف-۵۸۷)$$

$$(a^\dagger) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{n+1} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \quad (ب-۵۸۷)$$

اما در مورد ماتریس‌های نمایش‌دهنده X و P ، هر دو هرمیتی هستند: ماتریس وابسته به X ، با تقریب یک ضریب، مجموع دو ماتریس پیشین است. ماتریس وابسته به P با تفاضل آنها متناسب است، ولی وجود ضریب i در (۵۸۷-ب) هرمیتی بودن آن را برقرار می‌کند. ■

۲-۳-۵ توابع موج وابسته به حالت‌های مانا

اکنون نمایش $\{|x\rangle\}$ را به کار می‌بریم و توابع $\langle x | \varphi_n \rangle = \varphi_n(x)$ را که در اینجا نماینده ویژه حالت‌های هامیلتونی هستند می‌نویسیم.

قبلاً تابع $\varphi_0(x)$ را که حالت پایه $(\varphi_0 |$ را نمایش می‌دهد تعیین کردیم (بخش ۳-۲-۵ الف)

$$\varphi_0(x) = \langle x | \varphi_0 \rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-(1/2)(m\omega/\hbar)x^2} \quad (۸۸-۵)$$

ثابتی که در جلوی تابع نمایشی دیده می‌شود، بهنجار بودن $\varphi_0(x)$ را تضمین می‌کند. برای به دست آوردن تابع‌های $\varphi_n(x)$ وابسته به دیگر حالت‌های مانای نوسانگر هماهنگ، آنچه احتیاج داریم استفاده از عبارت (۷۶-۵) برای کت $|\varphi_n\rangle$ و این واقعیت است که a^\dagger در نمایش $\{|x\rangle\}$ با عبارت زیر نشان داده شود

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right]$$

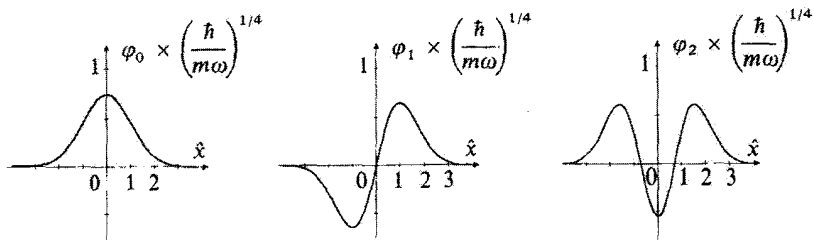
زیرا X با ضرب در x و P با $\hbar/i (d/dx)$ [رابطه (۲۵-۵) ب] نمایش داده می‌شود. بدینسان خواهیم یافت

$$\begin{aligned} \varphi_n(x) &= \langle x | \varphi_n \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle x | (a^\dagger)^n | \varphi_0 \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{\sqrt{2^n}} \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right]^n \varphi_0(x) \end{aligned} \quad (۸۹-۵)$$

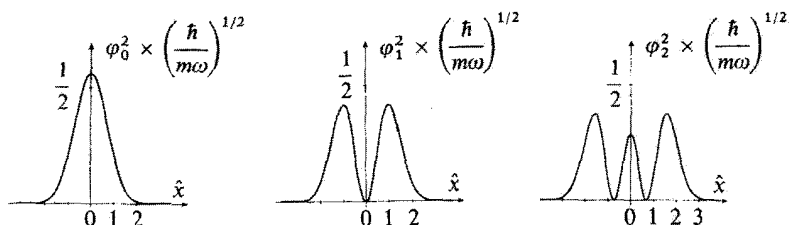
یعنی

$$\varphi_n(x) = \left[\frac{1}{2^n n!} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^n \right]^{1/2} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \left[\frac{m\omega}{\hbar} x - \frac{d}{dx} \right]^n e^{-(1/2)(m\omega/\hbar)x^2} \quad (۹۰-۵)$$

از این عبارت به آسانی پیداست که $\varphi_n(x)$ حاصل ضرب $e^{-(1/2)(m\omega/\hbar)x^2}$ در یک چندجمله‌ای درجه n با پارامتر $(-1)^n$ است، که چندجمله‌ای هرمیت نامیده می‌شود (مکمل‌های ۲ و ۳ همین فصل را ببینید).



شکل ۴-۵ توابع وابسته به سه تراز نخست نوسانگر هماهنگ.



شکل ۵-۵ چگالیهای احتمال وابسته به سه تراز نخست نوسانگر هماهنگ.

یک محاسبه ساده نخستین تابعهای $\varphi_n(x)$ را به دست می‌دهد

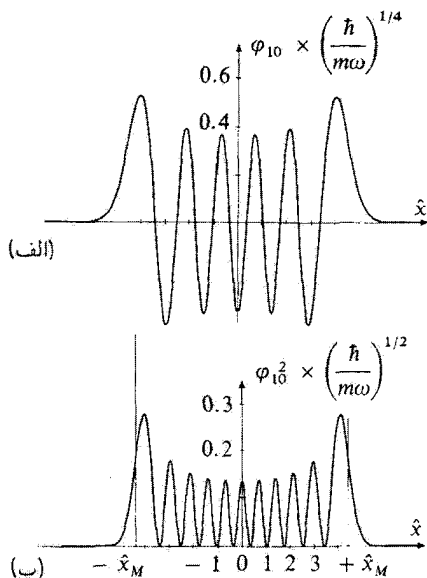
$$\varphi_0(x) = \left[\frac{\gamma}{\pi} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right) \right]^{1/4} x e^{-(\gamma/2)(m\omega/\hbar)x^2}$$

$$\varphi_1(x) = \left(\frac{m\omega}{4\pi\hbar} \right)^{1/4} \left[\gamma \frac{m\omega}{\hbar} x^2 - 1 \right] e^{-(\gamma/2)(m\omega/\hbar)x^2}$$

(۹۱-۵)

این تابعها در شکل ۴-۵ و چگالی احتمال مربوط به آنها در شکل ۵-۵ نشان داده شده است. شکل ۶-۵ روند تابع موج $\varphi_n(x)$ و چگالی احتمال $|\varphi_n(x)|^2$ را برای $n = 10$ به دست می‌دهد.

از این شکلها پیداست که وقتی n افزایش می‌یابد، ناحیه‌ای از محور Ox که $\varphi_n(x)$ در آن اندازه‌های قابل ملاحظه‌ای می‌پذیرد، بیش از پیش بزرگتر می‌شود. این متناظر با واقعیتی است که در مکانیک کلاسیک، دامنه حرکت ذره با افزایش انرژی زیاد می‌شود [شکل ۵-۱ و رابطه (۸-۵)]. در نتیجه اندازه میانگین انرژی پتانسیل همراه با n افزایش می‌یابد [یادداشت (۲) بخش ۵-۴-۱ را ببینید]، زیرا هنگامی که n بزرگ است، $\varphi_n(x)$ در ناحیه‌هایی از محور x ها که $V(x)$ بزرگ است



شکل ۶-۵ روند تابع موج (الف) و چگالی احتمال (ب) برای تراز $n = 10$ نوسانگر هماهنگ.

اندازه‌های چشمگیری می‌گیرد. افزون بر این، از این شکاها درمی‌یابیم که شمار صفرهای $\varphi_n(x)$ برابر است با n (مکمل ۲ همین فصل که این خاصیت در آنجا ثابت شده است) و پیامدش این است که انرژی جنبشی میانگین ذره با n افزایش می‌یابد [یادداشت (۲) بخش ۵-۴-۱ را ببینید]. در واقع، این انرژی به صورت زیر داده شده است

$$\frac{1}{2m} \langle P^2 \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n^*(x) \frac{d^2}{dx^2} \varphi_n(x) dx \quad (۹۲-۵)$$

هنگامی که تعداد صفرهای $\varphi_n(x)$ زیاد می‌شود، خمیدگی تابع موج افزایش می‌یابد و مشتق دوم $(d^2/dx^2)\varphi_n(x)$ در (۹۲-۵) مقدارهایی بیش از پیش بزرگ می‌گیرد.

سرانجام، هنگامی که n بزرگ است، درمی‌یابیم که (برای مثال شکل ۵-۶ را ببینید) چگالی احتمال $|\varphi_n(x)|^2$ برای $x \simeq \pm x_M$ بزرگ است [که در آن دامنه حرکت کلاسیک با انرژی E_M است؛ فرمول (۸-۵)]. این نتیجه مشخصه‌ای از حرکت را به یاد می‌آورد که مکانیک کلاسیک پیش‌بینی می‌کند: ذره کلاسیک در $x = \pm x_M$ دارای سرعت صفر است. و بنابراین به طور میانگین در نزدیکی این دو نقطه بیش از مرکز واقع در فاصله $-x_M \leq x \leq x_M$ ، وقت می‌گذراند.

۴-۵ بحث فیزیکی

۱-۴-۵ اندازه‌های میانگین و انحرافهای ریشه میانگین مربعی X و P در یک

حالت (φ_n)

هیچ‌کدام از X و P با H جابه‌جا نمی‌شوند و ویژه‌حالت‌های (φ_n) از هامیلتونی H ، ویژه‌حالت‌های X یا P نیستند. در نتیجه، اگر نوسانگر هماهنگ در یک حالت مانا (φ_n) باشد، یک اندازه‌گیری مشاهده‌پذیر X یا مشاهده‌پذیر P می‌تواند از پیش هر نتیجه‌ای را به دست دهد (زیرا طیف‌های X و P همه اعداد حقیقی را می‌پذیرند). در اینجا، اندازه‌های میانگین X و P و سپس انحرافهای ریشه میانگین مربعی ΔX و ΔP را در یک چنین حالت مانایی حساب می‌کنیم که به ما امکان می‌دهد تا رابطه عدم قطعیت را تحقیق کنیم.

چنانکه در بخش ۵-۳-۱-ج گفته شد، این محاسبات را به یاری عملگر a و a^\dagger انجام خواهیم داد. در مورد اندازه‌های میانگین X و P ، نتیجه فوراً از فرمول‌های (۸۵-۵) به دست می‌آید که نشان می‌دهند هیچ‌یک از X و P دارای اجزای ماتریس قطری نیستند

$$\langle \varphi_n | X | \varphi_n \rangle = 0$$

$$\langle \varphi_n | P | \varphi_n \rangle = 0 \quad (93-5)$$

برای به دست آوردن انحرافهای ریشه میانگین مربعی ΔX و ΔP ، باید اندازه‌های میانگین X^2 و P^2 را حساب کرد

$$(\Delta X)^2 = \langle \varphi_n | X^2 | \varphi_n \rangle - (\langle \varphi_n | X | \varphi_n \rangle)^2 = \langle \varphi_n | X^2 | \varphi_n \rangle$$

$$(\Delta P)^2 = \langle \varphi_n | P^2 | \varphi_n \rangle - (\langle \varphi_n | P | \varphi_n \rangle)^2 = \langle \varphi_n | P^2 | \varphi_n \rangle \quad (94-5)$$

بنابر (۲۰-۵) و (۲۶-۵)

$$\begin{aligned} X^2 &= \frac{\hbar}{2m\omega}(a^\dagger + a)(a^\dagger + a) \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}(a^{\dagger 2} + aa^\dagger + a^\dagger a + a^2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P^2 &= -\frac{m\hbar\omega}{2}(a^\dagger - a)(a^\dagger - a) \\ &= -\frac{m\hbar\omega}{2}(a^{\dagger 2} - aa^\dagger - a^\dagger a + a^2) \quad (95-5) \end{aligned}$$

عبارتهای دارای a^\dagger و a^\dagger در اجزای ماتریس قطری سهمی ندارند، زیرا $\langle \varphi_n | a^\dagger | \varphi_{n-2} \rangle$ و $\langle \varphi_n | a^\dagger | \varphi_{n+2} \rangle$ متناسباند و هر دو بر $\langle \varphi_n |$ عمود میباشند. برعکس

$$\begin{aligned} \langle \varphi_n | (a^\dagger a + a a^\dagger) | \varphi_n \rangle &= \langle \varphi_n | (2a^\dagger a + 1) | \varphi_n \rangle \\ &= 2n + 1 \end{aligned} \quad (۹۶-۵)$$

در نتیجه

$$(\Delta X)^2 = \langle \varphi_n | X^2 | \varphi_n \rangle = \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar}{m\omega} \quad (۹۷-۵ \text{ الف})$$

$$(\Delta P)^2 = \langle \varphi_n | P^2 | \varphi_n \rangle = \left(n + \frac{1}{2} \right) m\hbar\omega \quad (۹۷-۵ \text{ ب})$$

بنابراین، حاصلضرب $\Delta X \times \Delta P$ برابر است با

$$\Delta X \times \Delta P = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \quad (۹۸-۵)$$

به این نتیجه می‌رسیم که این حاصلضرب بزرگتر یا برابر با $\hbar/2$ است. (مکمل CIII). در واقع، این کرانه پایینی برای $n = 0$ ، یعنی در حالت پایه، حاصل می‌شود (قسمت ۲ یادداشت زیر).

یادداشتها:

۱. اگر x_M دامنه حرکت کلاسیک ذره‌ای، که انرژی آن $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ است، باشد، به آسانی با به کار بردن (۸-۵) و (۹۷-۵ الف) پیداست که

$$\Delta X = \frac{1}{\sqrt{2}} x_M \quad (۹۹-۵)$$

همچنین، اگر p_M نمایانگر دامنه نوسان تکانه کلاسیک متناظر

$$p_M = m\omega x_M \quad (۱۰۰-۵)$$

باشد خواهیم یافت

$$\Delta P = \frac{1}{\sqrt{2}} p_M \quad (۱۰۱-۵)$$

شگفت نیست که ΔX از مرتبهٔ بازه $[-x_M, +x_M]$ است که در آن حرکت کلاسیک انجام می‌گیرد، شکل (۱۰۵-۱). زیرا همچنان‌که در پایان بخش ۵-۳ دیدیم، تقریباً در این بازه است که نمی‌توان از اندازه‌های $\varphi_n(x)$ چشمپوشی کرد. از طرف دیگر، به آسانی می‌توان دریافت که چرا، هنگامی که n افزایش می‌یابد، ΔX زیاد می‌شود. در واقع، چگالی احتمال $|\varphi_n(x)|^2$ برای n بزرگ دارای دو قلهٔ متقارن تقریباً در $x = \pm x_M$ است. انحراف میانگین مربعی، در این صورت، نمی‌تواند از فاصلهٔ میان این دو قله خیلی کمتر باشد، حتی اگر هر یک از آنها بسیار تیز باشد (فصل سوم، بخش ۵-C و بحث ۱-b از مکمل A_{III}). استدلال مشابهی را می‌توان دربارهٔ ΔP به‌کار برد (مکمل ۴ از همین فصل).

۲. انرژی پتانسیل میانگین یک ذره در حالت (φ_n) عبارت است از

$$\langle V(X) \rangle = \frac{1}{\Psi} m \omega^2 \langle X^2 \rangle \quad (102-5)$$

یعنی، چون $\langle x \rangle$ صفر است [معادله (۹۳-۵)]

$$\langle V(X) \rangle = \frac{1}{\Psi} m \omega^2 (\Delta X)^2 \quad (103-5)$$

همچنین درمی‌یابیم که انرژی جنبشی میانگین این ذره برابر است با

$$\left\langle \frac{P^2}{2m} \right\rangle = \frac{1}{2m} (\Delta P)^2 \quad (104-5)$$

برابریهای (۹۷-۵) را در (۱۰۳-۵) و (۱۰۴-۵) می‌بریم، خواهیم یافت

$$\begin{aligned} \langle V(X) \rangle &= \frac{1}{\Psi} \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega = \frac{E_n}{\Psi} \\ \left\langle \frac{P^2}{2m} \right\rangle &= \frac{1}{\Psi} \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega = \frac{E_n}{\Psi} \end{aligned} \quad (105-5)$$

بنابراین میانگین انرژیهای پتانسیل و جنبشی برابرند. در اینجا قضیهٔ ویریا را در موردی ویژه بازمی‌یابیم (تمرین ۱۰ مکمل L_{III}).

۳. یک حالت مانای (φ_n) دارای هیچ هم‌ارزی در مکانیک کلاسیک نیست. در واقع انرژی آن صفر نیست در حالی‌که اندازه‌های میانگین $\langle X \rangle$ و $\langle P \rangle$ صفر هستند. با این همه، میان حالت (φ_n) و حالت یک ذرهٔ کلاسیک، که مکان آن با (۵-۵) داده می‌شود [در حالی‌که x_M با

رابطه (۸-۵) به انرژی E_n مربوط است، شباهتی وجود دارد اما فاز آغازی φ از حرکت، کتره‌ای انتخاب می‌شود (یعنی هر مقدار میان صفر و 2π را با احتمال یکسانی می‌پذیرد). در این صورت، اندازه‌های میانگین x و p واقعاً صفر هستند، زیرا

$$\begin{cases} \bar{x}_{cl} = x_M \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \cos(\omega t - \varphi) d\varphi = 0 \\ \bar{p}_{cl} = -p_M \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sin(\omega t - \varphi) d\varphi = 0 \end{cases} \quad (106-5)$$

افزون بر آن، برای انحرافهای ریشه مربعی میانگین مکان و تکانه، اندازه‌هایی همانند اندازه‌های حالت (φ_n) به دست می‌آیند [فرمولهای (۹۹-۵) و (۱۰۱-۵)]. در واقع

$$\begin{aligned} \bar{x}_{cl}^2 &= x_M^2 \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \cos^2(\omega t - \varphi) d\varphi = \frac{x_M^2}{2} \\ \bar{p}_{cl}^2 &= p_M^2 \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sin^2(\omega t - \varphi) d\varphi = \frac{p_M^2}{2} \end{aligned} \quad (107-5)$$

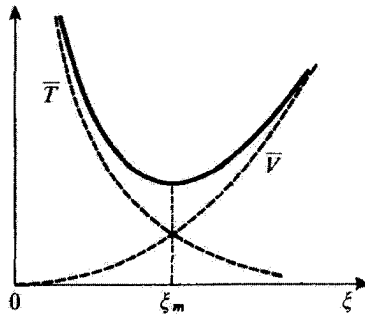
یعنی

$$\begin{aligned} \delta x_{cl} &= \sqrt{\bar{x}_{cl}^2 - (\bar{x}_{cl})^2} = \frac{x_M}{\sqrt{2}} \\ \delta p_{cl} &= \sqrt{\bar{p}_{cl}^2 - (\bar{p}_{cl})^2} = \frac{p_M}{\sqrt{2}} \end{aligned} \quad (108-5)$$

۵-۴-۲ خواص حالت پایه

کمترین انرژی نوسانگر هماهنگ در مکانیک کلاسیک هنگامی به دست می‌آید که ذره در مبدأ طولها (یعنی $x = 0$ و بنابراین انرژی پتانسیل صفر) بی حرکت (تکانه و انرژی جنبشی صفر) باشد. در مکانیک کوانتومی وضع کاملاً به گونه دیگری است: حالت با انرژی مینیموم (φ_0) است که انرژی آن صفر نیست و تابع موج وابسته دارای یک گسترش فضایی است که با انحراف میانگین مربعی $\Delta X = \sqrt{\hbar/2m\omega}$ مشخص می‌شود.

منبع این اختلاف اساسی میان نتایج مکانیک کوانتومی و مکانیک کلاسیک را می‌توان در رابطه‌های عدم قطعیت هایزنبرگ دانست که از مینیموم شدن همزمان انرژی جنبشی و انرژی پتانسیل جلوگیری می‌کند. حالت پایه، چنانکه در مکملهای C_{III} و M_{III} گفتیم، با سازشی متناظر است که بنابر آن مجموع این دو انرژی کمترین مقدار ممکن را دارد.



شکل ۷-۵ تغییرات انرژی پتانسیل \bar{V} و انرژی جنبشی \bar{T} برحسب پارامتر ξ که گستردگی فضایی تابع موج را پیرامون $x = 0$ مشخص می‌کند. چون پتانسیل هماهنگ در $x = 0$ مینیموم است، \bar{V} تابعی صعودی از ξ است ($\bar{V} \propto \xi^2$). برعکس، بنابر رابطه عدم قطعیت هایزنبرگ، انرژی جنبشی \bar{T} یک تابع نزولی از ξ است. کمترین مقدار انرژی کل که به ازای $\xi = \xi_m$ حاصل می‌شود، نتیجه سازشی است که برای آن مجموع $\bar{T} + \bar{V}$ مینیموم است.

در مورد ویژه از یک نوسانگر هماهنگ، این ملاحظات کیفی را می‌توان به‌طور نیمه کمی روشن کرد و بدین ترتیب حدود انرژی و گستردگی حالت پایه را به‌دست آورد. اگر مسافت ξ ، این گسترش فضایی را مشخص کند، انرژی پتانسیل میانگین در حدود

$$\bar{V} \simeq \frac{1}{2} m \omega^2 \xi^2 \quad (109-5)$$

خواهد بود. اما در این صورت ΔP در حدود \hbar/ξ است، به‌گونه‌ای که انرژی جنبشی میانگین تقریباً برابر است با

$$\bar{T} = \frac{\bar{p}^2}{2m} \simeq \frac{\hbar^2}{2m\xi^2} \quad (110-5)$$

بنابراین، حدود انرژی کل عبارت است از

$$\bar{E} = \bar{T} + \bar{V} \simeq \frac{\hbar^2}{2m\xi^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 \xi^2 \quad (111-5)$$

تغییر \bar{T} ، \bar{V} و \bar{E} برحسب ξ در شکل ۷-۵ نمایش داده شده است. برای اندازه‌های کوچک ξ ، \bar{V} در برابر \bar{T} ناچیز است و برای اندازه‌های بزرگ ξ وضع برعکس است. بنابراین، حالت پایه تقریباً با

مینیموم تابع (۵-۱۱۱) متناظر است. به آسانی پیداست که این مینیموم هنگامی دست می دهد که

$$\xi_m \simeq \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (۵-۱۱۲)$$

و برابر است با

$$\bar{E}_m \simeq \hbar\omega \quad (۵-۱۱۳)$$

به درستی مرتبه بزرگی E_0 و ΔX را در حالت $|\varphi_0\rangle$ باز می یابیم.

نوسانگر هماهنگ دارای این ویژگی است که، به سبب شکل پتانسیل $V(x)$ ، حاصلضرب $\Delta X \times \Delta P$ در حالت پایه $|\varphi_0\rangle$ ، درست به کرانه پایینی خود $\hbar/2$ (فرمول ۵-۹۸) می رسد. این بدان واقعیت وابسته است (مکمل CIII) که تابع موج حالت پایه یک تابع گاوسی است.

۵-۴-۳ تحول اندازه های میانگین در زمان

یک نوسانگر هماهنگ را که حالت آن در لحظه $t = 0$ به صورت

$$|\varphi(0)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(0) |\varphi_n\rangle \quad (۵-۱۱۴)$$

نوشته می شود در نظر بگیریم $|\psi(0)\rangle$ بهنجار فرض شده است). حالت $|\psi(t)\rangle$ نوسانگر را در لحظه t می توان به یاری دستور (۴-۵۴) فصل سوم به دست آورد

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n(0) e^{-iE_n t/\hbar} |\varphi_n\rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n(0) e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t} |\varphi_n\rangle \end{aligned} \quad (۵-۱۱۵)$$

بنابراین، اندازه میانگین یک کمیت فیزیکی دلخواه برحسب زمان می شود

$$\langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} c_m^*(0) c_n(0) A_{mn} e^{i(m-n)\omega t} \quad (۵-۱۱۶)$$

$$A_{mn} = \langle \varphi_m | A | \varphi_n \rangle \quad (117-5)$$

چون m و n اعداد درستی هستند، تحول زمانی اندازه‌های میانگین، تنها بسامد $\omega/2\pi$ و هماهنگی‌های گوناگون آن را دخالت می‌دهد که در نتیجه بسامدهای پورنوسانگر هماهنگ را تشکیل می‌دهند.

اکنون ویژه‌اندازه‌های میانگین مشاهده‌پذیرهای X و P را مطالعه کنیم. بنابر فرمول (۸۵-۵)، تنها اجزای غیرصفر ماتریس X_{mn} و P_{mn} آنهایی هستند که $m = n \pm 1$ باشد. در نتیجه، اندازه‌های میانگین X و P تنها جمله‌های برحسب $e^{\pm i\omega t}$ را در بردارند. بنابراین تابعی سینوسی از زمان با بسامد زاویه‌ای ω هستند. این، آشکارا حل کلاسیک مسئله نوسانگر هماهنگ را به یاد می‌آورد. وانگهی، همچنان‌که به‌هنگام بحث قضیه اهرنفتست [فصل سوم، بخش D-۱-d-۷] توجه داده شد، شکل پتانسیل نوسانگر هماهنگ سبب می‌شود که $\langle \psi |$ هرچه باشد، اندازه‌های میانگین X و P به‌دقت از معادله‌های حرکت کلاسیک پیروی می‌کنند. در واقع، بنابر فرمولهای عمومی (D-۳۴) و (D-۳۵) فصل سوم داریم

$$\frac{d}{dt} \langle X \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [X, H] \rangle = \frac{\langle P \rangle}{m} \quad (الف ۱۱۸-۵)$$

$$\frac{d}{dt} \langle P \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [P, H] \rangle = -m\omega^2 \langle X \rangle \quad (ب ۱۱۸-۵)$$

اگر از این معادلات انتگرال بگیریم، خواهیم یافت

$$\begin{aligned} \langle X \rangle(t) &= \langle X \rangle(\circ) \cos \omega t + \frac{1}{m\omega} \langle P \rangle(\circ) \sin \omega t \\ \langle P \rangle(t) &= \langle P \rangle(\circ) \cos \omega t - m\omega \langle X \rangle(\circ) \sin \omega t \end{aligned} \quad (119-5)$$

به‌درستی، شکل سینوسی داده شده با معادله (۱۱۶-۵) را باز می‌یابیم.

یادداشت:

باید توجه داشت که این همانندی با وضع کلاسیک تنها هنگامی پدید می‌آید که $\langle \psi(\circ) |$ برهم‌نهی از حالت‌های $|\varphi_n\rangle$ (از نوع (۱۱۴-۵)) باشد که در آن چند ضریب $c_n(\circ)$ غیرصفر هستند. اگر همه این ضریبها بجز یکی صفر باشند، نوسانگر در یک حالت مانا بوده و اندازه‌های میانگین همه مشاهده‌پذیرها نسبت به‌زمان ثابت‌اند.

از آنجا چنین برمی‌آید که، در یک حالت مانای (φ_n) ، رفتار یک نوسانگر هماهنگ، حتی اگر n بسیار بزرگ (حد اعداد کوانتومی بزرگ) باشد، به‌کلی از رفتاری که مکانیک کلاسیک پیش‌بینی می‌کند، متفاوت است. اگر بخواهیم بسته موجی بسازیم که مکان متوسط آن نسبت به زمان نوسان کند، الزاماً باید حالت‌های گوناگونی از (φ_n) را برهم نهمیم (مکمل ۷ همین فصل را ببینید). ■

مراجع برای مطالعه بیشتر

Dirac (1. 13), §34.

Messiah (1.17), chap. XII.

۱. مطالعه چند مثال فیزیکی از نوسانگرهای هماهنگ

۱. با چند مثال برگزیده در زمینه‌های گوناگون، اهمیت نوسانگر هماهنگ کوانتومی در فیزیک نشان داده می‌شود. مطالب این مکمل نیمه کتی و به اندازه کفایت ساده هستند و مطالعه آنها در نخستین دور توصیه می‌شود.

۲. مطالعه حالت‌های مانا در نمایش $\{| \alpha \rangle\}$. چندجمله‌ایهای هرمیت.

۲. مطالعه تکنیکی تابعهای موج مانای نوسانگر هماهنگ که به عنوان مرجع به کار می‌رود.

۳. حل معادله ویژه مقدار نوسانگر هماهنگ به روش چندجمله‌ای

۳. روش دیگری که با آن می‌توان نتایج فصل ۵ را باز یافت؛ رابطه میان کوانتس انرژی و رفتار تابع موج در بینهایت را نشان می‌دهد. مبحثی با دشواری متوسط.

۴. مطالعه حالت‌های مانا در نمایش $\{| p \rangle\}$

۴. نشان می‌دهد که، در یک حالت مانای نوسانگر هماهنگ، توزیع احتمال نکانه همانند توزیع احتمال مکان است، مبحث تا اندازه‌ای آسان است.

۵. نوسانگر هماهنگ همسانگرد سه بعدی

۵. تعمیم نتایج فصل ۵ به سه بعد، مطالعه این مبحث در نخستین دور، توصیه می‌شود، زیرا ساده و دارای اهمیت فیزیکی است.

۶. نوسانگر هماهنگ باردار در یک میدان الکتریکی یکنواخت

۶. کاربرد مستقیم و ساده نتایج فصل ۵ (بجز بخش ۳ که در آن عملگر انتقال که در مکمل E/II وارد شد، به کار می‌رود). مطالعه این مبحث در نخستین دور توصیه می‌شود.

۷. حالت‌های همدوس "شبه کلاسیک" نوسانگر هماهنگ

۷. بررسی تفصیلی حالت‌های "شبه کلاسیک" نوسانگر هماهنگ که امکان می‌دهد تا میان مکانیک کوانتومی و مکانیک کلاسیک ارتباطی برقرار شود. مبحثی مهم به سبب کاربردهای آن در نظریه کوانتومی تابش، دارای دشواری متوسط که می‌توان در نخستین دور از مطالعه آن چشم پوشید.

۸. مدهای طبیعی ارتعاشی دو نوسانگر هماهنگ جفتیده، از مدهای ویژه ارتعاش یک دستگاه مطالعه می‌شود. مطالعه این مبحث توصیه می‌شود، زیرا آسان و دارای اهمیت فیزیکی است.

۹. مدهای ارتعاشی یک زنجیره خطی نامحدود از نوسانگرهای هماهنگ جفتیده؛ فونونها ۹، ۱۰. وارد کردن مفهومی به ویژه مهم در فیزیک در چارچوب مدل‌های ساده شده. مبحثی به اندازه کافی مشکل (سطح فوق لیسانس) که می‌تواند برای مطالعه بعدی برگزیده شود.

۹. جستجوی مدهای ویژه ارتعاشی یک زنجیره خطی از نوسانگرهای جفتیده که به مفهوم فونون می‌انجامد و در فیزیک حالت جامد اساسی است. ۱۰. مطالعه مدهای ارتعاشی در مورد یک دستگاه پیوسته که امکان می‌دهد تا شیوه وارد شدن فوتون در بررسی کوانتومی میدان الکترومغناطیسی به سادگی فهمیده شود.

۱۱. نوسانگر هماهنگ یک بعدی در تراز مندی ترمودینامیکی در دمای T ۱۱. کاربرد عملگر چگالی (که در مکمل E_{III} وارد شده است) در مورد یک نوسانگر هماهنگ در تراز مندی ترمودینامیکی. مبحثی از دیدگاه فیزیکی مهم که به شناخت مکمل E_{III} نیاز دارد.

مکمل ۱

مطالعه چند مثال فیزیکی از نوسانگرهای هماهنگ

۱. ارتعاش هسته‌های یک مولکول دو اتمی

الف) انرژی برهم‌کنش میان دو اتم

ب) حرکت هسته‌ها

ج) مشاهدات تجربی ارتعاشهای هسته‌ای

۲. ارتعاش هسته‌ها در یک بلور

الف) مدل اینشتین

ب) طبیعت مکانیک کوانتومی ارتعاشهای بلورین

۳. نوسانات پیچشی یک مولکول: اتیلن

الف) ساختار مولکول اتیلن، C_2H_4

ب) معادله‌های کلاسیک حرکت

ج) رفتار مکانیک کوانتومی

۴. اتم موثونی سنگین

الف) مقایسه با اتم هیدروژن

ب) اتم موثونی سنگین به‌عنوان یک نوسانگر هماهنگ

ج) مرتبه بزرگی انرژیها و گستردگی توابع موج

در پیشگفتار این فصل متذکر شدیم که نتیجه‌های به‌دست آمده به‌هنگام بررسی نوسانگر هماهنگ، در موارد بیشماری در فیزیک، به‌ویژه در مورد نوسانهای کوچک یک دستگاه پیرامون وضع ترازمندی پایدار (که انرژی پتانسیل آن مینیموم است) به‌کار می‌رود. هدف این مکمل توصیف مثالی چند از این‌گونه نوسانها و نشان‌دادن اهمیت فیزیکی آنهاست: ارتعاش هسته‌های یک مولکول دو اتمی یا یک شبکه بلورین، ارتعاشهای پیچشی در یک مولکول، حرکت یک موثون μ^- در داخل یک هسته سنگین. روشن است که نظر نداریم در اینجا به جزئیات پدیده‌ها وارد شویم بلکه به یک بحث ساده و کیفی بسنده خواهیم کرد.

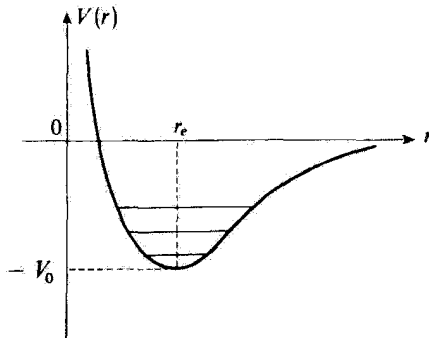
۱. ارتعاش هسته‌های یک مولکول دو اتمی

الف) انرژی برهم‌کنش میان دو اتم

تشکیل یک مولکول از دو اتم خنثی بدین واقعیت مربوط است که انرژی پتانسیل برهم‌کنش $V(r)$ این دو اتم (که در آن r فاصله میان آنهاست) دارای مینیمومی است. شکل ۱ تغییرات $V(r)$ را نشان می‌دهد. هنگامی که r بسیار بزرگ است، دو اتم برهم‌کنشی ندارند و $V(r)$ به ثابتی می‌گراید که ما آن را مبدأ انرژی خواهیم گرفت. سپس هنگامی که r کاهش می‌یابد، $V(r)$ تقریباً به شکل $1/r^6$ - تغییر می‌کند: نیروهای جاذبه متناظر، نیروهای وان‌دروالس هستند (که در مکمل ۳ فصل ۱۱ مطالعه خواهد شد). هنگامی که r آن قدر کوچک است که تابع موجهای الکترونی دو اتم همدیگر را می‌پوشانند، $V(r)$ تندتر کاهش می‌یابد و از مینیمومی در $r = r_e$ می‌گذرد و سپس افزایش می‌یابد و هنگامی که r به صفر میل می‌کند، بسیار بزرگ می‌شود.

مینیموم $V(r)$ مسؤوّل پدیده پیوند شیمیایی میان دو اتم است. قبلاً در بخش ۳-۲-۳-ج (که مولکول H_2^+ به عنوان مثال انتخاب شد) گفتیم که علت این کاهش انرژی، پدیده واجایگزیدگی حالت‌های الکترونی (یعنی تشدید کوانتومی) است که امکان می‌دهد الکترون‌ها تحت تأثیر جاذبه هر دو هسته قرار گیرند. افزایش سریع $V(r)$ در فاصله‌های کم ناشی از دافعه هسته‌هاست.

اگر هسته‌ها ذره‌های کلاسیک می‌بودند، می‌بایستی موضعهای ترازمند پایداری با فاصله $r = r_e$ داشته باشند. عمق V_0 چاه پتانسیل برای $r = r_e$ به‌طور کلاسیک انرژی تفکیک مولکول



شکل ۱ تغییرات پتانسیل برهم‌کنش میان دو اتم که می‌توانند یک مولکول پایدار تشکیل دهند: از دید کلاسیکی، V_0 انرژی تفکیک و r_e فاصله میان دو هسته در وضع ترازندی است. در مکانیک کوانتومی، آن ترازهای ارتعاشی (خطهای افقی در چاه پتانسیل) به دست می‌آیند که انرژی‌هایشان همگی بیش از $-V_0$ است.

نام دارد: در واقع این انرژی است که باید به دو اتم داد تا آنها را از یکدیگر دور کرد. هر چه V_0 بیشتر باشد، مولکول پایدارتر است.

تعیین نظری و تجربی منحنی شکل ۱ مسئله بسیار مهم در فیزیک اتمی و مولکولی است. خواهیم دید که مطالعه ارتعاشهای هسته‌ها امکان می‌دهد تا آگاهی‌هایی در مورد این منحنی به دست آید.

یادداشت:

(تقریب بورن-اوپنهایمر)

توصیف کوانتومی یک مولکول دو اتمی در واقع مسئله‌ای بس پیچیده است؛ موضوع عبارت است از یافتن حالت‌های مانای مجموعه‌ای از ذرات، هسته‌ها، و الکترون‌ها، که با یکدیگر برهم‌کنش دارند. حل دقیق معادله شرودینگر چنین دستگاهی عموماً ناممکن است. با این همه یک ساده‌نمایی مهمی پدید می‌آید، زیرا جرم الکترون‌ها در برابر جرم هسته‌ها کوچک است و سبب می‌شود تا حرکت الکترون‌ها خیلی تندتر از آنها باشد. از اینجا چنین برمی‌آید که، در تقریب نخست، می‌توان این دو حرکت را جداگانه مطالعه کرد. نخست حرکت الکترون‌ها را برای مقدار ثابت فاصله r میان دو هسته تعیین می‌کنیم. بدینسان، یک سری از حالت‌های مانای دستگاه الکترونی با انرژی‌های $E_1(r), E_2(r), \dots$ به دست می‌آید. اکنون حالت پایه دستگاه الکترونی با انرژی $E_1(r)$ را در نظر بگیریم، هنگامی که r به سبب حرکت هسته‌ها تغییر می‌کند، دستگاه الکترونی برای هر اندازه از r همواره در حالت پایه می‌ماند و این بدان معنی است که تابع موجش با هر تغییر r فوراً خود را سازش می‌دهد: گفته می‌شود که الکترون‌ها (بسیار متحرک) حرکت هسته‌ها را "به‌طور بی‌دررو" دنبال می‌کنند. هنگامی که می‌خواهیم این حرکت را مطالعه کنیم، انرژی الکترونی $E_1(r)$ نقش یک انرژی پتانسیل برهم‌کنش میان این دو هسته را بازی می‌کند. این انرژی پتانسیل به فاصله r هسته‌ها بستگی دارد و به انرژی دافعه الکتروستاتیک $Z_1 Z_2 e^2 / r$ افزوده می‌شود (Z_1 و Z_2 اعداد اتمی دو هسته‌اند و $e^2 = q^2 / 4\pi\epsilon_0$ گزارده شده است که در آن q بار الکترون است). بنابراین، انرژی پتانسیل کل $V(r)$ دستگاه دو هسته که امکان می‌دهد تا حرکت آنها تعیین شود، عملاً به شکل زیر است

$$V(r) = E_1(r) + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \quad (1)$$

همین تابع است که در شکل ۱ نمایش داده شده است.

ب) حرکت هسته‌ها

۱. جداسازی حرکت‌های چرخشی و ارتعاشی

بدینسان، ما به مسئله حرکت دو ذره با جرم‌های m_1 و m_2 باز می‌گردیم که با پتانسیل $V(r)$ شکل ۱، که تنها به فاصله آنها وابسته است، برهم‌کنش می‌کنند. مسئله به سبب وجود چندین درجه آزادی، ارتعاش (تغییر r)، و چرخش (تغییر زاویه‌های قطبی θ و φ که راستای محور مولکول را

به دست می‌دهند) هنوز پیچیده است. به علاوه، این درجه‌های آزادی جفتیده هستند. هنگامی که مولکول ارتعاش می‌کند، گشتاور لختی آن با تغییر r تغییر می‌کند و انرژی چرخشی دستخوش تغییر می‌شود.

اگر بررسی به ارتعاشهای دامنه کم محدود شود، می‌توان نشان داد که جفتیدگی میان درجه‌های آزادی ارتعاش و چرخش ناچیز است، زیرا تغییرات نسبی گشتاور لختی در جریان ارتعاش اندک است. بدینسان (چنانکه در مکمل ۶ فصل ۷ خواهیم دید)، موضوع به دو مسئله مستقل منجر می‌شود. نخست مطالعه چرخش یک "هالتر" شامل دو جرم m_1 و m_2 به فاصله ثابت r_e و سپس یک مسئله یک‌بعدی (که r تنها متغیر آن است) مربوط به یک ذره خیالی به جرم m ، برابر با جرم کاهش یافته m_1 و m_2 (فصل ۷، بخش ۷-۲)،

$$m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (2)$$

که در پتانسیل $V(r)$ شکل ۱ حرکت می‌کند در نظر می‌گیریم. در این صورت باید معادله ویژه مقدار زیر را حل کرد

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) \right] \varphi(r) = E\varphi(r) \quad (3)$$

در اینجا توجه خود را به مسئله اخیر متمرکز می‌کنیم.

۲. ترازهای ارتعاشی

اگر به نوسانهای با دامنه کم بسنده کنیم، می‌توان $V(r)$ را در نزدیکی مینیموم برحسب $r = r_e$ بسط محدودی داد

$$V(r) = -V_0 + \frac{1}{2} V''(r_e)(r - r_e)^2 + \frac{1}{6} V'''(r_e)(r - r_e)^3 + \dots \quad (4)$$

بحث بخش ۵-۱-۲ نشان می‌دهد که، اگر از جمله‌های بالاتر از مرتبه دو در عبارت (۴) صرف‌نظر شود، معادله به یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی، متمرکز پیرامون $r = r_e$ ، با بسامد زاویه‌ای

$$\omega = \sqrt{\frac{V''(r_e)}{m}} \quad (5)$$

۱. مطالعه کوانتومی این دستگاه (که "چرخنده صلب" نامیده می‌شود) پس از واردکردن تکانه زاویه‌ای حرکت، در مکمل ۳ فصل ۶ انجام خواهد گرفت.

تبدیل می‌شود. بنابراین، ترازهای ارتعاشی (φ_v) که با خطهای افقی در شکل ۱ نشان داده شده‌اند دارای انرژی

$$E_v = \left(v + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega - V_0 \quad (6)$$

هستند که در آن $v = 0, 1, 2, \dots$ است (در مطالعه ارتعاشهای مولکولی، نماد v به جای n به کار می‌رود).

بنابر بحث بخش ۵-۴-۳، اندازه میانگین $\langle R \rangle$ از فاصله میان دو هسته، پیرامون r_e با بسامد $\omega/2\pi$ نوسان می‌کند. در نتیجه، $\omega/2\pi$ به‌عنوان بسامد ارتعاشی مولکول هویدا می‌شود.

یادداشتها:

(الف) حتی در حالت پایه، تابع موج یک نوسانگر هماهنگ دارای گستره محدودی در حدود $\sqrt{\hbar/2m\omega}$ است (بخش ۵-۴-۲). بنابراین، فاصله میان دو هسته یک مولکول در حالت پایه ارتعاشی فقط در محدوده $\sqrt{\hbar/2m\omega}$ تعریف می‌شود. پس یک شرط مهم برای آنکه درجه‌های آزادی ارتعاشی و چرخشی واجفتیده باشند این است که

$$\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \ll r_e \quad (7)$$

(ب) با معلوم بودن جرم کاهش یافته m و اندازه‌گیری ω ، مشتق دوم $V''(r_e)$ از رابطه (۵) به دست می‌آید. هنگامی که عدد کوانتومی v افزایش می‌یابد، دیگر نمی‌توان از جمله‌های برحسب $(r - r_e)^2$ در (۴) (که انحراف چاه پتانسیل از یک شکل سهموی را نشان می‌دهد)، چشم پوشید. نوسانگر در این صورت ناهماهنگ می‌شود. با مطالعه تأثیر جمله $(r - r_e)^3$ در (۴) به وسیله نظریه پیریشدگی (که در مکمل ۱ فصل ۱۱ انجام خواهد شد)، خواهیم یافت که جدایی میان ترازهای پیاپی دیگر برای اندازه‌های بزرگ و کوچک v یکسان نیست. بنابراین، مطالعه تغییرات $E_{v+1} - E_v$ برحسب v امکان می‌دهد تا به ضریب $V''(r_e)$ جمله برحسب $(r - r_e)^3$ دست یابیم. بدین ترتیب، درمی‌یابیم که چگونه، با مطالعه بسامدهای ارتعاش مولکولی، می‌توان شکل منحنی $V(r)$ را در نزدیکی مینیموم آن به دقت تعیین کرد.

۳. مرتبه بزرگی بسامدهای ارتعاش

معمول بر این است که بسامد مولکولی به cm^{-1} یعنی عکس طول موج (برحسب cm) یک تابش الکترومغناطیسی با همان بسامد بیان شود. یادآوری کنیم که cm^{-1} متناظر با بسامد $3 \times 10^{10} \text{ Hz}$ و انرژی $1.24 \times 10^{-4} \text{ eV}$ است.

بسامدهای ارتعاشهای مولکولهای دواتمی میان چندین ده cm^{-1} تا چندین میلیون cm^{-1} قرار دارند. بنابراین، طول موجهای متناظر از چند میکرون تا چند صد میکرون تغییر می‌کند و در نتیجه در گستره فروسرخ قرار دارند.

از رابطه (۵) پیداست که هرچه m کوچکتر و $V'''(r_e)$ ، یعنی انحنای چاه پتانسیل در $r = r_e$ ، بزرگتر باشد ω بزرگتر است. چون r_e همواره دارای مرتبه بزرگی معینی است (چند Å)، $V'''(r_e)$ همراه با عمق V_e چاه پتانسیل افزایش می‌یابد؛ بنابراین ω تابعی صعودی از پایداری شیمیایی است. ملاحظات پیشین را با چند مثال ملموس روشن کنیم.

بسامد ارتعاش مولکولهای هیدروژن و دوتریم (H_2 و D_2) به ترتیب (بدون در نظر گرفتن تصحیحاتی مربوط به ناهماهنگی)، عبارت‌اند از

$$\begin{aligned} \nu_{H_2} &= 4401 \text{ cm}^{-1} \\ \nu_{D_2} &= 3112 \text{ cm}^{-1} \end{aligned} \quad (A)$$

منحنی $V(r)$ در هر دو مورد یکی است؛ پیوند شیمیایی در واقع تنها به وضع الکترونی مربوط است. برعکس، جرم کاهش‌یافته H_2 دو بار کوچکتر از جرم کاهش‌یافته D_2 است. پس بنابر (۵) باید داشته باشیم $\nu_{H_2} = \sqrt{2}\nu_{D_2}$. این همان چیزی است که از اندازه‌های تجربی (۸) به دست می‌آید.

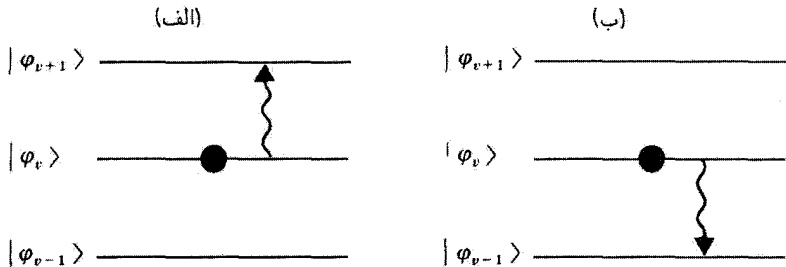
اکنون مثالی از دو مولکول در نظر بگیریم که دارای جرمهای کاهش‌یافته حدود هم ولی پایداری شیمیایی کاملاً مختلف هستند. مولکول $^{85}Rb^{79}Br$ از نظر شیمیایی پایدار است (پیوند میان یک هالوژن و یک قلیایی) و دارای بسامد ارتعاشی برابر با 181 cm^{-1} است. مولکولهای $^{85}Rb^{84}Kr$ به تازگی در تجربه‌های پمپ‌شدن اپتیکی مشاهده شده‌اند. پایداری این مولکولها بسیار ضعیفتر است زیرا کریپتون، که یک گاز کمیاب است، از دیدگاه شیمیایی عملاً بی‌اثر است (در واقع، چسبندگی مولکول تنها پدیدار از نیروهای وان‌دروالسی است). برای این مولکولها بسامد ارتعاشی برابر با 13 cm^{-1} به دست آمده است. اختلاف چشمگیر با عدد قبلی، تنها نمایانگر اختلاف پایداری شیمیایی میان دو نوع مولکول است، زیرا جرم کاهش‌یافته آنها با تقریب چند درصد عملاً یکسان است.

ج) مشاهدات تجربی ارتعاشهای هسته‌ای

اکنون باید توضیح دهیم که ارتعاش هسته‌ها به‌ویژه به‌هنگام برهم‌کنش با یک موج الکترومغناطیسی، چگونه به‌طور تجربی تجلی می‌کند.

۱. جذب و گسیل فروسرخ

نخست فرض کنیم که مولکول ناهم‌قطبی باشد، یعنی از دو اتم مختلف تشکیل شده باشد. چون الکترونها به‌سوی اتمی کشیده می‌شوند که الکترونگاتیوتر است، مولکول در حالت عمومی دارای یک گشتاور دوقطبی دائمی $D(r)$ است که به r فاصله میان دو هسته بستگی دارد. $D(r)$ را



شکل ۲ جذب (الف) و گسیل (ب) فوتونی به انرژی $h\nu$ به وسیله یک مولکول ناهمقطبی که از حالت ارتعاشی $|\varphi_v\rangle$ به حالت $|\varphi_{v+1}\rangle$ یا $|\varphi_{v-1}\rangle$ می‌رود.

در همسایگی وضع تعادل $\tau = \tau_e$ بسط می‌دهیم

$$D(r) = d_0 + d_1(r - r_e) + \dots \quad (9)$$

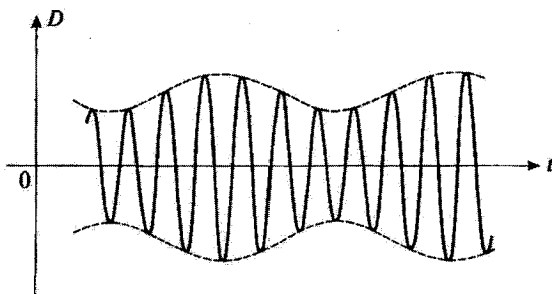
که در آن d_1 و d_0 ثابتهای حقیقی هستند.

هنگامی که مولکول در یک برهم‌نهی خطی $|\psi(t)\rangle$ از چندین حالت مانای ارتعاشی $|\varphi_v\rangle$ قرار دارد، اندازه میانگین $\langle \psi(t) | D(R) | \psi(t) \rangle$ از گشتاور دوقطبی الکتریکی آن به دور اندازه d_0 با بسامد $\omega/2\pi$ نوسان می‌کند. جمله نوسانی از اندازه میانگین $d_1(R - r_e)$ رابطه (۹) ناشی می‌شود در این مسئله همان نقشی را دارد که مشاهده‌پذیر X در نوسانگر هماهنگ مطالعه شده در بخش ۳-۴-۵ داشت، اما $(R - r_e)$ تنها میان دو حالت $|\varphi_{v'}\rangle$ و $|\varphi_v\rangle$ که $v - v' = \pm 1$ باشد دارای اجزای ماتریس غیرصفر است. این قاعده گزینش امکان می‌دهد که دریابیم چرا در حرکت $\langle D(R) \rangle(t)$ تنها یک بسامد بور $\omega/2\pi$ پدید می‌آید [البته بسامدهای هماهنگ هنگامی پدید می‌آیند که ناهماهنگی پتانسیل و جمله‌های مرتبه بالاتر در بسامد (۹) در نظر گرفته شوند. با این همه، آنها دارای شدتی به مراتب ضعیفتر هستند].

این ارتعاش گشتاور دوقطبی الکتریکی امکان می‌دهد تا دریابیم که چگونه مولکول به میدان الکترومغناطیسی جفتیده است و در نتیجه می‌تواند تابشی با بسامد ν را جذب یا گسیل کند. با اصطلاح فوتونی، مولکول می‌تواند فوتونی با انرژی $h\nu$ را جذب کند و از حالت $|\varphi_v\rangle$ به حالت $|\varphi_{v+1}\rangle$ برود [شکل ۲ (الف)]، یا برعکس با گذر از $|\varphi_v\rangle$ به $|\varphi_{v-1}\rangle$ یک فوتون گسیل نماید [شکل ۲ (ب)].

۲. اثر رامان

اکنون یک مولکول همقطبی، یعنی مولکولی را در نظر می‌گیریم که از دو اتم همانند تشکیل یافته



شکل ۳ ارتعاش یک مولکول، دامنه دوقطبی الکتریکی نوسان‌کننده را که به وسیله یک موج نوری فرودی القاشده است مدوله می‌کند.

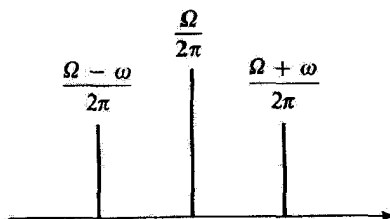
است. در این صورت، ω هرچه باشد، گشتاور دوقطبی الکتریکی دائمی به سبب تقارن صفر است و مولکول در ناحیه فروسرخ "غیرفعال" است.

تصور کنیم که بر روی مولکول یک موج اپتیکی با بسامد $\Omega/2\pi$ می‌فرستیم. چنین بسامدی، بسی بزرگتر از آنهایی که تاکنون مورد بررسی بوده‌اند، قادر است الکترونهای همراه مولکول را برانگیخته کند. بر اثر موج اپتیکی، الکترونهای یک حرکت واداشته انجام می‌دهند و در تمام فضا تابشی با یک بسامد گسیل می‌دارند. این پدیده، پدیده کاملاً شناخته شده پراکندگی مولکولی نور (پراکندگی ریلی) است.^۱ چه پدیده‌های جدیدی به هنگام ارتعاش مولکول پدید می‌آیند؟

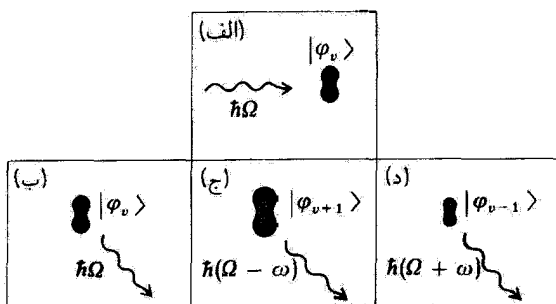
آنچه را که رخ می‌دهد می‌توان به طور کیفی چنین بیان کرد. پذیرفتاری الکترونی^۲ مولکول عموماً تابعی از ω فاصله میان دو هسته آن است. هنگامی که ω تغییر می‌کند (یادآور شدیم که این ارتعاش در مقابل حرکت الکترونها کند است)، دامنه دوقطبی الکتریکی القایی که با بسامد $\Omega/2\pi$ ارتعاش می‌کند، تغییر خواهد کرد. بنابراین، وابستگی زمانی گشتاور دوقطبی همان تغییرات زمانی یک حرکت سینوسی به بسامد $\Omega/2\pi$ است که دامنه‌اش با بسامد ارتعاش مولکولی $\omega/2\pi$ بسیار پایینتر، مدوله شده باشد. توزیع بسامد نور گسیل شده از مولکول با تبدیل فوری به حرکت دوقطبی الکتریکی داده می‌شود که در شکل ۳ نمایش داده شده است. به آسانی درمی‌یابیم (شکل ۴) که یک خط مرکزی به بسامد $\Omega/2\pi$ (پراکندگی ریلی) و دو خط جانبی وجود دارد که

۱. در مکمل ۱ فصل ۱۳، حرکت واداشته الکترونهای یک اتم تحت تأثیر تابش نوری را با مکانیک کوانتومی مطالعه خواهیم کرد.

۲. بر اثر میدان $\mathbf{E}_0 e^{i\Omega t}$ موج اپتیکی فرودی، ابر الکترونی مولکول یک گشتاور دوقطبی القایی \mathbf{D} به دست می‌آورد که با رابطه $\mathbf{D} = \chi(\Omega)\mathbf{E}_0 e^{i\Omega t}$ داده می‌شود. $\chi(\Omega)$ بنا به تعریف، پذیرفتاری الکترونی مولکول نام دارد. نکته مهم در اینجا این است که χ وابسته به ω است.



شکل ۴ طیف نوسانهای نمایش داده شده در شکل ۳. علاوه بر خط مرکزی هم بسامد با موج نوری فرودی (خط ریلی) دو خط جابه‌جاشده پدید آمده است (خطهای رامان-استوکس و رامان-پاداستوکس). انحراف این دو خط از خط مرکزی برابر با بسامد ارتعاش مولکول است.



شکل ۵ نمایش پراکندگی یک فوتون با انرژی $\hbar\Omega$ از یک مولکول که در آغاز در حالت ارتعاشی $|\varphi_v\rangle$ بوده است (الف): پراکندگی ریلی بدون تغییر حالت ارتعاشی (ب): پراکندگی رامان-استوکس یا رامان-پاداستوکس با تغییری در حالت مولکول از $|\varphi_v\rangle$ به $|\varphi_{v+1}\rangle$ (ج) ، یا به $|\varphi_{v-1}\rangle$ (د).

بسامد یکی $(\Omega - \omega)/2\pi$ (پراکندگی رامان-استوکس) و از آن دیگری $(\Omega + \omega)/2\pi$ (پراکندگی رامان-پاداستوکس) است.

تعبیر این خطها به کمک فوتون بسیار ساده است. یک فوتون آبتیکی به انرژی $\hbar\Omega$ را در نظر می‌گیریم که بر روی مولکولی که در حالت $|\varphi_v\rangle$ است فرود می‌آید [شکل ۵ (الف)]. اگر در جریان پراکندگی، مولکول تغییر تراز ارتعاشی ندهد پراکندگی کشسان خواهد بود. به سبب بقای انرژی، فوتون پراکنده دارای همان انرژی فوتون فرودی است [شکل ۵ (ب) خط ریلی]. مولکول همچنین می‌تواند در جریان پراکندگی از تراز $|\varphi_v\rangle$ به تراز $|\varphi_{v+1}\rangle$ برود. دریافت انرژی $\hbar\omega$ به وسیله مولکول به زیان فوتون پراکنده شده است که در این صورت دارای انرژی $\hbar(\Omega - \omega)$ است. [شکل ۵ (ج)]: در این صورت پراکندگی غیرکشسان است (خط رامان-استوکس). سرانجام، مولکول می‌تواند از حالت $|\varphi_v\rangle$ به حالت $|\varphi_{v-1}\rangle$ برود و فوتون پراکنده شده دارای انرژی $\hbar(\Omega + \omega)$ است [شکل ۵ (د)؛ خط رامان-پاداستوکس].

یادداشتها:

۱. اثر رامان را می‌توان روی مولکولهای ناهمقطبی نیز مشاهده کرد.
۲. اثر رامان به‌تازگی به‌سبب پیدایش چشمه‌های لیزر، دوباره مورد توجه قرار گرفته است. با قراردادن یک تشتک پر از مادهٔ فعال، از دیدگاه رامان، در حفرهٔ یک لیزر نوسان‌کننده با بسامد $\Omega/2\pi$ ، در مواردی می‌توان یک تقویت (اثر رامان برانگیخته)، و در نتیجه یک نوسان لیزر به بسامد $(\Omega - \omega)/2\pi$ به‌دست آورد که در آن ω بسامد ارتعاش مولکولهای داخل تشتک است (لیزر رامان). بدین‌ترتیب با تغییر این ماده می‌توان بسامد لیزر را به دلخواه تغییر داد.
۳. مطالعهٔ طیفهای رامان و فروسرخ مولکولها در شیمی ارزنده است زیرا امکان می‌دهد تا پیوندهای مختلفی که در یک مولکول پیچیده وجود دارد، شناسایی شود. به‌عنوان مثال، بسامد ارتعاش مجموعه‌ای از دو اتم کربن، بسته به اینکه پیوند شیمیایی تکی، دوتایی یا سه‌تایی باشد، یکی نیست. ■

۲. ارتعاش هسته‌ها در یک بلور

(الف) مدل اینشتین

یک بلور از مجموعه اتمها (یا یونها)یی تشکیل شده است که به‌طور منظم در فضا توزیع می‌شوند و ایجاد یک شبکهٔ دوره‌ای می‌کنند. برای سادگی، یک مدل یک‌بعدی، یعنی زنجیره‌ای خطی از اتم را در نظر می‌گیریم. موضع میانگین هستهٔ q امین اتم عبارت است از

$$x_q^* = qd \quad (10)$$

که در آن d گام (فاصله بین اتمهای مجاور) شبکه است (حدود چند Å).

انرژی پتانسیل کل مجموعه هسته‌های بلور را $U(x_1, x_2, \dots, x_q, \dots)$ در نظر بگیریم که به موضعهای $x_1, x_2, \dots, x_q, \dots$ آنها وابسته است. اگر $x_q - x_q^*$ زیاد بزرگ نباشد، یعنی هر هسته از وضع ترازمندی خود زیاد دور نباشد، $U(x_1, x_2, \dots, x_q, \dots)$ در برخی موارد دارای شکل سادهٔ زیر است

$$U(x_1, x_2, \dots, x_q, \dots) \simeq U_0 + \sum_q \frac{1}{4} (x_q - x_q^*)^4 U''_0 + \dots \quad (11)$$

که در آن، U_0 ، U''_0 ثابتهای حقیقی هستند (با $U''_0 > 0$). نبودن جمله‌های خطی برحسب $x_q - x_q^*$ نشانه‌دهندهٔ این واقعیت است که x_q^* یک موضع ترازمندی پایدار برای هستهٔ q (مینیموم

(U) است. اگر انرژی جنبشی کل را به صورت

$$T = \sum_q \frac{p_q^2}{2m} \quad (12)$$

که در آن p_q تکانه هسته q به جرم m است به (۱۱) بیفزاییم، هامیلتونی H کل دستگاه با تقریب ثابت U_0 ، مجموع هامیلتونیهای نوسانگرهای هماهنگ یک بعدی متمرکز در هر هسته q است

$$H = U_0 + \sum_q \left[\frac{p_q^2}{2m} + \frac{1}{2} (x_q - x_q^0)^2 U_0'' \right] \quad (13)$$

در نتیجه، در این مدل ساده شده، هر هسته پیرامون وضع ترازمندی و مستقل از مجاورهایش با بسامد زاویه‌ای زیر ارتعاش می‌کند

$$\omega = \sqrt{\frac{U_0''}{m}} \quad (14)$$

به مانند مورد مولکول دو اتمی، هر چه m کوچکتر و انحنای پتانسیلی که هسته را به وضع ترازمندی‌ش می‌کشد بزرگتر باشد ω بزرگتر است.

یادداشت:

در مدل ساده‌ای که هم‌اکنون ارائه شد، هر هسته مستقل از هسته‌های دیگر ارتعاش می‌کند. این از آنجا سرچشمه می‌گیرد که پتانسیل پیشنهادی U جمله‌هایی را که به چند متغیر x_q بستگی داشته و نماینده برهم‌کنش میان هسته‌های متفاوت باشند در بر ندارد. این مدل واقعیت‌گرا نیست، زیرا چنین برهم‌کنشهایی واقعاً وجود دارند. در مکمل ۱۰ همین فصل مدل کاملتری را عرضه خواهیم کرد که در آن جفتدگی هر هسته با دو هسته از نزدیکترین همسایگانش به حساب می‌آید. خواهیم دید که در این مدل، باز می‌توان هامیلتونی دستگاه کل را به صورت مجموع هامیلتونیهای نوسانگرهای ناوابسته نوشت. ■

ب) طبیعت مکانیک کوانتومی ارتعاشهای بلورین

مدل اینشتین، هرچند بسیار طرح‌گونه است، امکان می‌دهد تا شماری از پدیده‌های مربوط به طبیعت کوانتومی ارتعاشهای بلورین فهمیده شود. رفتار گرمای ویژه با حجم ثابت در دماهای پایین، که در مکانیک کلاسیک نامفهوم است، در ارتباط با خواص یک نوسانگر هماهنگ در ترازمندی

ترمودینامیکی در مکمل ۱۲ همین فصل بیان خواهد شد. در اینجا یک اثر جالب مربوط به گسترش محدود تابع موجها را بحث می‌کنیم که در حالت پایه، به موضع هر اتم وابسته هستند. در فشار یک جو و صفر مطلق، همه عناصرها بجز هلیوم جامدند. برای منجمد کردن هلیوم، به کار بردن فشاری دست‌کم برابر با ۲۵ جو لازم است. آیا این ویژگی را می‌توان به‌طور کیفی تعبیر کرد؟ پیش از همه بکشیم پدیده ذوب یک جسم معمولی را بفهمیم. در صفر مطلق، اتمها عملاً در وضع ترازمندیشان جایگزین شده‌اند. گستره تابع موجهای پیرامون x_0 ها می‌شود [فرمول (۵-۹۷ الف)]

$$\Delta X \simeq \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} = \left[\frac{\hbar^2}{4mU_0''} \right]^{1/2} \quad (15)$$

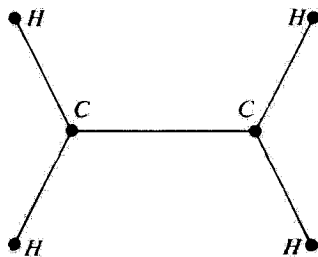
[برای ω عبارت (۱۴) به کار برده شده است]. ΔX عموماً بسیار کوچک است. هنگامی که بلور گرم می‌شود، هسته‌ها به ترازهای ارتعاشی بالا و بالاتر می‌روند. به زبان کلاسیک، هسته‌ها با دامنه‌ای پیش از پیش بزرگتر ارتعاش می‌کنند؛ و به زبان کوانتومی، گستره تابع موجشان (همچون جذر عدد کوانتومی ارتعاشی) افزایش می‌یابد [فرمول (۵-۹۷ الف)]. هنگامی که این گستره در برابر فاصله میان اتمی d ، دیگر چشم‌پوشیدنی نیست، بلور ذوب می‌شود (بخش ۴-ج مکمل ۱۱ همین فصل را ببینید، که این پدیده در آنجا به‌گونه‌ای کمیتر بررسی شده است).

عدم امکان جامد ساختن هلیوم در فشار عادی بدین واقعیت مربوط است که گستره تابع موج، که با (۱۵) داده می‌شود، حتی در صفر مطلق، در برابر d چشم‌پوشیدنی نیست. این موضوع از جرم کم هلیوم و میل ترکیبی شیمیایی بسیار ضعیف آن حاصل می‌شود (انحنای U_0'' پتانسیل در نزدیکی هر مینیموم بسیار ضعیف است، زیرا چاههای پتانسیل بسیار کم عمق‌اند). اثر هر دوی این عوامل در فرمول (۱۵) یکسان است: گستره ΔX بزرگی پدید می‌آورد. افزایش فشار سبب می‌شود که U_0'' و بنابراین ω افزایش یابد و در نتیجه ΔX کاهش یابد. این موضوع بدین واقعیت مربوط است که در فشار بالا، هر اتم هلیوم به‌وسیله اتمهای مجاور در "تگتا" قرار می‌گیرد: هر چه فاصله میانگین میان این همسایگان کمتر، یعنی فشار بیشتر باشد، مینیموم پتانسیل تیزتر (U_0'' بزرگتر) خواهد بود. از اینجاست که می‌فهمیم چگونه افزایش فشار، جامد شدن هلیوم را امکانپذیر می‌سازد.

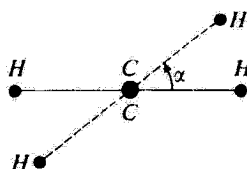
۳. نوسانات پیچشی یک مولکول: اتیلن

الف) ساختار مولکول اتیلن، C_2H_4

ساختار مولکول C_2H_4 به‌خوبی شناخته شده است: هر شش اتم مولکول در یک صفحه جای دارند (شکل ۶) و زاویه میان پیوندهای مختلف $C-H$ و $C-C$ نزدیک به 120° است.



شکل ۶ ساختار تخت مولکول اتیلن.

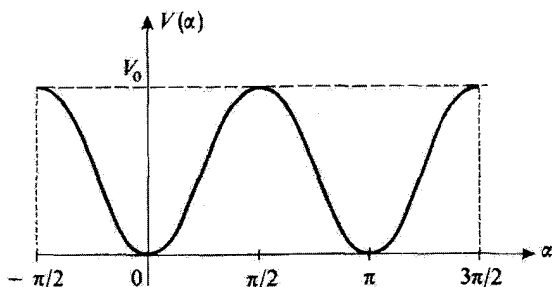


شکل ۷ پیش مولکول اتیلن (دیده شده از راستای محور $C - C$): یکی از دسته‌های CH_2 نسبت به دیگری به دور محور $C - C$ به اندازه زاویه α چرخیده است.

اینک فرض کنیم که بدون تغییر وضع نسبی پیوندهای هر اتم کربن، یکی از گروههای CH_2 نسبت به دیگری به دور محور $C - C$ به اندازه زاویه α بچرخد. شکل ۷ مولکول را که از راستای محور $C - C$ دیده می‌شود، نشان می‌دهد: پیوندهای $C - H$ یک گروه CH_2 با خط‌پر و پیوندهای گروه دیگر با خط چین نشان داده شده‌اند. انرژی پتانسیل $V(\alpha)$ مولکول چگونه با α تغییر می‌کند؟ چون ساختار پایدار مولکول تخت است، زاویه $\alpha = 0^\circ$ باید متناظر با مینیمومی از $V(\alpha)$ باشد. از سوی دیگر پیداست که $\alpha = \pi$ با مینیمومی دیگر از $V(\alpha)$ متناظر است، زیرا دو ساختار وابسته به $\alpha = 0^\circ$ و $\alpha = \pi$ از یکدیگر غیرقابل تمیز هستند. بنابراین، روند $V(\alpha)$ به‌گونه‌ای است که در شکل ۸ نمایش داده شده است [از $-\pi/2$ تا $3\pi/2$ تغییر می‌کند و $V(0^\circ)$ به‌عنوان مبدأ انرژی انتخاب شده است].

دو وضع پایدار $\alpha = 0^\circ$ و $\alpha = \pi$ با سد پتانسیلی به بلندی V_0 از هم جدا شده‌اند. پتانسیل شکل ۸ را اغلب به‌طور تقریبی با رابطه ساده زیر نشان می‌دهند

$$V(\alpha) = \frac{V_0}{4}(1 - \cos 2\alpha) \quad (16)$$



شکل ۸ انرژی پتانسیل مولکول به زاویهٔ پیچش α بستگی دارد؛ برای $V(\alpha)$ و $\alpha = 0$ و $\alpha = \pi$ مینیموم است (ساختارهای تخت).

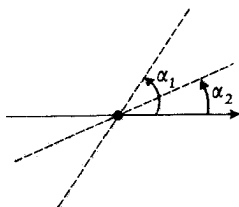
یادداشت:

مکانیک کوانتومی امکان می‌دهد تا همهٔ مشخصه‌های مولکول C_2H_2 را که در بالا اعلام کردیم، تعبیر کنیم. در این مولکول، هر اتم کربن دارای چهار الکترون ظرفیت است. سه تا از این الکترون‌ها (الکترون‌های σ) دارای تابع موجهایی با تقارن چرخشی به دور سه خط راست هم‌صفحه هستند که با یکدیگر زاویه‌های 120° می‌سازند و راستاهای پیوندهای شیمیایی را تعریف می‌کنند (شکل ۶). در این صورت همپوشی این تابع موجها با تابع موجهای الکترونهای اتمهای مجاور مهم است و همین است که پایداری پیوندهای $C-H$ و بخشی از پیوند $C-C$ را تأمین می‌کند (این پدیده که "هیبریدشدگی sp " نام دارد، به تفصیل در مکمل ۵ فصل ۷ مطالعه خواهد شد). آخرین الکترون ظرفیت هر اتم کربن (الکترون π) دارای تابع موجی با تقارن چرخشی به دور خطی است که بر C می‌گذرد و عمود بر صفحه‌ای است که با C و سه مجاورش تعریف شده است. همپوشی تابع موجهای دو الکترون π ماکزیموم است و در نتیجه پایداری شیمیایی پیوند دوتایی، هنگامی بزرگترین مقدار ممکن را دارد که دو خط راست وابسته به الکترونهای π موازی باشند، یعنی هنگامی که شش اتم مولکول در یک صفحه باشند، بدین ترتیب، ساختار شکل ۶ کاملاً بیان می‌شود. ■

چون $V(\alpha)$ را می‌توان در نزدیکی دو مینیموم آن با یک سهمی تقریب زد، مولکول به دور موضعهای ترازمندی پایدارش نوسانهای پیچشی خواهد کرد که اکنون بررسی می‌کنیم. نخست سرعت معادله‌های کلاسیک متناظر را یادآوری می‌کنیم.

(ب) معادله‌های کلاسیک حرکت

زاویه‌هایی را که صفحه‌های دو گروه CH_2 با صفحهٔ ثابتی که از محور $C-C$ می‌گذرد می‌سازند، به α_1 و α_2 نشان می‌دهیم (شکل ۹). بدیهی است که زاویهٔ شکل ۷ برابر است با



شکل ۹ برای نوشتن معادله‌های حرکت، صفحه‌های دو گروه CH_2 را با زاویه‌های α_1 و α_2 که با صفحه ثابتی می‌سازند، نشان می‌دهیم.

$$\alpha = \alpha_1 - \alpha_2 \quad (17)$$

فرض می‌کنیم I گشتاورهای لختی یکی از گروههای CH_2 نسبت به محور $C-C$ باشد. انرژی پتانسیل تنها به $\alpha = \alpha_1 - \alpha_2$ بستگی دارد و معادله‌های دینامیک مربوط به چرخش هر گروه چنین نوشته می‌شود

$$\begin{cases} I \frac{d^2 \alpha_1}{dt^2} = -\frac{\partial}{\partial \alpha_1} V(\alpha_1 - \alpha_2) = -\frac{d}{d\alpha} V(\alpha) \\ I \frac{d^2 \alpha_2}{dt^2} = -\frac{\partial}{\partial \alpha_2} V(\alpha_1 - \alpha_2) = +\frac{d}{d\alpha} V(\alpha) \end{cases} \quad (18)$$

از افزایش و کاهش این دو معادله به‌دست می‌آید

$$\frac{d^2}{dt^2}(\alpha_1 + \alpha_2) = 0 \quad (19\text{-الف})$$

$$I \frac{d^2 \alpha}{dt^2} = -2 \frac{d}{d\alpha} V(\alpha) \quad (19\text{-ب})$$

معادله (۱۹-الف) نشان می‌دهد که مجموعه مولکول می‌تواند، مستقل از پیچش، به دور محور $C-C$ آزادانه بچرخد: زاویه $(\alpha_1 + \alpha_2)/2$ که صفحه نیمساز گروه CH_2 را نشان می‌دهد، تابعی خطی از زمان است. معادله (۱۹-ب) حرکت پیچشی (چرخش یک گروه نسبت به گروه دیگر) را بیان می‌کند. این حرکتها را در همسایگی نزدیک وضع ترازمندی پایدار $\alpha = 0$ مطالعه می‌کنیم. عبارت (۱۶) را در پیرامون $\alpha = 0$ بسط می‌دهیم

$$V(\alpha) \simeq V_0 + \alpha^2 \quad (20)$$

با بردن (۲۰) در (۱۹-الف) خواهیم یافت

$$\frac{d^2\alpha}{dt^2} + \frac{4V_0}{I}\alpha = 0 \quad (21)$$

در (۲۱) معادله یک نوسانگر هماهنگ یک بعدی را (α تنها متغیر آن است) با بسامد زاویه‌ای زیر
باز می‌یابیم

$$\omega_t = 2\sqrt{\frac{V_0}{I}} \quad (22)$$

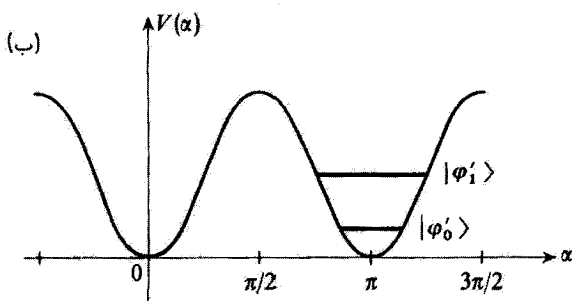
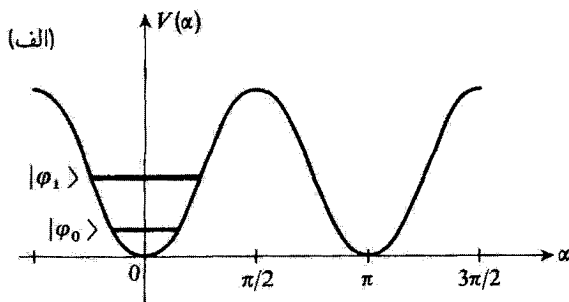
برای مولکول C_2H_2 ، ω_t در حدود 825cm^{-1} می‌باشد.

ج) رفتار مکانیک کوانتومی

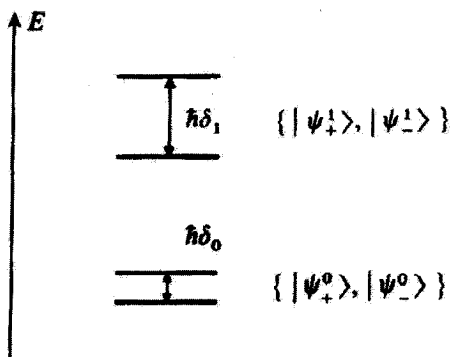
در نزدیکی دو وضع ترازمندی $\alpha = 0$ و $\alpha = \pi$ ، مولکول دارای "حالت‌های پیچشی" با انرژی کوانتومی $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega_t$ است، با $n = 1, 2, \dots$. بنابراین در تقریب نخست هر تراز انرژی $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega_t$ دوبار واگن است، زیرا با آن دو حالت $|\varphi_n\rangle$ و $|\varphi'_n\rangle$ متناظر است که اختلاف تابع موجهای $\varphi_n(\alpha)$ و $\varphi'_n(\alpha)$ آنها تنها مربوط بدین واقعیت است که یکی در $\alpha = 0$ متمرکز شده است و دیگری در $\alpha = \pi$ [شکل ۱۰-الف و ۱۰-ب].

در واقع، باید یک اثر نوعاً کوانتومی را نیز به حساب آورد که همان گذر توسط اثر تونل از سد پتانسیلی است که دو مینیموم را از یکدیگر جدا می‌کند (شکل ۸).

قبلاً به وضعی از این‌گونه در مکمل ۷ فصل ۴ در مورد وارونگی مولکول NH_3 برخوردیم. محاسباتی همانند محاسبات آن مکمل، در اینجا امکان می‌دهد تا نشان دهیم که واگنی میان دو حالت $|\varphi_n\rangle$ و $|\varphi'_n\rangle$ به وسیله اثر تونل از میان برداشته می‌شود: بدینسان برای هر اندازه n ، دو حالت مانای $|\psi_n^+\rangle$ و $|\psi_n^-\rangle$ (که در تقریب نخست ترکیبات خطی متقارن و پاد متقارن $|\varphi_n\rangle$ و $|\varphi'_n\rangle$ هستند) پدید می‌آید که با انرژی $\hbar\delta_n$ از هم جدا شده‌اند. هر چه n بزرگتر باشد، یعنی انرژی آغازی E_n به V_0 نزدیکتر (و در نتیجه اثر تونل مهمتر) باشد، اختلاف انرژی $\hbar\delta_n$ بیشتر است. با این همه، $\hbar\delta_n$ همیشه در برابر فاصله $\hbar\omega_t$ میان دو چندانگی مجاور n و $n \pm 1$ ، بسیار کوچکتر است (شکل ۱۱).
بنابراین، حرکت پیش‌بینی شده در مکانیک کوانتومی برای اندازه میانگین زاویه α چنین است: نوسانهای تند با بسامد ω_t پیرامون یکی از دو اندازه $\alpha = 0$ و $\alpha = \pi$ ، که بدانها نوسانهای بسیار کندتری میان $\alpha = 0$ و $\alpha = \pi$ ، با بسامدهای بور، $\delta_1/2\pi, \delta_2/2\pi, \dots, \delta_n/2\pi$ برهم نهاده می‌شوند.



شکل ۱۰ هنگامی که از اثر تونل سد پتانسیل در $\alpha = \pi/2$ و $\alpha = 3\pi/2$ چشمپوشی می‌شود، می‌توان حالت‌هایی بیچسبی برای مولکول یافت که در جاهای متمرکز در $\alpha = 0$ (الف) و $\alpha = \pi$ (ب) جایگزیده شده‌اند.



شکل ۱۱ اثر تونل، واکنشی ترازهای انرژی متناظر با شکل ۱۰ را از میان برمی‌دارد و هر چه به قله سد نزدیکتر می‌شویم، این پدیده بارزتر است ($\delta_1 > \delta_0$). حالت‌های $|\psi_+^0\rangle$ ، $|\psi_-^0\rangle$ ، $|\psi_+^1\rangle$ ، و $|\psi_-^1\rangle$ حالت‌های مانای جدید هستند.

یادداشت:

البته ترازهای وجود دارند که انرژی‌شان از ارتفاع ماکزیموم V سد پتانسیل شکل ۸ بیشتر است. این ترازها با یک انرژی جنبشی چرخشی به اندازه کافی بزرگ متناظرند تا بتوان در نظر گرفت که یکی از گروههای CH_2 تقریباً نسبت به دیگری آزادانه می‌چرخد (در حالی که، با این همه، به وسیله پتانسیل شکل ۸، به طور دوره‌ای کند شده یا شتاب می‌گیرد).

مولکول اتان C_2H_6 دارای رفتاری از این نوع است. نبودن الکترون π در این مولکول در واقع سبب چرخش بسیار آسانتر یکی از گروههای CH_3 نسبت به دیگری می‌شود (ارتفاع پتانسیل V در اینجا بسیار کمتر است). در این مورد، پتانسیل $V(\alpha)$ ، سعی می‌کند با دوران آزاد یکی از گروههای CH_3 مخالفت کند، و به سبب تقارن دارای دوره $2\pi/3$ است. ■

۴. اتم موثونی سنگین

موثون μ^- (که گاهی به دلایل تاریخی "مزون μ " نامیده می‌شود) ذره‌ای است با همان خواص الکترون جز آنکه جرمش 270 بار بزرگتر است. به ویژه، این ذره به برهم‌کنشهای قوی حساس نیست. جفتیدگی آن با هسته به طور بنیادی الکترومغناطیسی است. یک موثون که در ماده کند شده باشد، می‌تواند به وسیله میدان کولنی یک هسته اتمی جذب شده و با آن یک حالت مقید بسازد. دستگاهی که بدین ترتیب تشکیل یافته است یک اتم موثونی نام دارد.

الف) مقایسه با اتم هیدروژن

در فصل ۷ (بخش ۷-۳)، حالت‌های مقید دو ذره با بارهای مخالف، به ویژه حالت‌های مقید اتم هیدروژن را، مطالعه خواهیم کرد. خواهیم دید که نتایج مکانیک کوانتومی مربوط به انرژی‌های حالت‌های مقید با نتایج مدل بور (فصل ۷، بخش ۷-۳-۲) تطبیق می‌کند. همچنین گستردگی تابع موج‌هایی که این حالت‌های مقید را توصیف می‌کنند در حدود شعاع مدارهای بور است. بنابراین، نخست به یاری این مدل ساده، انرژی‌های گستردگی‌های نخستین حالت‌های مقید یک موثون μ^- را در میدان کولنی یک هسته سنگین مانند سرب (با $Z = 82$ و $A = 207$) محاسبه کنیم.

اگر هسته را بینهایت سنگین در نظر بگیریم، مدار m بور دارای انرژی

$$E_n = -\frac{Z^2 m e^4}{2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad (23)$$

است که در آن Z عدد اتمی هسته، $e^2 = q^2 / 4\pi\epsilon_0$ (با q بار الکترون) و m ، بسته به مورد، جرم الکترون یا موثون است. هنگامی که به جای اتم هیدروژن اتم موثونی مورد مطالعه در اینجا را

۱. موثون ناپایدار است: به یک الکترون و دو نوترینو تجزیه می‌شود.

در نظرگیریم، E_n در یک ضریب $10^6 \times 1.4 = (207) \times (82)^2 = Z^2 m_\mu / m_e$ ضرب می‌شود. در نتیجه برای اتم موثونی خواهیم داشت

$$\begin{cases} E_1 = -19 \text{ MeV} \\ E_7 = -4.7 \text{ MeV} \end{cases} \quad (24)$$

اما در مورد شعاع مدار m بور، چنین داریم

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{Z m e^2} \quad (25)$$

برای هیدروژن $0.5 \text{ \AA} \approx r_1$ است. در اینجا باید این عدد را بر $Z m_\mu / m_e$ تقسیم کرد که می‌دهد

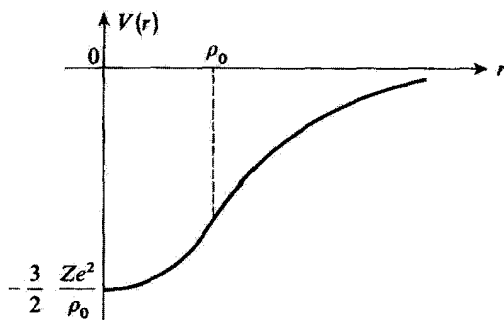
$$\begin{cases} r_1 = 3 \times 10^{-13} \text{ cm} \\ r_7 = 12 \times 10^{-13} \text{ cm} \end{cases} \quad (26)$$

در محاسبه‌ای که گذشت، هسته را به‌طور ضمنی نقطه‌ای فرض کردیم (در مدل بور و نظریه‌ای که در بخش ۳-۷ فصل ۷ عرضه شده است، انرژی پتانسیل برابر با $-Ze^2/r$ گرفته شده است). کوچکی اندازه‌های به‌دست آمده برای r_1 و r_7 [فرمولهای (۲۶)] نشان می‌دهد که این دیدگاه برای یک اتم موثونی سنگین به‌هیچ روی معتبر نیست. در واقع، هسته سرب دارای شعاع ρ_0 چشم‌ناپوشیدنی، در حدود $8.5 \times 10^{-13} \text{ cm}$ است (یادآور می‌شویم که شعاع یک هسته به‌صورت $A^{1/3}$ افزایش می‌یابد). محاسبه کیفی پیشین این اندیشه را در ما پدید می‌آورد که گستردگی توابع موج موثون شاید کمتر از بعد هسته باشد. در نتیجه، مسئله را باید به‌تمامی از سر گرفت و نخست پتانسیلی که موثون در خارج و همچنین در داخل توزیع بار هسته‌ای "می‌بیند" حساب کرد.

ب) اتم موثونی سنگین به‌عنوان یک نوسانگر هماهنگ

یک مدل تقریبی از هسته سرب را در نظر می‌گیریم: فرض می‌کنیم که بار آن به‌طور یکنواخت در کره‌ای به شعاع $\rho_0 = 8.5 \times 10^{-13} \text{ cm}$ توزیع شده باشد.

۱. برای هیدروژن گستردگی توابع موج، از مرتبه آنگستروم، در حدود 10^5 بار بزرگتر از ابعاد پروتون است، و از این رو، مانند نقطه رفتار می‌کند. وضعیت جدیدی که اینجا پیش می‌آید ناشی از عوامل مختلفی است که همدیگر را تقویت می‌کنند: افزایش m و افزایش Z ، منجر به نیروی الکتروستاتیکی بزرگتر و شعاع هسته‌ای بزرگتری می‌شود.



شکل ۱۲ پتانسیل $V(r)$ از دید موئون μ^- ، که توسط هسته‌ای به شعاع ρ_0 واقع شده در $r = 0$ کشیده می‌شود. هنگامی که $r < \rho_0$ است، تغییر پتانسیل سهمی شکل است (در صورتی که چگالی بار هسته یکنواخت باشد)؛ وقتی $r > \rho_0$ است، $V(r)$ همچون $1/r$ تغییر می‌کند (قانون کولن).

هنگامی که فاصله r موئون از مرکز این کره بزرگتر از ρ_0 است، انرژی پتانسیل آن می‌شود

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}, r \geq \rho_0. \quad (27)$$

برای $r < \rho_0$ می‌توان نیروی الکتروستاتیکی وارد بر موئون را با قضیه گاوس محاسبه کرد: سوی آن به طرف مرکز کره است و قدرمطلق آن برابر است با

$$Ze^2 \left(\frac{r}{\rho_0} \right)^3 \frac{1}{r^2} = \frac{Ze^2}{\rho_0^3} r \quad (28)$$

این نیرو از انرژی پتانسیل مشتق می‌شود

$$V(r) = \frac{1}{2} \frac{Ze^2}{\rho_0^3} r^2 + C, \quad r \leq \rho_0. \quad (29)$$

ثابت C از شرط انطباق عبارتهای (۲۷) و (۲۹) برای $r = \rho_0$ تعیین می‌شود

$$C = -\frac{3}{2} \frac{Ze^2}{\rho_0} \quad (30)$$

شکل ۱۲ انرژی پتانسیل موئون را برحسب r نمایش می‌دهد.

در داخل هسته، پتانسیل سهمی شکل است. مرتبه‌های بزرگی که در بخش الف پیشین به دست آوردیم نشان می‌دهند که به‌کار بردن یک پتانسیل خالص کولنی، برای حالت پایه اتم موثونی سرب، واقع‌بینانه نیست. زیرا تابع موج واقعاً در ناحیه‌ای متمرکز است که پتانسیل سهمی شکل است. پس به‌طور یقین ارجح است که در این مورد موثون را "به‌طور کشسان مقید" به هسته در نظر بگیریم. در این صورت با یک نوسانگر هماهنگ سه‌بعدی (مکمل ۵ همین فصل) با بسامد زاویه‌ای

$$\omega = \sqrt{\frac{Ze^2}{m_\mu \rho_0^3}} \quad (31)$$

سروکار داریم. در واقع، خواهیم دید که تابع موج حالت پایه این نوسانگر هماهنگ در خارج از هسته صفر نیست، به‌گونه‌ای که تقریب هماهنگ بودن نیز کامل نیست.

یادداشت:

تحقیق اینکه دستگاه فیزیکی مطالعه شده در اینجا با نخستین مدل اتمی جی.جی. تامسون، شباهت زیادی نشان می‌دهد آموزنده است. در واقع، این فیزیکدان فرض می‌کرد که بار مثبت اتم در کره‌ای توزیع شده که شعاعش در حدود چند آنگستروم است، و تصور می‌کرد که الکترون‌ها در داخل پتانسیل سهمی شکل حاکم بر درون این توزیع بار، جابه‌جا می‌شوند (مدل الکترون به‌طور کشسان بسته). از آزمایشهای رادرفورد می‌دانیم که هسته بسیار کوچکتر است و چنین مدلی برای اتمها با واقعیت تطبیق نمی‌کند. ■

ج) مرتبه بزرگی انرژیها و گستردگی توابع موج
اگر در عبارت (۳۱) اندازه‌های عددی

$$Z = 82$$

$$c = 3 \times 10^8 \text{ m/s}$$

$$\frac{e^2}{hc} \simeq \frac{1}{137}$$

$$m_\mu = 207m_e = 1.86 \times 10^{-28} \text{ kg}$$

$$\hbar \simeq 1.05 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

$$\rho_0 = 8.5 \times 10^{-15} \text{ m}$$

را به‌کار ببریم خواهیم یافت

$$\omega \simeq 1.3 \times 10^{22} \text{ rad.s}^{-1} \quad (32)$$

که با یک انرژی $\hbar\omega$ در حدود

$$\hbar\omega \simeq ۸,۴\text{MeV} \quad (۳۳)$$

متناظر است. می‌توان $\hbar\omega$ را با عمق کلی، $(۳/۲)(Ze^2/\rho_0)$ چاه پتانسیل که برابر است با

$$\frac{۳}{۲} \frac{Ze^2}{\rho_0} \simeq ۲۱\text{MeV} \quad (۳۴)$$

مقایسه کرد. می‌بینیم که $\hbar\omega$ کمتر از این عمق است، ولی نه چندان که بتوان از بخش غیرسهمی $V(r)$ کاملاً چشمپوشی کرد.

همچنین، هرگاه چاه پتانسیل کاملاً سهمی شکل می‌بود، گستردگی تراز پایه در حدود

$$\sqrt{\frac{\hbar}{2m_\mu\omega}} \simeq ۴,۷ \times ۱۰^{-۱۲}\text{cm} \quad (۳۵)$$

می‌بود. بنابراین، بیش‌بینیهای کیفی بخش ۴-الف پیشین تأیید می‌شود: بخش مهمی از تابع موج موئون در داخل هسته یافت می‌شود. با این وصف، نمی‌توان از آنچه در خارج از هسته می‌گذرد تماماً صرفنظر کرد.

بنابراین، محاسبه دقیق انرژیها و تابع موجها پیچیده‌تر از مورد یک نوسانگر هماهنگ ساده است. باید معادله شرودینگر متناظر با پتانسیل شکل ۱۲ را (با به حساب آوردن اسپین، تصحیحهای نسبیتی، و ...) حل کرد. می‌بینیم که چنین محاسبه‌ای باید مهم باشد: در واقع، بررسی انرژی فوتونهایی که از اتم موئونی سنگین گسیل می‌شوند آگاهیهای درباره ساختار هسته، مثلاً درباره توزیع حقیقی بارها در حجم هسته‌ای به دست می‌دهد.

یادداشت:

در مورد اتمهای عادی (الکترون به جای موئون)، می‌توان به‌طور معتبر، از اثرهای انحراف پتانسیل نسبت به شکل $-Ze^2/r$ چشمپوشی کرد. با این وصف این انحراف را می‌توان به‌کمک نظریه پرتشیدگی به حساب آورد (فصل ۱۱ را ببینید). ما در مکمل ۴ فصل ۱۱ این "اثر حجم" هسته را بر روی ترازهای اتمی بررسی خواهیم کرد.

مراجع برای مطالعه بیشتر

ارتعاشات مولکولی:

Karplus and Porter (12.1), chap. 7; Pauling and Wilson (1.9), chap. X; Herzberg (12.4), Vol. I, chap. III, §1; Landau and Lifshitz (1.19), chaps. XI and XIII.

اثر تحریک شده رامان:

Baldwin (15.19), §5.2; see also Schawlow's article (15.17).

نوسانات پیچشی:

Herzberg (12.4), Vol. II, chap. II, §5 d; Kondratiev (11.6), §37

مدل اینشتین:

Kittel (13.2), chap. 6; Seitz (13.4), chap. III; Ziman (13.3), chap. 2; see also Bertman and Guyer's article (13.20).

اتمهای موثونی:

Cagnac and Pebay-Peyroula (11.2), §XIX-7; Weissenberg (16.19), §4-2; see also De Benedetti's article (11.21).

مکمل ۲

مطالعهٔ حالت‌های مانا در نمایش $\{ | x \rangle \}$ چندجمله‌ایهای هرمیت

۱. چندجمله‌ایهای هرمیت

الف) تعریف و خواص ساده

ب) تابع مولد

ج) رابطه‌های بازگشتی؛ معادلهٔ دیفرانسیل

د) مثالها

۲. ویژه‌تابع‌های هامیلتونی نوسانگر هماهنگ

الف) تابع مولد

ب) $\varphi_n(x)$ برحسب چندجمله‌ایهای هرمیت

ج) رابطه‌های بازگشتی

در اینجا می‌خواهیم اندکی مفصلتر از بخش ۵-۳-۲، تابع موجهای $\langle x | \varphi_n \rangle = \varphi_n(x)$ وابسته به حالت‌های مانای $\langle \varphi_n |$ نوسانگر هماهنگ را بررسی کنیم. پیش از پرداختن به این بررسی، ما چندجمله‌ایهای هرمیت را تعریف کرده خواص اصلی آنها را نشان خواهیم داد.

۱. چندجمله‌ایهای هرمیت

الف) تعریف و خواص ساده

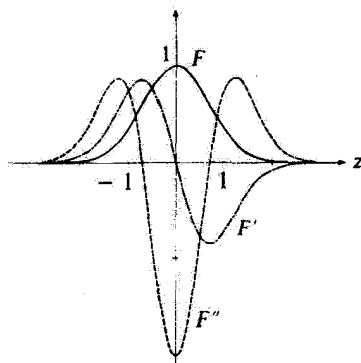
تابع گاوسی

$$F(z) = e^{-z^2} \quad (1)$$

را که با منحنی زنگ‌دیس در شکل ۱ نشان داده شده است، در نظر بگیریم. مشتق‌های پیاپی F می‌شوند

$$F''(z) = -2z e^{-z^2} \quad (2)$$

$$F''(z) = (4z^2 - 2)e^{-z^2} \quad (3)$$



شکل ۱ شکل تابع گاوسی و نخستین مشتقات $F(z)$ و $F'(z)$ و $F''(z)$ آن.

به‌طور کلی نشان می‌دهیم که، $F^{(n)}(z)$ ، مشتق مرتبه n ام را می‌توان چنین نوشت

$$F^{(n)}(z) = (-1)^n H_n(z) e^{-z^2} \quad (۴)$$

که در آن $H_n(z)$ یک چندجمله‌ای n برحسب z است. اثبات به شیوهٔ بازگشتی انجام می‌گیرد. خاصیت پیشین برای $n = 1, 2$ برقرار است [معادله‌های (۲) و (۳)]. فرض کنیم که این خاصیت برای $n - 1$ برقرار باشد

$$F^{(n-1)}(z) = (-1)^{n-1} H_{n-1}(z) e^{-z^2} \quad (۵)$$

که در آن $H_{n-1}(z)$ یک چندجمله‌ای درجهٔ $n - 1$ است. بنابراین، برابری (۴) فوراً با مشتق‌گیری به‌دست می‌آید، به شرطی که قرار دهیم

$$H_n(z) = \left(2z - \frac{d}{dz} \right) H_{n-1}(z) \quad (۶)$$

چون $H_{n-1}(z)$ یک چندجمله‌ای درجهٔ $n - 1$ برحسب z است، از آخرین رابطه پیداست که $H_n(z)$ حقیقتاً یک چندجمله‌ای درجه n است. چندجمله‌ای $H_n(z)$ ، چندجمله‌ای هرمیت درجهٔ n نام دارد، و بنابراین، تعریف آن چنین است

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2} \quad (۷)$$

از رابطه‌های (۲) و (۳) چنین برمی‌آید که $H_1(z)$ و $H_2(z)$ به ترتیب زوج و فرد هستند. از طرف دیگر، رابطه (۶) نشان می‌دهد که اگر $H_{n-1}(z)$ دارای پاریمت معینی باشد، $H_n(z)$ دارای پاریمت مخالف است. از اینجا نتیجه می‌شود که پاریمت $H_n(z)$ برابر است با $(-1)^n$.

صفرهای $H_n(z)$ متناظر با صفرهای مشتق مرتبه n تابع $F(z)$ است. می‌توان نشان داد که $H_n(z)$ دارای n صفر حقیقی است که در میان آنها صفرهای $H_{n-1}(z)$ قرار دارند. در واقع، از شکل ۱ و برابریهای (۱)، (۲)، و (۳) پیداست که این خاصیت برای $n = 0, 1, 2$ درست است. یک استدلال به شیوه بازگشتی امکان می‌دهد تا این نتیجه را تعمیم دهیم. فرض کنیم که $H_{n-1}(z)$ دارای $n-1$ صفر حقیقی باشد. اگر z_1 و z_2 دو صفر پیایی $H_{n-1}(z)$ و در نتیجه، $F^{(n-1)}(z)$ باشند، قضیه زل نشان می‌دهد که مشتق $F^{(n)}(z)$ از $F^{(n-1)}(z)$ در یک نقطه z_2 میان z_1 و z_2 صفر می‌شود و در نتیجه داریم $H_n(z_2) = 0$. به علاوه، چون $F^{(n-1)}(z)$ هنگامی که $z \rightarrow +\infty$ و $z \rightarrow -\infty$ صفر می‌شود، $F^{(n)}(z)$ و $H_n(z)$ دست کم دارای n صفر حقیقی می‌باشند [و نه بیشتر، زیرا $H_n(z)$ از درجه n است] که در میان آنها صفرهای $H_{n-1}(z)$ جای دارند.

(ب) تابع مولد

تابعی از z و λ را به شکل

$$F(z + \lambda) = e^{-(z+\lambda)^r} \quad (۸)$$

در نظر بگیریم. طبق دستور تیلور می‌نویسیم

$$\begin{aligned} F(z + \lambda) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} F^{(n)}(z) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} (-1)^n H_n(z) e^{-z^r} \end{aligned} \quad (۹)$$

این تساوی را در e^{z^r} ضرب می‌کنیم و λ را به $-\lambda$ تغییر می‌دهیم، خواهیم یافت

$$e^{z^r} F(z - \lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} H_n(z) \quad (۱۰)$$

یعنی، با جایگزینی $F(z - \lambda)$ به وسیلهٔ مقدار آن داریم

$$e^{-\lambda^2 + 2\lambda z} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} H_n(z) \quad (11)$$

بنابراین، چندجمله‌ای‌های هرمیت از بسط تابع $e^{-\lambda^2 + 2\lambda z}$ به سری توانهای λ به دست می‌آید. از این‌رو، این تابع را تابع مولد چندجمله‌ای‌های هرمیت می‌نامند.

رابطهٔ (۱۱) تعریف دیگری از چندجمله‌ای‌های $H_n(z)$ را به صورت زیر به دست می‌دهد

$$H_n(z) = \left\{ \frac{\partial^n}{\partial \lambda^n} e^{-\lambda^2 + 2\lambda z} \right\}_{\lambda=0} \quad (12)$$

ج) رابطه‌های بازگشتی؛ معادلهٔ دیفرانسیل

تاکنون نخستین رابطهٔ بازگشتی را، در (۶)، به دست آورده‌ایم. به سادگی می‌توان با مشتق‌گیری از برابری (۱۱)، رابطه‌های دیگری به دست آورد. در واقع، یک مشتق‌گیری نسبت به z می‌دهد

$$2\lambda e^{-\lambda^2 + 2\lambda z} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} \frac{d}{dz} H_n(z) \quad (13)$$

یعنی، با جایگزینی $e^{-\lambda^2 + 2\lambda z}$ به وسیلهٔ بسط (۱۱) و برابر نهادن عبارتهای هم توان بر حسب λ داریم

$$\frac{d}{dz} H_n(z) = 2n H_{n-1}(z) \quad (14)$$

همچنین، از (۱۱) نسبت به λ مشتق بگیریم، با استدلال مشابهی خواهیم یافت

$$H_n(z) = 2z H_{n-1}(z) - 2(n-1)H_{n-2}(z) \quad (15)$$

سرانجام، می‌توان بدون دشواری معادلهٔ دیفرانسیلی یافت که چندجمله‌ای‌های $H_n(z)$ در آن صدق کنند. در واقع با مشتق‌گیری از (۱۴) و با به کار بردن (۶)، به دست می‌آید

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dz^2} H_n(z) &= 2n \frac{d}{dz} H_{n-1}(z) \\ &= 2n[2z H_{n-1}(z) - H_n(z)] \end{aligned} \quad (16)$$

یعنی با جایگزین کردن $H_{n-1}(z)$ به وسیله مقدار آن از (۱۴)، داریم

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} - 2z \frac{d}{dz} + 2n \right] H_n(z) = 0 \quad (17)$$

(د) مثالها

تعریف (۷)، یا به دیگر سخن، رابطه بازگشتی (۶) امکان می‌دهد تا نخستین چند جمله‌ایهای هرمیت را به دست آوریم

$$\begin{aligned} H_0(z) &= 1 \\ H_1(z) &= 2z \\ H_2(z) &= 4z^2 - 2 \\ H_3(z) &= 8z^3 - 12z \end{aligned} \quad (18)$$

به طور کلی

$$H_n(z) = \left(2z - \frac{d}{dz} \right)^n 1 \quad (19)$$

۲. ویژه‌تابعهای هامیلتونی نوسانگر هماهنگ

الف) تابع مولد

تابع

$$K(\lambda, x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} \lambda^n \langle x | \varphi_n \rangle \quad (20)$$

را در نظر بگیریم. با به کار بردن رابطه [رابطه (۵-۷۶)]

$$| \varphi_n \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n | \varphi_0 \rangle \quad (21)$$

خواهیم یافت

$$K(\lambda, x) = \sum_{n=0}^{\infty} \langle x | \frac{(\lambda a^\dagger)^n}{n!} | \varphi_0 \rangle$$

$$= \langle x | e^{\lambda a^\dagger} | \varphi_0 \rangle \quad (22)$$

همانند فصل ۵، عملگر بی‌بعد \hat{X} و \hat{P} را به صورت

$$\begin{cases} \hat{X} = \beta X \\ \hat{P} = \frac{P}{\beta \hbar} \end{cases} \quad (23)$$

که در آن پارامتر β دارای بُعد وارون طول است و با رابطه

$$\beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \quad (24)$$

تعریف می‌شود، در نظر بگیریم. عملگر

$$e^{\lambda a^\dagger} = e^{\lambda/\sqrt{\hbar}(\hat{X} - i\hat{P})} \quad (25)$$

را می‌توان با به‌کار بردن فرمول (۶۳) از مکمل B_{II} که در آن قرار داده‌ایم

$$\begin{cases} A = \frac{\lambda}{\sqrt{\hbar}} \hat{X} \\ B = -\frac{i\lambda}{\sqrt{\hbar}} \hat{P} \end{cases} \quad (26)$$

محاسبه کرد. خواهیم یافت

$$e^{\lambda a^\dagger} = e^{(\lambda/\sqrt{\hbar})\hat{X}} e^{-(i\lambda/\sqrt{\hbar})\hat{P}} e^{(i/\hbar)\lambda^2[\hat{X}, \hat{P}]}$$

$$= e^{(\lambda/\sqrt{\hbar})\hat{X}} e^{-(i\lambda/\sqrt{\hbar})\hat{P}} e^{-\lambda^2/\hbar} \quad (27)$$

با بردن این نتیجه در (۲۲)، به‌دست می‌آید

$$K(\lambda, x) = e^{-\lambda^2/\hbar} \langle x | e^{(\lambda/\sqrt{\hbar})\hat{X}} e^{-(i\lambda/\sqrt{\hbar})\hat{P}} | \varphi_0 \rangle$$

$$= e^{-\lambda^2/\hbar} e^{\beta\lambda x/\sqrt{\hbar}} \langle x | e^{(-i\lambda/\sqrt{\hbar})P/\beta\hbar} | \varphi_0 \rangle \quad (28)$$

اما داریم [مکمل E_{II}، فرمول (۱۵)]

$$\langle x | e^{-i\lambda P/(\beta\hbar\sqrt{2})} = \langle x - \lambda/\beta\sqrt{2} | \quad (29)$$

و (۲۸) نوشته می‌شود

$$\begin{aligned} K(\lambda, x) &= e^{-\lambda^2/2} e^{\beta\lambda x/\sqrt{2}} \langle x - \lambda/\beta\sqrt{2} | \varphi_0 \rangle \\ &= e^{-\lambda^2/2} e^{\beta\lambda x/\sqrt{2}} \varphi_0(x - \lambda/\beta\sqrt{2}) \end{aligned} \quad (30)$$

اگر فرمول (۵-۸۸) را به‌کار ببریم، سرانجام به‌دست می‌آید

$$K(\lambda, x) = \left(\frac{\beta^2}{\pi}\right)^{1/2} \exp\left\{-\frac{\beta^2 x^2}{2} + \beta\lambda x\sqrt{2} - \frac{\lambda^2}{2}\right\} \quad (31)$$

بنابر تعریف (۲۰)، برای به‌دست آوردن تابع موجهای $\varphi_n(x) = \langle x | \varphi_n \rangle$ کافی است عبارت اخیر را، برحسب توانهای λ بسط داد

$$K(\lambda, x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} \varphi_n(x) \quad (32)$$

$K(\lambda, x)$ تابع مولد تابعهای $\varphi_n(x)$ نامیده می‌شود.

ب) $\varphi_n(x)$ برحسب چندجمله‌ایهای هرمیت

در رابطه (۱۱)، $\lambda/\sqrt{2}$ را جایگزین λ و β_x را جایگزین z می‌کنیم، به‌دست می‌آوریم

$$\exp\left\{-\frac{\lambda^2}{2} + \beta\lambda x\sqrt{2}\right\} = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\right)^n \frac{1}{n!} H_n(\beta x) \quad (33)$$

این عبارت را در (۳۱) قرار می‌دهیم

$$K(\lambda, x) = \left(\frac{\beta^2}{\pi}\right)^{1/2} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\right)^n \frac{1}{n!} e^{-\beta^2 x^2/2} H_n(\beta x) \quad (34)$$

از برابر گذاردن ضریب‌های توان‌های مختلف λ در رابطه‌های (۳۲)، و (۳۴)، به دست خواهیم آورد

$$\varphi_n(x) = \left(\frac{\beta^2}{\pi}\right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\beta^2 x^2/2} H_n(\beta x) \quad (35)$$

بنابراین روند تابع موج همانند روند مشتق مرتبه n تابع گاوسی $F(x)$ است که در بخش یک پیشین دیده شد. $\varphi_n(x)$ با پاریته $(-1)^n$ بوده و دارای n صفر است که در میان صفرهای $\varphi_{n+1}(x)$ جای دارند. در بخش ۵-۳-۲ دیدیم که این خاصیت در ارتباط با زیاد شدن انرژی جنبشی میانگین حالت‌های $\langle \varphi_n |$ به هنگام افزایش n است.

ج) رابطه‌های بازگشتی

معادله‌های

$$\begin{cases} a | \varphi_n \rangle = \sqrt{n} | \varphi_{n-1} \rangle \\ a^\dagger | \varphi_n \rangle = \sqrt{n+1} | \varphi_{n+1} \rangle \end{cases} \quad (36)$$

را در نمایش $\{|x\rangle\}$ می‌نویسیم. با به کار بردن تعریف‌های a و a^\dagger [رابطه‌های (۵-۲۵)]، دیده می‌شود که در نمایش $\{|x\rangle\}$ ، اثر این عملگرها توسط

$$\begin{aligned} a &\Rightarrow \frac{\beta}{\sqrt{2}} \left[x + \frac{1}{\beta^2} \frac{d}{dx} \right] \\ a^\dagger &\Rightarrow \frac{\beta}{\sqrt{2}} \left[x - \frac{1}{\beta^2} \frac{d}{dx} \right] \end{aligned} \quad (37)$$

داده می‌شود. بنابراین، معادله‌های (۳۶) به شکل زیر درمی‌آیند

$$\begin{cases} \frac{\beta}{\sqrt{2}} \left[x + \frac{1}{\beta^2} \frac{d}{dx} \right] \varphi_n(x) = \sqrt{n} \varphi_{n-1}(x) \\ \frac{\beta}{\sqrt{2}} \left[x - \frac{1}{\beta^2} \frac{d}{dx} \right] \varphi_n(x) = \sqrt{n+1} \varphi_{n+1}(x) \end{cases} \quad (38)$$

مجموع و تفاضل این معادله‌ها را به دست می‌آوریم

$$\begin{cases} x\beta\sqrt{2}\varphi_n(x) = \sqrt{n}\varphi_{n-1}(x) + \sqrt{n+1}\varphi_{n+1}(x) \end{cases} \quad (39)$$

$$\begin{cases} \sqrt{2} \frac{d}{dx} \varphi_n(x) = \sqrt{n}\varphi_{n-1}(x) - \sqrt{n+1}\varphi_{n+1}(x) \end{cases} \quad (40)$$

یادداشت:

اگر عبارتهای $\varphi_n(x)$ را که با (۳۵) داده شده است در (۳۹) و (۴۰) بگذاریم، پس از ساده کردن (اگر قرار دهیم $\hat{x} = \beta x$) خواهیم یافت

$$2\hat{x}H_n(\hat{x}) = 2n H_{n-1}(\hat{x}) + H_{n+1}(\hat{x}) \quad (41)$$

$$2 \left[-\hat{x}H_n(\hat{x}) + \frac{d}{d\hat{x}} H_n(\hat{x}) \right] = 2n H_{n-1}(\hat{x}) - H_{n+1}(\hat{x}) \quad (42)$$

■ از جمع و تفریق این دو معادله، رابطه‌های (۶) و (۱۴) بخش ۱ به دست می‌آیند.

مراجع

Messiah (1.17), App. B, §III

Arfken (10.4), chap. 13, §1

Angot (10.2), §7.8.

مکمل ۳

حل معادله ویژه مقدار نوسانگر هماهنگ به روش چندجمله‌ای

۱. تغییر تابع و متغیر

۲. روش چندجمله‌ای

الف) شکل مجانبی $\hat{\varphi}(\hat{x})$

ب) محاسبه $h(\hat{x})$ به شکل بسط سری

ج) کوانتس انرژی

د) توابع موج مانا

روشی که در بخش ۲-۵ امکان داد تا انرژی حالت‌های مانای $(\varphi_n | \varphi_n)$ نوسانگر هماهنگ را محاسبه کنیم، بر پایه کار بست عملگرهای a ، a^\dagger ، و N و رابطه‌های جابه‌جایی آنها استوار است. همچنین، می‌توان همین نتایج را به شیوه‌ای کاملاً مختلف از حل معادله ویژه مقدار هامیلتونی H در نمایش $\{|x\rangle\}$ ، به دست آورد. این همان است که در این مکمل انجام خواهیم داد.

۱. تغییر تابع و متغیر

در نمایش $\{|x\rangle\}$ ، معادله ویژه مقدار H می‌شود

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right] \varphi(x) = E \varphi(x) \quad (1)$$

همانند فصل ۵، عملگرهای بی‌بعد \hat{X} و \hat{P} را توسط

$$\begin{cases} \hat{X} = \beta \hat{x} \\ \hat{P} = \frac{P}{\beta \hbar} \end{cases} \quad (2)$$

وارد می‌کنیم که در آن پارامتر β دارای بعد و ارون طول است و به صورت زیر تعریف می‌شود

$$\beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \quad (3)$$

ویژه بردار \hat{X} با ویژه مقدار \hat{x} را $|\xi_{\hat{x}}\rangle$ می‌نامیم

$$\hat{X} |\xi_{\hat{x}}\rangle = \hat{x} |\xi_{\hat{x}}\rangle \quad (۴)$$

رابطه‌های راست‌هنجار و بستاری کتهای $|\xi_{\hat{x}}\rangle$ می‌شوند

$$\langle \xi_{\hat{x}} | \xi_{\hat{x}'} \rangle = \delta(\hat{x} - \hat{x}') \quad (۵)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\hat{x} |\xi_{\hat{x}}\rangle \langle \xi_{\hat{x}}| = 1 \quad (۶)$$

روشن است که کیت $|\xi_{\hat{x}}\rangle$ ویژه بردار X با ویژه مقدار \hat{x}/β است. هنگامی که داشته باشیم

$$\hat{x} = \beta x \quad (۷)$$

کتهای $|x\rangle$ و $|\xi_{\hat{x}}\rangle$ متناسب‌اند، ولی با وجود این، برابر نیستند. در واقع، رابطه بستاری را برای کتهای $|x\rangle$ می‌نویسیم

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \langle x| = 1 \quad (۸)$$

اگر در این انتگرال تغییر متغیری را که در (۷) داده شده است انجام دهیم، خواهیم یافت

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\hat{x}}{\beta} |x = \hat{x}/\beta\rangle \langle x = \hat{x}/\beta| = 1 \quad (۹)$$

مقایسه با (۶) نشان می‌دهد که می‌توان مثلاً قرار داد

$$|x = \hat{x}/\beta\rangle = \sqrt{\beta} |\xi_{\hat{x}}\rangle \quad (۱۰)$$

تا آنکه همچون کتهای $|x\rangle$ که نسبت به x راست‌هنجار هستند، کتهای $|\xi_{\hat{x}}\rangle$ نیز نسبت به \hat{x} چنین باشند.

$|\varphi\rangle$ را یک کت دلخواه، $\varphi(x) = \langle x | \varphi \rangle$ را تابع موج آن در نمایش $\{|x\rangle\}$ ، و $\hat{\varphi}(\hat{x}) = \langle \hat{x} | \varphi \rangle$ را تابع موج آن در نمایش $\{|\xi_{\hat{x}}\rangle\}$ می‌گیریم. بنابر (۱۰) داریم

$$\hat{\varphi}(\hat{x}) = \langle \xi_{\hat{x}} | \varphi \rangle = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \langle x = \hat{x}/\beta | \varphi \rangle \quad (۱۱)$$

یعنی

$$\hat{\varphi}(\hat{x}) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \varphi(x = \hat{x}/\beta) \quad (12)$$

اگر $\langle \varphi | \varphi \rangle$ بهنجار باشد، رابطه (۸) می‌دهد

$$\langle \varphi | \varphi \rangle = \langle \varphi | \left(\int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \langle x| \right) | \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x) \varphi(x) dx = 1 \quad (13)$$

رابطه (۶) می‌دهد

$$\langle \varphi | \varphi \rangle = \langle \varphi | \left(\int_{-\infty}^{+\infty} d\hat{x} |\xi_{\hat{x}}\rangle \langle \xi_{\hat{x}}| \right) | \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\varphi}^*(\hat{x}) \hat{\varphi}(\hat{x}) d\hat{x} = 1 \quad (14)$$

بنابراین، تابع موج $\varphi(x)$ نسبت به متغیر x و تابع موج $\hat{\varphi}(\hat{x})$ نسبت به متغیر \hat{x} بهنجار است [وانگهی می‌توان آن را با انجام تغییر متغیر (۷) در انتگرال (۱۳) و با به‌کار بستن رابطه (۱۲) مستقیماً دریافت].

اکنون، (۷) و (۱۲) را در (۱) می‌بریم، خواهیم یافت

$$\frac{1}{2} \left[-\frac{d^2}{d\hat{x}^2} + \hat{x}^2 \right] \hat{\varphi}(\hat{x}) = \varepsilon \hat{\varphi}(\hat{x}) \quad (15)$$

که در آن

$$\varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega} \quad (16)$$

کار با معادله (۱۵) ساده‌تر از معادله (۱) است. در واقع، همه کمیت‌های آن بی‌بعد هستند.

۲. روش چندجمله‌ای

الف) شکل مجانبی $\hat{\varphi}(\hat{x})$

معادله (۱۵) را می‌توان چنین نوشت

$$\left[\frac{d^2}{d\hat{x}^2} - (\hat{x}^2 - 2\varepsilon) \right] \hat{\varphi}(\hat{x}) = 0 \quad (17)$$

سعی می‌کنیم رفتار $\hat{\varphi}(\hat{x})$ را، هنگامی که \hat{x} بسیار بزرگ است، به دست آوریم. برای این کار، تابعهای زیر را در نظر می‌گیریم

$$G_{\pm}(\hat{x}) = e^{\pm \hat{x}^2/2} \quad (18)$$

این تابعها پاسخ معادله‌های دیفرانسیلی

$$\left[\frac{d^2}{d\hat{x}^2} - (\hat{x}^2 \pm 1) \right] G_{\pm}(\hat{x}) = 0 \quad (19)$$

هستند. هنگامی که \hat{x} به بینهایت میل می‌کند، داریم

$$\hat{x}^2 \pm 1 \sim \hat{x}^2 \sim \hat{x}^2 - 2\varepsilon \quad (20)$$

و معادله‌های (۱۷) و (۹) به‌طور مجانبی به یک شکل درمی‌آیند. بنابراین، انتظار می‌رود که رفتار پاسخهای معادله (۱۷)، برای \hat{x} بزرگ یا به‌صورت $e^{\hat{x}^2/2}$ یا همچون $e^{-\hat{x}^2/2}$ باشد.^۱ از دیدگاه فیزیکی، تنها تابعهای $\hat{\varphi}(\hat{x})$ در همه جا کراندار مورد نظر ماست، یعنی پاسخهای (۱۷) که، اگر وجود داشته باشد، رفتار آنها همچون $e^{\hat{x}^2/2}$ باشد. از این‌روست که می‌گذاریم

$$\hat{\varphi}(\hat{x}) = e^{-\hat{x}^2/2} h(\hat{x}) \quad (21)$$

(۲۱) را در (۱۷) می‌بریم، به دست می‌آید

$$\frac{d^2}{d\hat{x}^2} h(\hat{x}) - 2\hat{x} \frac{d}{d\hat{x}} h(\hat{x}) + (2\varepsilon - 1)h(\hat{x}) = 0 \quad (22)$$

نشان خواهیم داد که چگونه می‌توان این معادله را با بسط $h(\hat{x})$ به‌سری توانی حل کرد، سپس به پاسخهای آن این شرط را اعمال می‌کنیم که به‌طور فیزیکی قابل قبول باشند.

ب) محاسبه $h(\hat{x})$ به‌شکل بسط سری

همان‌طور که در بخش ۵-۱-۳ گوسزد کردیم پاسخهای معادله (۱) را [یا معادله (۱۷)] را که به یک نتیجه می‌انجامد می‌توان در میان تابعهایی جستجو کرد که یا زوج یا فرد باشند. چون تابع $e^{-\hat{x}^2/2}$

۱. پاسخهای معادله (۱۷) هنگامی که $\hat{x} \rightarrow \infty$ الزاماً هم‌ارز با $e^{\hat{x}^2/2}$ یا $e^{-\hat{x}^2/2}$ نیستند. دلایلی که داده شد این امکان را رد نمی‌کند که $\hat{\varphi}(\hat{x})$ می‌تواند برابر با حاصلضرب $e^{\hat{x}^2/2}$ یا $e^{-\hat{x}^2/2}$ در توانی از \hat{x} باشد.

زوج است، می‌توان گذارد

$$h(\hat{x}) = \hat{x}^p (a_0 + a_1 \hat{x}^1 + a_2 \hat{x}^2 + \dots + a_{2m} \hat{x}^{2m} + \dots) \quad (23)$$

با $a_0 \neq 0$ بنا بر تعریف نخستین جمله غیر صفر بسط است) (۲۳) را بدین صورت بنویسیم

$$h(\hat{x}) = \sum_{m=0}^{\infty} a_{2m} \hat{x}^{2m+p} \quad (24)$$

به آسانی به دست می‌آید

$$\frac{d}{d\hat{x}} h(\hat{x}) = \sum_{m=0}^{\infty} (2m+p) a_{2m} \hat{x}^{(2m+p-1)} \quad (25)$$

و

$$\frac{d^2}{d\hat{x}^2} h(\hat{x}) = \sum_{m=0}^{\infty} (2m+p)(2m+p-1) a_{2m} \hat{x}^{(2m+p-2)} \quad (26)$$

اکنون عبارتهای (۲۴)، (۲۵)، و (۲۶) را در (۲۲) می‌بریم. برای آنکه معادله به دست آمده برقرار باشد، باید بسط به سری طرف نخست جمله به جمله برابر صفر باشد. این شرط برای جمله عمومی بر حسب \hat{x}^{2m+p} می‌شود

$$(2m+p+2)(2m+p+1) a_{2m+2} = (4m+2p-2\varepsilon+1) a_{2m} \quad (27)$$

جمله دارای کمترین درجه بر حسب \hat{x}^{p-2} است و ضریب آن در صورتی صفر است که داشته باشیم

$$p(p-1) a_0 = 0 \quad (28)$$

چون a_0 صفر نیست، یا $p=0$ است [که در این صورت تابع $\varphi(x)$ زوج است] و یا $p=1$ [که در این صورت تابع $\varphi(x)$ فرد است].

تساوی (۲۸) را می‌توان چنین نوشت

$$a_{\nu m+\nu} = \frac{\nu m + \nu p + 1 - 2\varepsilon}{(\nu m + p + 2)(\nu m + p + 1)} a_{\nu m} \quad (29)$$

که یک رابطه بازگشتی میان ضریبهای $a_{\nu m}$ است. در واقع، چون a_0 صفر نیست معادله (۲۹) امکان می‌دهد تا a_{ν} برحسب a_0 ، a_2 برحسب a_{ν} و غیره محاسبه شود.

بنابراین، برای ε دلخواه، بسط سری، دو پاسخ به‌طور خطی مستقل معادله (۲۲) را که به ترتیب با $p = 1$ و $p = 0$ متناظر هستند، می‌شناسیم.

ج) کوانتس انرژی

اکنون باید، از میان پاسخهای به‌دست آمده در بخش پیشین آنهایی را برگزینیم که از شرط فیزیکی همه جا کراندار بودن $\hat{\psi}(\hat{x})$ پیروی کنند.

برای بسیاری از اندازه‌های ε ، صورت کسر (۲۹)، برای هیچ عدد درست m مثبت یا صفر نمی‌شود. هیچ‌یک از $a_{\nu m}$ ها در این صورت صفر نمی‌شود و سری شامل شمار نامحدودی جمله است.

می‌توان نشان داد که رفتار مجانبی این سری آن‌را از دیدگاه فیزیکی غیرقابل پذیرش می‌سازد. در واقع از (۲۹) پیداست که

$$\frac{a_{\nu m+\nu}}{a_{\nu m}} \underset{m \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{m} \quad (30)$$

وانگهی، بسط سری تابع $e^{\lambda \hat{x}^{\nu}}$ را (که در آن λ پارامتر حقیقی است) در نظر می‌گیریم

$$e^{\lambda \hat{x}^{\nu}} = \sum_{m=0}^{\infty} b_{\nu m} \hat{x}^{\nu m} \quad (31)$$

با

$$b_{\nu m} = \frac{\lambda^m}{m!} \quad (32)$$

بنابراین، برای این سری دوم داریم

$$\frac{b_{\nu m+\nu}}{b_{\nu m}} = \frac{m!}{(m+1)!} \frac{\lambda^{m+1}}{\lambda^m} = \frac{\lambda}{m+1} \underset{m \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\lambda}{m} \quad (33)$$

اگر اندازه پارامتر λ را چنان برگزینیم که داشته باشیم

$$0 < \lambda < 1 \quad (34)$$

از (۳۰) و (۳۳) پیداست که یک عدد درست M به گونه‌ای وجود دارد که شرط $m > M$ نتیجه می‌دهد

$$\frac{a_{2m+2}}{a_{2m}} > \frac{b_{2m+2}}{b_{2m}} > 0 \quad (35)$$

از این رابطه می‌توان نتیجه گرفت که، هرگاه شرط (۳۴) برقرار باشد، داریم

$$|\hat{x}^{-p}h(\hat{x}) - P(\hat{x})| \geq \left| \frac{a_{2M}}{b_{2M}} \right| |e^{\lambda \hat{x}^2} - Q(\hat{x})| \quad (36)$$

که در آن $P(\hat{x})$ و $Q(\hat{x})$ چند جمله‌ایهای درجه $2M$ هستند که با $M+1$ جمله نخست سریهای (۲۳) و (۳۱) داده می‌شوند. هنگامی که \hat{x} به بینهایت میل می‌کند، (۳۶) می‌دهد

$$|h(\hat{x})| \geq \left| \frac{a_{2M}}{b_{2M}} \right| \hat{x}^p e^{\lambda \hat{x}^2} \quad (37)$$

و بنابراین

$$|\hat{\varphi}(\hat{x})| \geq \left| \frac{a_{2M}}{b_{2M}} \right| \hat{x}^p e^{(\lambda-1/2)\hat{x}^2} \quad (38)$$

چون λ را می‌توان چنان برگزید که

$$1/2 < \lambda < 1 \quad (39)$$

$|\hat{\varphi}(\hat{x})|$ هنگامی که $\hat{x} \rightarrow \infty$ ، کراندار نیست. بنابراین باید جوابی را که مفهوم فیزیکی ندارد کنار بگذاریم.

تنها یک امکان باقی می‌ماند و آن این است که صورت (۲۹) برای یک اندازه m_0 از m صفر شود. در این صورت داریم

$$\begin{cases} a_{2m} \neq 0, & \text{اگر } m \leq m_0 \text{ باشد,} \\ a_{2m} = 0, & \text{اگر } m > m_0 \text{ باشد,} \end{cases} \quad (40)$$

و بسط سری $h(\hat{x})$ به یک چندجمله‌ای درجه $p + 2m_0$ می‌انجامد. رفتار $\hat{\varphi}(\hat{x})$ در این صورت با تابع نمایی $e^{-\hat{x}^2/2}$ داده می‌شود، و $\hat{\varphi}(\hat{x})$ از دید فیزیکی قابل قبول است (این تابع مجذور انتگرال پذیر است).

صفرشدن (۲۹) برای $m = m_0$ ایجاب می‌کند که

$$2\varepsilon = 2(2m_0 + p) + 1 \quad (41)$$

اگر قرار دهیم

$$2m_0 + p = n \quad (42)$$

معادله (۴۱) نوشته می‌شود

$$\varepsilon = \varepsilon_n = n + 1/2 \quad (43)$$

که در آن n عدد درست دلخواه یا صفر است (زیرا m یک عدد درست مثبت دلخواه یا صفر و p برابر با صفر یا یک است). شرط (۴۳) کوانتس انرژی نوسانگر هماهنگ را وارد می‌کند. در واقع از این شرط به دست می‌آید [معادله (۱۶)]

$$E_n \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad (44)$$

بنابراین، رابطه (۵۳-۵) را باز می‌یابیم.

د) توابع موج مانا

روش چندجمله‌ای همچنین، ویژه‌تابع‌های وابسته به انرژی‌های مختلف E_n را بدین صورت به دست می‌دهد

$$\hat{\varphi}_n(\hat{x}) = e^{-\hat{x}^2/2} h_n(\hat{x}) \quad (45)$$

که در آن $h(\hat{x})$ یک چندجمله‌ای درجه n است. بنابر (۲۳) و (۲۴)، $h_n(x)$ یک تابع زوج است هرگاه n زوج باشد و فرد است هرگاه n فرد باشد.

حالت پایه برای $n = 0$ ، یعنی $m_0 = p = 0$ به دست می آید. $h_0(\hat{x})$ در این صورت یک ثابت است و

$$\hat{\varphi}_0(\hat{x}) = a_0 e^{-\hat{x}^2/2} \quad (46)$$

یک محاسبه ساده نشان می دهد که برای بهنجار کردن $\hat{\varphi}_0(\hat{x})$ نسبت به متغیر \hat{x} ، کافی است انتخاب کنیم

$$a_0 = \pi^{-1/2} \quad (47)$$

سپس، با به کار بستن (۱۲)، به دست می آید

$$\varphi_0(x) = \left(\frac{\beta^2}{\pi}\right)^{1/2} e^{-\beta^2 x^2/2} \quad (48)$$

که همان عبارتی است که در این فصل داده شد [فرمول (۵-۱۸۸)].

نخستین حالت برانگیخته $E_1 = 3\hbar\omega/2$ ، متناظر است با $n = 1$ ، یعنی $m = 1$ ، $p = 1$. در این صورت، تنها دارای یک جمله است و با محاسبه ای مشابه محاسبه پیشین به دست می آید

$$\begin{cases} \hat{\varphi}_1(\hat{x}) = \left(\frac{4}{\pi}\right)^{1/2} \hat{x} e^{-\hat{x}^2/2} \\ \varphi_1(x) = \left(\frac{4\beta^2}{\pi}\right)^{1/2} x e^{-\beta^2 x^2/2} \end{cases} \quad (49)$$

برای $n = 2$ داریم $m_0 = 1$ و $p = 0$. در این صورت، رابطه (۲۹) می دهد

$$a_2 = -2a_0 \quad (50)$$

که سرانجام می انجامد به

$$\begin{cases} \hat{\varphi}_2(\hat{x}) = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2} (2\hat{x}^2 - 1)e^{-\hat{x}^2/2} \\ \varphi_2(x) = \left(\frac{\beta^2}{4\pi}\right)^{1/2} (2\beta^2 x^2 - 1)e^{-\beta^2 x^2/2} \end{cases} \quad (51)$$

برای n دلخواه $h_n(\hat{x})$ پاسخ چندجمله‌ای معادله (۲۲) است. این معادله، با توجه به شرط کوانتشن (۲۳)، نوشته می‌شود

$$\left[\frac{d^2}{d\hat{x}^2} - 2\hat{x} \frac{d}{d\hat{x}} + 2n \right] h(\hat{x}) = 0 \quad (52)$$

دیده می‌شود که (۵۲) معادله دیفرانسیلی است که چندجمله‌ای هرمیت $H_n(\hat{x})$ در آن صدق می‌کند [معادله (۱۷) از مکمل ۲ همین فصل را ببینید]. بنابراین، چندجمله‌ای $h_n(\hat{x})$ متناسب است با $H_n(\hat{x})$ که ضریب تناسب، با بهنجار کردن $\hat{\varphi}(\hat{x})$ مشخص می‌شود. این امر با فرمول (۳۵) مکمل ۲ از همین فصل توافق دارد.

مراجع

رفتار ریاضی معادلات دیفرانسیلی:

Morse and Feshbach (10.13), chaps, 5 and 6;

Courant and Hilbert (10.11), §V-11.

مکمل ۴

مطالعهٔ حالت‌های مانا در نمایش $\{|p\rangle\}$

۱. توابع موج در فضای تکانه

الف) تغییر متغیر و تابع

ب) تعیین $\hat{\varphi}_n(\hat{p})$

ج) محاسبهٔ ضریب فاز

۲. بحث

توزیع تکانه‌های ممکن یک ذره در حالت $|\varphi_n\rangle$ با تابع موج $\hat{\varphi}_n(p)$ در نمایش $\{|p\rangle\}$ داده می‌شود، که تبدیل فوریه تابع موج $\varphi_n(x)$ در نمایش $\{|x\rangle\}$ است. در این مکمل نشان خواهیم داد که در مورد نوسانگر هماهنگ تابع موجهای φ_n و $\bar{\varphi}_n$ (با تقریب ضرایب ضربی) یکسان هستند. به‌گونه‌ای که، در یک حالت مانا، توزیع احتمال برای تکانه مشابه با توزیع برای مکان است.

۱. توابع موج در فضای تکانه

الف) تغییر متغیر و تابع

در مکمل ۳ همین فصل برای سادگی، عملگر

$$\hat{X} = \beta X \quad (1)$$

را وارد کردیم که در آن

$$\beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \quad (2)$$

همچنین ویژه‌کتهای $|\xi_{\pm}\rangle$ عملگر \hat{X} و تابع موج $\hat{\varphi}(\hat{x})$ را در نمایش $\{|\xi_{\pm}\rangle\}$ وارد کردیم. اکنون همان کار را برای عملگر انجام خواهیم داد

$$\hat{P} = \frac{P}{\beta\hbar} \quad (3)$$

پس این ویژه‌کتهای \hat{P} را $|\pi_{\hat{p}}\rangle$ می‌نامیم

$$\hat{P} |\pi_{\hat{p}}\rangle = \hat{p} |\pi_{\hat{p}}\rangle \quad (۴)$$

و تابع موج را درنمایش $\{|\pi_{\hat{p}}\rangle\}$ با $\hat{\varphi}(\hat{p})$ نشان می‌دهیم

$$\hat{\varphi}(\hat{p}) = \langle \pi_{\hat{p}} | \varphi \rangle \quad (۵)$$

همان‌طور که کیت $|\xi_{\hat{x}}\rangle$ با کیت $|x = \hat{x}/\beta\rangle$ متناسب است، کیت $|\pi_{\hat{p}}\rangle$ با کیت $|p = \beta\hbar\hat{p}\rangle$ متناسب است. اگر β را به $1/\beta\hbar$ تغییر دهیم [معادله‌های (۱) و (۳)]، رابطه (۱۰) از مکمل ۳ همین فصل نشان می‌دهد که

$$|\pi_{\hat{p}}\rangle = \sqrt{\beta\hbar} |p = \beta\hbar\hat{p}\rangle \quad (۶)$$

بنابراین، تابع موج $\hat{\varphi}(\hat{p})$ در نمایش $\{|\pi_{\hat{p}}\rangle\}$ با تابع موج $\bar{\varphi}(p)$ در نمایش $\{|p\rangle\}$ توسط

$$\hat{\varphi}(\hat{p}) = \sqrt{\beta\hbar} \bar{\varphi}(p = \beta\hbar\hat{p}) \quad (۷)$$

مرتبط می‌شود. از طرفی، می‌توان (۶) و رابطه (۱۰) از مکمل ۳ همین فصل را به‌کار برد و نتیجه گرفت

$$\langle \xi_{\hat{x}} | \pi_{\hat{p}} \rangle = \frac{e^{i\hat{p}\hat{x}}}{\sqrt{2\pi}} \quad (۸)$$

در نتیجه، با به‌کار بردن تعریف (۵) و رابطه بستاری روی پایه $\{|\xi_{\hat{x}}\rangle\}$ داریم

$$\begin{aligned} \hat{\varphi}(\hat{p}) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \pi_{\hat{p}} | \xi_{\hat{x}} \rangle \langle \xi_{\hat{x}} | \varphi \rangle d\hat{x} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\hat{p}\hat{x}} \hat{\varphi}(\hat{x}) d\hat{x} \end{aligned} \quad (۹)$$

بنابراین، تابع $\hat{\varphi}$ تبدیل فوریه $\hat{\varphi}$ است.

ب) تعیین $\hat{\varphi}_n(\hat{p})$

دیدیم [معادله (۱۵)] از مکمل ۳ همین فصل که تابع موج‌های مانای $\hat{\varphi}(\hat{x})$ نوسانگر هماهنگ از معادله

$$\frac{1}{2} \left[-\frac{d^2}{d\hat{x}^2} + \hat{x}^2 \right] \hat{\varphi}(\hat{x}) = \varepsilon \hat{\varphi}(\hat{x}) \quad (10)$$

پیروی می‌کنند اما، تبدیل فوریه $[d^2/d\hat{x}^2]\hat{\varphi}(\hat{x})$ برابر با $-\hat{p}^2\hat{\varphi}(\hat{p})$ و از آن $\hat{x}^2\hat{\varphi}(\hat{x})$ برابر $[-d^2/d\hat{p}^2]\hat{\varphi}(\hat{p})$ است. بنابراین معادله (۱۰) با تبدیل فوریه می‌شود

$$\frac{1}{2} \left[\hat{p}^2 - \frac{d^2}{d\hat{p}^2} \right] \hat{\varphi}(\hat{p}) = \varepsilon \hat{\varphi}(\hat{p}) \quad (11)$$

اگر معادله‌های (۱۰) و (۱۱) را مقایسه کنیم، می‌بینیم که تابع‌های $\hat{\varphi}_n$ و $\hat{\varphi}_n$ از معادله دیفرانسیل یکسانی پیروی می‌کنند. چون افزون بر آن می‌دانیم که این معادله هنگامی که $\varepsilon = n + 1/2$ باشد (با n عدد مثبت درست یا صفر)، دارای تنها یک پاسخ مجذور انتگرال‌پذیر است (ویژه‌مقدارهای ε_n غیرمغشوش‌اند، بخش ۵-۲-۳ را ببینید)، می‌توانیم نتیجه بگیریم که $\hat{\varphi}_n$ و $\hat{\varphi}_n$ متناسب هستند. چون این دو تابع بهنجارند، ضریب تناسب عدد مختلطی با مدول یک است به‌گونه‌ای که

$$\hat{\varphi}_n(\hat{p}) = e^{i\theta_n} \hat{\varphi}_n(\hat{x} = \hat{p}) \quad (12)$$

که در آن $e^{i\theta_n}$ یک ضریب فاز است که آن را اکنون حساب خواهیم کرد.

ج) محاسبهٔ ضریب فاز

تابع موج حالت پایه توسط [مکمل ۳ همین فصل، فرمولهای (۴۶) و (۴۷)]

$$\hat{\varphi}_0(\hat{x}) = \pi^{-1/4} e^{-\hat{x}^2/2} \quad (13)$$

داده می‌شود. این یک تابع گاوسی است و بنابراین تبدیل فوریهٔ آن چنین است [پیوست ۱، تساوی (۵۰)]

$$\hat{\varphi}_0(\hat{p}) = \pi^{-1/4} e^{-\hat{p}^2/2} \quad (14)$$

که به صفر بودن θ_0 می‌انجامد.

برای به دست آوردن θ_n ، تساوی زیر را در نمایش $\{|\xi_{\hat{x}}\rangle\}$ و نمایش $\{|\pi_{\hat{p}}\rangle\}$ بنویسیم

$$a^\dagger |\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1} |\varphi_{n+1}\rangle \quad (15)$$

در نمایش $\{|\xi_{\hat{x}}\rangle\}$ ، \hat{X} و \hat{P} همچون \hat{x} و $(1/i)d/d\hat{x}$ و بنابراین a^\dagger همچون $1/\sqrt{2}(\hat{x} - d/d\hat{x})$ اثر می‌کند. در نمایش $\{|\hat{p}\rangle\}$ ، \hat{X} همچون $i d/d\hat{p}$ و \hat{P} همچون \hat{p} و بنابراین a^\dagger همچون $(i/\sqrt{2})(d/d\hat{p} - \hat{p})$ اثر می‌کند. بنابراین، در نمایش $\{|\xi_{\hat{x}}\rangle\}$ ، تساوی (۱۵) می‌شود

$$\hat{\varphi}_{n+1}(\hat{x}) = \frac{1}{\sqrt{2(n+1)}} \left(\hat{x} - \frac{d}{d\hat{x}} \right) \varphi_n(\hat{x}) \quad (16)$$

در حالی که در نمایش $\{|\pi_{\hat{p}}\rangle\}$ خواهیم یافت

$$\hat{\varphi}_{n+1}(\hat{p}) = \frac{i}{\sqrt{2(n+1)}} \left(\frac{d}{d\hat{p}} - \hat{p} \right) \hat{\varphi}_n(\hat{p}) \quad (17)$$

بنابراین داریم

$$e^{i\theta_{n+1}} = -i e^{i\theta_n} \quad (18)$$

یعنی، با دانستن $\theta_0 = 0$

$$e^{i\theta_n} = (-i)^n \quad (19)$$

بنابراین به دست می‌آوریم

$$\hat{\varphi}_n(\hat{p}) = (-i)^n \hat{\varphi}_n(\hat{x} = \hat{p}) \quad (20)$$

یا، اگر به تابعهای φ_n و $\bar{\varphi}_n$ بازگردیم

$$\bar{\varphi}_n(p) = (-i)^n \frac{1}{\beta\sqrt{\hbar}} \varphi_n \left(x = \frac{p}{\beta\hbar} \right) \quad (21)$$

۲. بحث

ذره‌ای را در حالت $|\varphi_n\rangle$ در نظر بگیریم. به‌هنگام اندازه‌گیری مختصهٔ x ذره، احتمال $\rho_n(x)dx$ وجود دارد که نتیجه‌ای میان x و $x + dx$ به‌دست آید، که در آن $\rho_n(x)$ چنین داده شده است

$$\rho_n(x) = |\varphi_n(x)|^2 \quad (22)$$

همچنین، به‌هنگام اندازه‌گیری تکانه، احتمال $\bar{\rho}_n(p)dp$ وجود دارد که نتیجه‌ای میان p و $p + dp$ به‌دست آید، با

$$\bar{\rho}_n(p) = |\bar{\varphi}_n(p)|^2 \quad (23)$$

رابطهٔ (۲۱) در این صورت می‌دهد

$$\bar{\rho}_n(p) = \int \rho_n\left(x = \frac{p}{m\omega}\right) \quad (24)$$

این تساوی نشان می‌دهد که توزیع تکانه در یک حالت مانا به‌همان صورت توزیع مکان است. به‌عنوان مثال می‌بینیم که (شکل ۵-۶)، اگر n بزرگ باشد، $\bar{\rho}_n(p)$ دارای دو قله برای اندازه‌های

$$p = \pm m\omega x_M = \pm p_M \quad (25)$$

است که در آن p_M تکانهٔ ماکزیموم ذرهٔ کلاسیکی است که در چاه پتانسیل دارای حرکتی با انرژی E_n است. استدلال مشابهی با آنچه که در انتهای بخش ۵-۳-۲ شد، امکان می‌دهد تا این نتیجه را بفهمیم: هنگامی که تکانهٔ ذرهٔ کلاسیک برابر با $\pm p_M$ است، شتاب آن صفر است (سرعتش ماناست) و اندازه‌های $\pm p_M$ ، به‌طور میانگین زمانی، محتملترین مقدار هستند. یادداشت (۱) در بخش ۵-۴-۱ دربارهٔ چگالی $\rho_n(x)$ را می‌توان به آسانی در اینجا به‌کار برد. به‌عنوان مثال، می‌توان، هنگامی که n بزرگ است، انحراف مجذوری ΔP را به‌عنوان مرتبهٔ بزرگی فاصلهٔ میان دو قله $\bar{\rho}_n(p)$ واقع در $p = \pm p_M$ به‌کار برد.

وانگهی ممکن است از شکل ۵-۶ (الف) مستقیماً دریافت چرأ، هنگامی که n بزرگ است، این مقدارهای تکانه بسیار محتمل هستند. در واقع، تابع موج آن‌گاه میان دو قله شمار بسیاری نوسان، مشابه به یک تابع سینوسی، انجام می‌دهد. این از آنجا ناشی می‌شود که معادلهٔ دیفرانسیلی

که تابع موج را می‌دهد [فرمول (۱۷-۵)] برای $E \gg m\omega^2 x^2/2$ می‌شود

$$\frac{d}{dx^2}\varphi(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi(x) \simeq 0 \quad (26)$$

که، با توجه به تعریف p_M ، می‌دهد

$$\varphi(x) \simeq A e^{ip_M \cdot x/\hbar} + A' e^{-ip_M \cdot x/\hbar} \quad (27)$$

بنابراین، تابع موج در ناحیه نسبتاً وسیعی از محور Ox (هنگامی که n بزرگ است) مشابه یک سینوسی با طول موج \hbar/p_M است. این سینوسی را می‌توان همچون مجموع دو موج رونده [معادله (۲۷)]، وابسته به تکانه‌های مختلف‌العلامه $\pm p_M$ (متناظر با رفت و بازگشت ذره در چاه پتانسیل) در نظر گرفت. بنابراین شگفت‌آور نیست که چگالی احتمال $\bar{p}_n(p)$ در نزدیکی اندازه‌های $p = \pm p_M$ بزرگ باشد.

استدلال مشابهی همچنان امکان می‌دهد تا مرتبه بزرگی حاصلضرب $\Delta X \cdot \Delta P$ را دریابیم. این حاصلضرب برابر است با [رابطه‌های (۹۸-۵)، (۹۹-۵) و (۱۰۰-۵)].

$$\Delta X \cdot \Delta P = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar = \frac{x_M \cdot p_M}{2} \quad (28)$$

هنگامی که n افزایش می‌یابد، دامنه‌های x_M و p_M افزایش می‌یابند و حاصلضرب $\Delta X \cdot \Delta P$ اندازه‌هایی بسیار بزرگتر از مقدار مینیموم $\hbar/2$ را می‌گیرد. می‌توان از خود پرسید که چرا چنین است، در حالی که در چند مثال دیدیم اگر پهنای ΔX یک تابع زیاد شود، پهنای ΔP تبدیل فوریه آن کم می‌شود. در واقع، ممکن است این مورد برای توابع $\varphi_n(x)$ رخ دهد که در بازه $-x_M < x \leq x_M$ ، که در آن بازه مقادیر غیر قابل چشمپوشی را می‌گیرند، به‌کندی تغییر کنند، و مثلاً به یک ماکزیموم یا مینیموم برسند. همین‌طور است برای اندازه‌های کوچک n که در این صورت حاصلضرب $\Delta X \cdot \Delta P$ واقعاً به اندازه مینیموم خود نزدیک می‌شود. برعکس، هنگامی که n بزرگ است تابع موجهای در بازه $-x_M \leq x \leq +x_M$ که دارای n صفر هستند، نوسانهای متعددی می‌کنند. بنابراین می‌توان بدانها طول‌موجهایی در حدود $\Delta X/n \simeq x_M/n \simeq \lambda$ نسبت داد که با تکانه‌های ذره واقع در محدوده‌ای به بعد ΔP متناظرند، و چنین داده می‌شوند

$$\Delta P \simeq \frac{\hbar}{\lambda} \simeq \frac{nh}{\Delta X} \quad (29)$$

بنابراین به خوبی دوباره می‌یابیم که

$$\Delta X \cdot \Delta P \simeq nh \quad (30)$$

وضع از نظر برخی جنبه‌ها مشابه وضعی است که در بخش ۱ مکمل A_{III} (فصل سوم، جلد اول ترجمهٔ فارسی) دربارهٔ چاه پتانسیل بینهایت یک‌بعدی، بررسی شد.

مکمل ۵

نوسانگر هماهنگ همسانگرد سه‌بعدی

۱. عملگر هامیلتونی

۲. جدا کردن متغیرها در مختصات دکارتی

۳. واگنی ترازهای انرژی

در فصل ۵، نوسانگر هماهنگ را در فضای یک‌بعدی مطالعه کردیم. در اینجا نشان خواهیم داد که چگونه می‌توان به کمک نتایج این مطالعه، نوسانگر هماهنگ را در فضای سه‌بعدی بررسی کرد.

۱. عملگر هامیلتونی

ذره بدون اسپینی به جرم m را در نظر گیریم که می‌تواند در فضای سه‌بعدی حرکت کند و تحت تأثیر نیرویی مرکزی است (یعنی نیرویی که همواره به طرف مبدأ مختصات O متوجه است) که قدر مطلق آن با فاصله ذره از نقطه O متناسب است، یعنی

$$\mathbf{F} = -k\mathbf{r} \quad (1)$$

(k ثابت مثبتی است).

این میدان نیرو از انرژی پتانسیل

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}k\mathbf{r}^2 = \frac{1}{2}m\omega^2\mathbf{r}^2 \quad (2)$$

مشتق می‌شود، که در آن بسامد زاویه‌ای ω ، همچون مورد نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی تعریف می‌شود

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (3)$$

بنابراین، تابع هامیلتونی کلاسیک چنین است

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\mathbf{r}^2 \quad (4)$$

به کمک قواعد کوانتس (فصل سوم، بخش B-۵)، عملگر هامیلتونی، بی درنگ از آن به دست می آید

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 R^2 \quad (5)$$

چون هامیلتونی H مستقل از زمان است، معادله ویژه مقدار آن را حل خواهیم کرد

$$H | \psi \rangle = E | \psi \rangle \quad (6)$$

که در آن $| \psi \rangle$ به فضای حالت‌های \mathcal{E}_r ذره‌ای تعلق دارد که در فضای سه بعدی تحول می یابد. یادداشت:

چون در واقع $V(\mathbf{r})$ فقط به فاصله $r = |\mathbf{r}|$ ذره از مبدأ بستگی دارد [و در نتیجه $V(\mathbf{r})$ در یک چرخش دلخواه بی تغییر است]، به این نوسانگر هماهنگ، همسانگرد می گویند. با این همه، محاسبات زیرین را به آسانی می توان به یک نوسانگر هماهنگ ناهمسانگرد تعمیم داد که برای آن داریم

$$V(\mathbf{r}) = \frac{m}{2} (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) \quad (7)$$

که در آن سه ثابت ω_x ، ω_y و ω_z مختلف هستند.

۲. جدا کردن متغیرها در مختصات دکارتی

یادآور می شویم که فضای حالت‌های \mathcal{E}_r را می توان (فصل دوم، بخش F) به صورت حاصلضرب تانسوری در نظر گرفت

$$\mathcal{E}_r = \mathcal{E}_x \otimes \mathcal{E}_y \otimes \mathcal{E}_z \quad (8)$$

که در آن \mathcal{E}_x فضای حالت‌های ذره‌ای است که در طول Ox جابه جا می شود، یعنی فضای وابسته به تابع موجهای $\varphi(x)$. همچنین \mathcal{E}_y و \mathcal{E}_z به طور مشابهی تعریف می شوند. اما، عبارت (۵) هامیلتونی H را می توان بدین صورت نوشت

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} (P_x^2 + P_y^2 + P_z^2) + \frac{1}{2} m \omega^2 (X^2 + Y^2 + Z^2) \\ &= H_x + H_y + H_z \end{aligned} \quad (9)$$

$$H_x = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2 \quad (10)$$

و تعریفهای مشابهی برای H_y و H_z . هامیلتونی H_x تنها تابع X و P_x است: بنابراین H_x گسترش عملگری در \mathcal{E}_x است که در واقع در \mathcal{E}_x اثر می‌کند. همچنین H_y و H_z تنها به ترتیب در \mathcal{E}_y و \mathcal{E}_z اثر می‌کنند. در \mathcal{E}_x ، H_x یک هامیلتونی نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی است. این وضع برای H_y و H_z در \mathcal{E}_y و \mathcal{E}_z نیز برقرار است.

H_x ، H_y و H_z با همدیگر جابه‌جا می‌شوند و در نتیجه هر یک از آنها با مجموعشان H نیز جابه‌جا می‌شوند. در نتیجه، می‌توان معادله ویژه مقدار (۶) را با جستجوی ویژه‌بردارهای H ، که ویژه‌بردارهای H_x ، H_y و H_z نیز هستند، حل کرد. اما، ویژه‌بردارها و ویژه‌مقدارهای H_x در \mathcal{E}_x و به همین گونه از آن H_y در \mathcal{E}_y و از آن H_z در \mathcal{E}_z را تاکنون می‌شناسیم

$$H_x | \varphi_{n_x} \rangle = \left(n_x + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega | \varphi_{n_x} \rangle; | \varphi_{n_x} \rangle \in \mathcal{E}_x \quad (11-الف)$$

$$H_y | \varphi_{n_y} \rangle = \left(n_y + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega | \varphi_{n_y} \rangle; | \varphi_{n_y} \rangle \in \mathcal{E}_y \quad (11-ب)$$

$$H_z | \varphi_{n_z} \rangle = \left(n_z + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega | \varphi_{n_z} \rangle; | \varphi_{n_z} \rangle \in \mathcal{E}_z \quad (11-ج)$$

n_x ، n_y و n_z عددهای درست مثبت یا صفر هستند. از آنجا چنین نتیجه می‌شود (فصل دوم، بخش F) که ویژه‌حالت‌های مشترک میان H_x ، H_y ، H_z و H بدین صورت هستند

$$| \psi_{n_x, n_y, n_z} \rangle = | \varphi_{n_x} \rangle | \varphi_{n_y} \rangle | \varphi_{n_z} \rangle \quad (12)$$

بنابر معادله‌های (۹) و (۱۱) داریم

$$H | \psi_{n_x, n_y, n_z} \rangle = \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right) \hbar \omega | \psi_{n_x, n_y, n_z} \rangle \quad (13)$$

یعنی ویژه‌بردارهای H همچون حاصلضرب تانسوری ویژه‌بردارهای H_x ، H_y و H_z و ویژه‌مقدارهای H همچون مجموع مقدارهای این سه عملگر پدیدار می‌شوند.

بنابر معادله (۱۳)، ترازهای انرژی E_n نوسانگر هماهنگ همسانگرد سه بعدی به شکل زیر هستند

$$E_n = \left(n + \frac{3}{2} \right) \hbar \omega \quad (۱۴)$$

که در آن

$$n \text{ عدد درست مثبت یا صفر است} \quad (۱۵)$$

در واقع n همچون مجموع $n_x + n_y + n_z$ سه عدد پذیرداری می شود که هر یک اندازه های درست غیر منفی را می پذیرد.

از سوی دیگر، فرمول (۱۲) امکان می دهد تا خواص بردارهای $\langle \psi_{n_x, n_y, n_z} |$ ویژه حالت های مشترک H, H_x, H_y, H_z را از آنچه که در بخش ۵-۳-۱ برای $\langle \varphi_{n_x} |$ ثابت کردیم (که برای $\langle \varphi_{n_y} |$ و $\langle \varphi_{n_z} |$ نیز معتبر هستند)، به دست آوریم. سه زوج عملگرهای آفرینش و نابودی را چنین وارد کنیم:

$$a_x = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} X + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} P_x \quad a_x^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} X - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} P_x \quad (\text{الف-۱۶})$$

$$a_y = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} Y + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} P_y \quad a_y^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} Y - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} P_y \quad (\text{ب-۱۶})$$

$$a_z = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} Z + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} P_z \quad a_z^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} Z - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} P_z \quad (\text{ج-۱۶})$$

این عملگرها گسترش عملگرهایی در \mathcal{E}_T هستند که در $\mathcal{E}_x, \mathcal{E}_y, \mathcal{E}_z$ اثر می کنند. از رابطه های جابه جایی بنیادی میان مؤلفه های \mathbf{R} و \mathbf{P} چنین برمی آید که تنها جابه جاگرهای غیر صفر میان شش عملگری که در (۱۶) تعریف شده اند عبارت اند از

$$[a_x, a_x^\dagger] = [a_y, a_y^\dagger] = [a_z, a_z^\dagger] = 1 \quad (۱۷)$$

باید توجه داشت که دو عملگر با شاخصهای مختلف همیشه جابه جایی پذیرند، که باید هم باشند، زیرا آنها در حقیقت در فضا های مختلف عمل می کنند. عمل عملگر a_x و a_x^\dagger روی حالت های

$|\psi_{n_x, n_y, n_z}\rangle$ با فرمولهای زیر داده می‌شود

$$\begin{aligned} a_x |\psi_{n_x, n_y, n_z}\rangle &= (a_x |\varphi_{n_x}\rangle) |\varphi_{n_y}\rangle |\varphi_{n_z}\rangle \\ &= \sqrt{n_x} |\varphi_{n_x-1}\rangle |\varphi_{n_y}\rangle |\varphi_{n_z}\rangle \quad (۱۸-الف) \\ &= \sqrt{n_x} |\psi_{n_x-1, n_y, n_z}\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} a_x^\dagger |\psi_{n_x, n_y, n_z}\rangle &= (a_x^\dagger |\varphi_{n_x}\rangle) |\varphi_{n_y}\rangle |\varphi_{n_z}\rangle \\ &= \sqrt{n_x + 1} |\varphi_{n_x+1}\rangle |\varphi_{n_y}\rangle |\varphi_{n_z}\rangle \quad (۱۸-ب) \\ &= \sqrt{n_x + 1} |\psi_{n_x+1, n_y, n_z}\rangle \end{aligned}$$

برای a_y, a_y^\dagger, a_z و a_z^\dagger به همان‌گونه است.
افزون بر آن می‌دانیم [معادله (۵-۷۶)] که

$$|\varphi_{n_x}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_x!}} (a_x^\dagger)^{n_x} |\varphi_0\rangle \quad (۱۹)$$

که در آن $|\varphi_0\rangle$ برداری از \mathcal{E}_x است که از شرط زیر پیروی می‌کند

$$a_x |\varphi_0\rangle = 0 \quad (۲۰)$$

$|\varphi_{n_x}\rangle$ و $|\varphi_{n_y}\rangle$ در \mathcal{E}_y و \mathcal{E}_z به ترتیب دارای عبارتهای مشابهی هستند. در نتیجه، همیشه بنا بر (۱۲) داریم

$$|\psi_{n_x, n_y, n_z}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_x! n_y! n_z!}} (a_x^\dagger)^{n_x} (a_y^\dagger)^{n_y} (a_z^\dagger)^{n_z} |\psi_{0,0,0}\rangle \quad (۲۱)$$

که در $|\psi_{0,0,0}\rangle$ حاصلضرب تانسوری حالت‌های پایه سه نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی است و بنابراین از شرط زیر پیروی می‌کند

$$a_x |\psi_{0,0,0}\rangle = a_y |\psi_{0,0,0}\rangle = a_z |\psi_{0,0,0}\rangle = 0 \quad (۲۲)$$

سرانجام یادآوری می‌کنیم که چون $|\psi_{n_x, n_y, n_z}\rangle$ یک حاصلضرب تانسوری است، تابع موج وابسته بدین صورت است

$$\langle \mathbf{r} | \psi_{n_x, n_y, n_z}\rangle = \varphi_{n_x}(x) \varphi_{n_y}(y) \varphi_{n_z}(z) \quad (۲۳)$$

که در آن φ_{n_x} , φ_{n_y} , و φ_{n_z} تابع موجهای مانای نوسانگر هماهنگ یک بعدی هستند (بخش ۵-۲-۳). برای مثال

$$\langle \mathbf{r} | \psi_{n_x, n_y, n_z} \rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{3/4} e^{-(m\omega/2\hbar)(x^2 + y^2 + z^2)} \quad (24)$$

۳. واگنی ترازهای انرژی

در بخش ۵-۲-۳ نشان دادیم که H_x یک مجموعه کامل مشاهده پذیر جابه جایی پذیر در \mathcal{E}_x تشکیل می دهد. برای H_y در \mathcal{E}_y و H_z در \mathcal{E}_z وضع به گونه مشابهی است. بنابراین، با توجه به بخش F از فصل دوم، $\{H_x, H_y, H_z\}$ یک مجموعه کامل مشاهده پذیر جابه جایی پذیر در \mathcal{E} است. در نتیجه، تنها یک کت $\{|\psi_{n_x, n_y, n_z}\rangle\}$ (با تقریب یک ضریب) در \mathcal{E} وجود دارد که با مجموعه داده شده ای از ویژه مقدارهای H_x , H_y , و H_z ، یعنی با مجموعه داده شده ای از اعداد درست غیر صفر n_x , n_y , و n_z متناظر است.

برعکس H به تنهایی یک مجموعه کامل مشاهده پذیر جابه جایی پذیر نمی سازد، زیرا ترازهای انرژی E_n واگن هستند. در واقع اگر یک ویژه مقدار H ، مانند $E_n = (n + 3/2)\hbar\omega$ را، که به معنای تثبیت یک عدد درست غیر صفر n است انتخاب کنیم، همه کتهای پایه $|\psi_{n_x, n_y, n_z}\rangle$ با

$$n_x + n_y + n_z = n \quad (25)$$

ویژه بردارهای H با ویژه مقدار E_n هستند.

بنابراین، مرتبه واگنی g_n مربوط به E_n برابر با تعداد مجموعه های $\{n_x, n_y, n_z\}$ مختلفی است که شرط (۲۵) را برآورده سازند. برای یافتن g_n می توان چنین عمل کرد: با ثابت گرفتن n_x نخست n_x را با دادن یکی از مقادیر زیر به آن انتخاب می کنیم

$$n_x = 0, 1, 2, \dots, n \quad (26)$$

بعد از گزینش n_x ، باید داشته باشیم

$$n_y + n_z = n - n_x \quad (27)$$

اما، $(n - n_x + 1)$ امکان برای زوج $\{n_y, n_z\}$ وجود دارد

$$\{n_y, n_z\} = \{0, n - n_x\}, \{1, n - n_x - 1\}, \dots, \{n - n_x, 0\} \quad (28)$$

بنابراین مرتبهٔ واگنی g_n برای E_n عبارت است از

$$g_n = \sum_{n_x=0}^n (n - n_x + 1) \quad (29)$$

این مجموع به آسانی محاسبه می‌شود

$$g_n = (n+1) \sum_{n_x=0}^n 1 - \sum_{n_x=0}^n n_x = \frac{(n+1)(n+2)}{2} \quad (30)$$

در نتیجه، تنها تراز پایه $E_0 = (3/2)\hbar\omega$ ناواگن است.

یادداشت:

کتهای $|\psi_{n_x, n_y, n_z}\rangle$ یک دستگاه راست‌هنجار از ویژه‌بردارهای H هستند که در \mathcal{E}_E یک پایه تشکیل می‌دهند. چون ویژه‌بردارهای E_n هامیلتونی H واگن هستند، این دستگاه یکتا نیست، ما به‌ویژه در مکمل ۲ فصل ۷ خواهیم دید که برای حل معادلهٔ (۶)، می‌توان مجموعه‌ای از تابت‌های حرکت بجز $\{H_x, H_y, H_z\}$ را به‌کار برد: بدینسان پایه‌ای از \mathcal{E}_E به‌دست می‌آید که با پایهٔ پیشین تفاوت دارد، هرچند که باز از ویژه‌بردارهای H تشکیل شده است. کتهای این پایهٔ نو، ترکیب‌های خطی راست‌هنجاری از $|\psi_{n_x, n_y, n_z}\rangle$ ‌های متعلق به هریک از ویژه‌زیرفضاهای H ، یعنی متناظر با اندازهٔ داده‌شده‌ای از مجموع $n_x + n_y + n_z$ هستند. ■

مکمل ۶

نوسانگر هماهنگ باردار در یک میدان الکتریکی یکنواخت

۱. معادله ویژه مقدار $H'(\mathcal{E})$ در نمایش $\{|x\rangle\}$

۲. بحث

الف) پذیرفتاری الکتریکی یک الکترون به طور کشسان وابسته

ب) تعبیر جابه‌جایی انرژی

۳. کاربرد عملگر انتقال

نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی را که در فصل ۵ مطالعه کردیم از ذره‌ای به جرم m تشکیل شده است که دارای انرژی پتانسیل زیر است

$$V(X) = \frac{1}{2} m \omega^2 X^2 \quad (1)$$

افزون بر این فرض کنیم که ذره دارای بار q است و در میدان الکتریکی یکنواخت \mathcal{E} موازی با Ox قرار دارد. در این صورت، حالت‌های مانا و انرژی‌های متناظر با آن چه هستند؟ انرژی پتانسیل کلاسیک ذره‌ای که در یک میدان یکنواخت \mathcal{E} قرار دارد برابر است با:

$$w(\mathcal{E}) = -q\mathcal{E}x \quad (2)$$

بنابراین، در مکانیک کوانتومی برای به‌دست آوردن هامیلتونی $H'(\mathcal{E})$ در حضور میدان \mathcal{E} ، باید به انرژی پتانسیل (۱) نوسانگر هماهنگ جمله زیر را افزود

$$W(\mathcal{E}) = -q\mathcal{E}X \quad (3)$$

آنچه که به‌دست می‌دهد

$$H'(\mathcal{E}) = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2 - q\mathcal{E}X \quad (4)$$

۱. ما قراردادی را رعایت می‌کنیم که بنابر آن انرژی پتانسیل در $x = 0$ صفر است.

بنابراین اکنون باید ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای این عملگر را پیدا کرد. برای این منظور، دو روش مختلف را به کار خواهیم برد. در آغاز مستقیماً دربارهٔ معادلهٔ ویژه‌مقدار $H'(\mathcal{E})$ در نمایش $\{|x\rangle\}$ بحث خواهیم کرد که نتایج به دست آمده دارای تعبیر فیزیکی ساده‌ای است. سپس نشان خواهیم داد که چگونه می‌توان مسئله را با یک محاسبهٔ کاملاً عملگری حل کرد.

۱. معادلهٔ ویژه‌مقدار $H'(\mathcal{E})$ در نمایش $\{|x\rangle\}$
 $|\varphi\rangle$ را ویژه‌بردار از $H'(\mathcal{E})$ می‌گیریم

$$H'(\mathcal{E})|\varphi\rangle = E'|\varphi\rangle \quad (5)$$

با به کار بردن (۴)، این معادله را در نمایش $\{|x\rangle\}$ می‌توان چنین نوشت

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 - q\mathcal{E}x \right] \varphi'(x) = E' \varphi'(x) \quad (6)$$

جمله‌های بر حسب x و x^2 را در طرف نخست (۶) به صورت توان دوم دسته‌بندی می‌کنیم

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 \left(x - \frac{q\mathcal{E}}{m\omega^2} \right)^2 - \frac{q^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2} \right] \varphi'(x) = E' \varphi'(x) \quad (7)$$

سپس به جای متغیر x ، متغیر جدید u را چنین قرار می‌دهیم

$$u = x - \frac{q\mathcal{E}}{m\omega^2} \quad (8)$$

در این صورت φ' ، با واسطهٔ x ، تابعی از u است و معادلهٔ (۷) چنین می‌شود

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{du^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 u^2 \right] \varphi'(u) = E'' \varphi'(u) \quad (9)$$

با

$$E'' = E' + \frac{q^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2} \quad (10)$$

در این هنگام دیده می‌شود که معادله (۹) همان معادله‌ای است که امکان می‌دهد تا، در نمایش $\{ |x\rangle \}$ ، حالت‌های مانای نوسانگر هماهنگ در غیاب میدان الکتریکی به دست آید [رابطه (۵-۱۷)]. این معادله را قبلاً حل کرده‌ایم و می‌دانیم که اندازه‌های پذیرفتنی E_n'' چنین داده شده‌اند

$$E_n'' = \left(n + \frac{1}{4} \right) \hbar \omega \quad (11)$$

(که در آن n یک عدد درست مثبت یا صفر است).

رابطه‌های (۱۰) و (۱۱) نشان می‌دهند که در یک میدان الکتریکی، انرژی‌های E_n' حالت‌های مانای نوسانگر هماهنگ تغییر می‌کنند

$$E_n'(\mathcal{E}) = \left(n + \frac{1}{4} \right) \hbar \omega - \frac{q^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2} \quad (12)$$

بنابراین، طیف کامل نوسانگر هماهنگ به اندازه $q^2 \mathcal{E}^2 / 2m\omega^2$ تغییر جا می‌دهد.

اکنون نشان می‌دهیم که تابع موج‌های $\varphi_n'(x)$ وابسته به انرژی‌های (۱۲) را می‌توان از $\varphi_n(x)$ با یک انتقال در امتداد Ox به دست آورد. در واقع، پاسخ معادله (۹) متناظر با اندازه معینی از n ، برابر $\varphi_n(u)$ است [که در آن φ_n مثلاً با فرمول (۳۵) از مکمل ۲ همین فصل داده می‌شود] و بنابر (۸) داریم

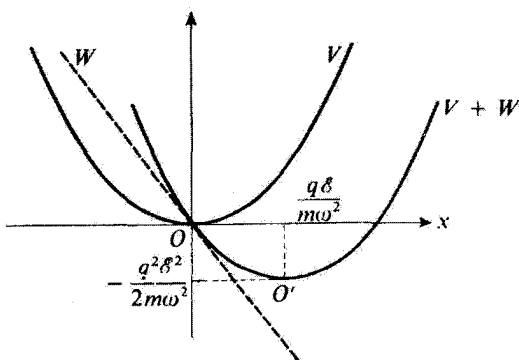
$$\varphi_n'(x) = \varphi_n \left(x - \frac{q\mathcal{E}}{m\omega^2} \right) \quad (13)$$

این انتقال از دید فیزیکی بدین علت است که میدان الکتریکی بر ذره نیرویی وارد می‌کند.

یادداشت:

تغییر متغیر داده شده در (۸) به ما امکان می‌دهد تا موردی را که در آن میدان الکتریکی دلخواه است به مسئله‌ای که در آن میدان صفر است و قبلاً حل شده است، بازگردانیم. تنها اثر میدان الکتریکی، تغییر مبدهی در طولها [معادله (۱۳)] و در انرژی‌هاست [معادله (۱۲)]. این نتیجه وانگهی از نمودار به خوبی فهمیده می‌شود (شکل ۱). هنگامی که \mathcal{E} صفر است، انرژی پتانسیل $V(x)$ با یک سهمی به رأس O نشان داده می‌شود. هنگامی که \mathcal{E} صفر نیست، باید به این انرژی پتانسیل کمیت $-q\mathcal{E}x$ را که متناظر با خط‌چین شکل ۱ است افزود. منحنی‌ای که $V + W$ را نمایش

۱. از رابطه (۱۳) پیداست که تابع از $\varphi_n'(x)$ با یک انتقال $q\mathcal{E}/m\omega^2$ به دست می‌آید. اگر حاصلضرب $q\mathcal{E}$ مثبت باشد، انتقال به سوی مثبت محور x ، که درست سوی نیروی وارده به وسیله \mathcal{E} است، رخ می‌دهد.



شکل ۱ اثر حضور میدان الکتریکی یکنواخت این است که یک جمله خطی W به انرژی پتانسیل V نوسانگر هماهنگ افزوده می‌شود. در این صورت، پتانسیل کل $V + W$ با یک سهمی جابه‌جا شده نموده می‌شود.

می‌دهد باز یک سهمی است، به‌گونه‌ای که، در حضور یک میدان \mathcal{E} ، هنوز دارای یک نوسانگر هماهنگ هستیم. چون دو سهمی قابل انطباق‌اند، با یک اندازه ω و در نتیجه با جداییهای برابر انرژی میان ترازها متناظر هستند. با این‌همه، رأسهای O و O' آنها مختلف هستند و به‌خوبی فرمولهای (۱۲) و (۱۳) باز به‌دست می‌آیند. ■

۲. بحث

الف) پذیرفتاری الکتریکی یک الکترون به‌طور کشسان وابسته

در برخی از موارد، الکترونهای یک اتم یا یک مولکول، با تقریب خوبی، دارای چنان رفتاری هستند که گویی به‌طور کشسان وابسته هستند، یعنی هریک از آنها یک نوسانگر هماهنگ تشکیل می‌دهند. ما آن‌را برای اتمها در مکمل ۱ فصل ۱۳ با نظریه اغتشاش وابسته به‌زمان نشان خواهیم داد. سهم هر الکترون در گشتاور دوقطبی الکتریکی اتم با این عملگر توصیف می‌شود

$$D = qX \quad (14)$$

که در آن q بار الکترون ($q < 0$) و X مشاهده‌پذیر موضع متناظر با آن است. ما در اینجا اندازه میانگین D را در چارچوب مدل الکترون به‌طور کشسان وابسته مطالعه می‌کنیم. در غیاب میدان الکتریکی، اندازه میانگین گشتاور دوقطبی الکتریکی در یک حالت ایستاده

$$\langle D \rangle = q \langle \varphi_n | X | \varphi_n \rangle = 0 \quad (15)$$

[فرمول (۵-۹۳)].

اکنون فرض کنیم که میدان الکتریکی \mathcal{E} چنان به کندی برقرار شود که حالت الکترون به تدریج از $\langle \varphi_n \rangle$ به $\langle \varphi'_n \rangle$ برود (و n بی تغییر بماند). گشتاور دوقطبی میانگین این مرتبه مخالف صفر است. در واقع

$$\langle D \rangle' = q \langle \varphi'_n | X | \varphi'_n \rangle = q \int_{-\infty}^{+\infty} dx x |\varphi'_n(x)|^2 \quad (16)$$

با به کار بردن (۸) و (۱۳) خواهیم یافت

$$\langle D \rangle' = q \int_{-\infty}^{+\infty} u |\varphi_n(u)|^2 du + \frac{q^2 \mathcal{E}}{m\omega^2} \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi_n(u)|^2 du = \frac{q^2 \mathcal{E}}{m\omega^2} \quad (17)$$

زیرا اولین انتگرال بنابر تقارن صفر است. بنابراین، $\langle D \rangle'$ با \mathcal{E} متناسب است. در این مدل، پذیرفتاری الکتریکی الکترون اتمی مورد نظر برابر است با

$$\chi = \frac{\langle D \rangle'}{\mathcal{E}} = \frac{q^2}{m\omega^2} \quad (18)$$

این کمیت، برای هر علامت q ، مثبت است.

تعبیر فیزیکی نتیجه (۱۸) ساده است. میدان الکتریکی دارای این اثر است که مکان ترازمندی کلاسیک الکترون، یعنی اندازه میانگین مکان آن را، در مکانیک کوانتومی جابه جا می کند [فرمول (۱۳)]. این منجر به پدیدار شدن یک گشتاور دوقطبی القایی تجلی می شود. کاهش χ به هنگام افزایش ω با این واقعیت متناظر است که هر چه نیروی فراخوانی (متناسب با ω^2)، بزرگتر باشد، تغییر نوسانگر هماهنگ مشکلتر است.

ب) تعبیر جابه جایی انرژی

در چارچوب مدلی که توصیف کردیم، با محاسبه تغییر انرژی جنبشی و انرژی پتانسیل میانگین الکترون، هنگامی که از حالت $\langle \varphi_n \rangle$ به حالت $\langle \varphi'_n \rangle$ می رود، می توان فرمول (۱۲) را تعبیر کرد.

تغییر انرژی جنبشی در واقع صفر است (آنچه که به عنوان مثال آشکارا از شکل ۱ در می یابیم)، بنابراین فرمول (۱۳) داریم

$$\left\langle \frac{P^2}{2m} \right\rangle' - \left\langle \frac{P^2}{2m} \right\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n'^*(x) \frac{d^2}{dx^2} \varphi_n'(x) dx - \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n^*(x) \frac{d^2}{dx^2} \varphi_n(x) dx \right] = 0 \quad (19)$$

از سوی دیگر، تغییر انرژی پتانسیل را می توان به دو جمله تجزیه کرد: — نخستین جمله، $\langle W(\mathcal{E}) \rangle'$ ، با انرژی پتانسیل الکتریکی دوقطبی در میدان \mathcal{E} متناظر است. چون دوقطبی و میدان موازی هستند، بنا بر (۱۷) داریم

$$\langle W(\mathcal{E}) \rangle' = -\mathcal{E} \langle D \rangle' = -\frac{q^2 \mathcal{E}^2}{m\omega^2} \quad (20)$$

— جمله دوم، $\langle V(X) \rangle' - \langle V(X) \rangle$ ، ناشی از تغییر میدان الکتریکی در تابع موج تراز برچسب خورده توسط عدد کوانتومی n می باشد. بنابراین انرژی پتانسیل "کشسان" ذره چنین تغییر می کند

$$\langle V(X) \rangle' - \langle V(X) \rangle = \frac{1}{4} m\omega^2 \left[\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\varphi_n'(x)|^2 dx - \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\varphi_n(x)|^2 dx \right] \quad (21)$$

انتگرال نخست را می توان با به کار بستن (۱۳) و تغییر متغیر (۸) محاسبه کرد

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\varphi_n'(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} u^2 |\varphi_n(u)|^2 du + \frac{2q\mathcal{E}}{m\omega^2} \int_{-\infty}^{+\infty} u |\varphi_n(u)|^2 du + \left(\frac{q\mathcal{E}}{m\omega^2} \right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi_n(u)|^2 du \quad (22)$$

چون $\varphi_n(u)$ بهنجار است و انتگرال $u |\varphi_n(u)|^2$ بنا بر تقارن صفر است. سرانجام چنین به دست می آید

$$\langle V(X) \rangle' - \langle V(X) \rangle = \frac{q^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2} \quad (23)$$

درمی‌یابیم که چرا این نتیجه باید مثبت باشد. زیرا میدان الکتریکی ذره را از نقطه O دور می‌کند و آن را به طرف ناحیه‌ای می‌راند که در آنجا انرژی پتانسیل "کشسان" بزرگتر است. با افزودن (20) و (23) بازمی‌یابیم که انرژی حالت (φ'_n) از انرژی حالت (φ_n) به مقدار $q^2 \mathcal{E}^2 / 2m\omega^2$ کمتر است.

۳. کاربرد عملگر انتقال

در این بخش خواهیم دید که به جای قرار گرفتن در نمایش $\{|x\rangle\}$ ، چنانکه تاکنون چنین کردیم، ممکن است مستقیماً روی عملگر $H'(\mathcal{E})$ ، که با (4) داده شده است، استدلال کرد. دقیقتر، نشان خواهیم داد که یک تبدیل یکانی (که با یک انتقال تابع موج بر محور x متناظر است) امکان می‌دهد از عملگر $H = H'(\mathcal{E} = 0)$ ، که ویژه‌بردارها و ویژه‌مقدارهای آن در همین فصل تعیین شده‌اند، به عامل $H'(\mathcal{E})$ (با تقریب یک ثابت افزایشی که ویژه‌بردارها را تغییر نمی‌دهد) برسیم. بنابراین، عملگر زیر را در نظر بگیریم

$$U(\lambda) = e^{-\lambda(a-a^\dagger)} \quad (24)$$

که در آن λ یک ثابت حقیقی است. الحاق آن $U^\dagger(\lambda)$ چنین است

$$U^\dagger(\lambda) = e^{\lambda(a-a^\dagger)} \quad (25)$$

به‌آسانی پیداست که

$$U(\lambda)U^\dagger(\lambda) = U^\dagger(\lambda)U(\lambda) = 1 \quad (26)$$

در نتیجه $U(\lambda)$ یک عملگر یکانی است. در تبدیل یکانی متناظر، H می‌شود

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= U(\lambda)HU^\dagger(\lambda) \\ &= \hbar\omega \left[\frac{1}{2} + U(\lambda)a^\dagger a U^\dagger(\lambda) \right] \end{aligned} \quad (27)$$

اکنون باید این عملگر را محاسبه کنیم

$$U(\lambda)a^\dagger a U^\dagger(\lambda) = \tilde{a}^\dagger \tilde{a} \quad (28)$$

با

$$\begin{aligned}\bar{a} &= U(\lambda)a U^\dagger(\lambda) \\ \bar{a}^\dagger &= U(\lambda)a^\dagger U^\dagger(\lambda)\end{aligned}\quad (29)$$

برای به دست آوردن \bar{a} و \bar{a}^\dagger ، فرمول (۶۳) از مکمل B_{II} را به کار می‌بریم (که در اینجا می‌تواند به کار رود زیرا جابه‌جاگر a و a^\dagger برابر با ۱ است) که می‌دهد

$$\begin{aligned}U(\lambda) &= e^{-\lambda a + \lambda a^\dagger} = e^{-\lambda a} e^{\lambda a^\dagger} e^{\lambda^2/2} \\ U^\dagger(\lambda) &= e^{-\lambda a^\dagger + \lambda a} = e^{-\lambda a^\dagger} e^{\lambda a} e^{-\lambda^2/2}\end{aligned}\quad (30)$$

از سوی دیگر، فرمول (۵۱) از مکمل B_{II} امکان می‌دهد تا بنویسیم

$$\begin{cases} [e^{-\lambda a}, a^\dagger] = -\lambda e^{-\lambda a} \\ [e^{\lambda a^\dagger}, a] = -\lambda e^{\lambda a^\dagger} \end{cases}\quad (31)$$

یعنی

$$\begin{aligned}e^{-\lambda a} a^\dagger e^{\lambda a} &= a^\dagger - \lambda \\ e^{\lambda a^\dagger} a e^{-\lambda a^\dagger} &= a - \lambda\end{aligned}\quad (32)$$

در این صورت نتیجه می‌شود

$$\begin{aligned}\bar{a} &= e^{-\lambda a} e^{\lambda a^\dagger} a e^{-\lambda a^\dagger} e^{\lambda a} \\ &= e^{-\lambda a} (a - \lambda) e^{\lambda a} = a - \lambda\end{aligned}\quad (33)$$

و همچنین

$$\bar{a}^\dagger = a^\dagger - \lambda\quad (34)$$

بنابراین \tilde{H} چنین داده می‌شود

$$\begin{aligned}\tilde{H} &= \hbar\omega \left[\frac{1}{2} + (a^\dagger - \lambda)(a - \lambda) \right] \\ &= \hbar\omega \left[\frac{1}{2} + a^\dagger a - \lambda(a + a^\dagger) + \lambda^2 \right] \\ &= H - \lambda \hbar\omega (a + a^\dagger) + \lambda^2 \hbar\omega\end{aligned}\quad (35)$$

چون $(a + a^\dagger)$ با عملگر X متناسب است [فرمولهای (۲۰-۵) و (۲۶-۵)]، کافی است قرار دهیم

$$\lambda = \frac{q\mathcal{E}}{\omega} \sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}} \quad (36)$$

تا به دست آوریم

$$\tilde{H} = H - q\mathcal{E}X + \frac{q^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2} = H'(\mathcal{E}) + \frac{q^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2} \quad (37)$$

بنابراین، دو عملگر \tilde{H} و $H'(\mathcal{E})$ دارای ویژه‌بردارهای یکسانی هستند و ویژه‌مقدارهای آنها به اندازه $q^2\mathcal{E}^2/2m\omega^2$ اختلاف دارد. اما، می‌دانیم (مکمل C_{II} ، بخش ۲) که، اگر ویژه‌بردارهای H کتهای $|\varphi_n\rangle$ باشند، ویژه‌بردارهای \tilde{H} عبارت از کتهای زیر هستند

$$|\tilde{\varphi}_n\rangle = U(\lambda) |\varphi_n\rangle \quad (38)$$

و ویژه‌مقدارهای متناظر با H و \tilde{H} یکی هستند. بنابراین، حالت‌های مانای $|\varphi'_n\rangle$ نوسانگر هماهنگ در حضور یک میدان \mathcal{E} حالت‌های $|\tilde{\varphi}_n\rangle$ هستند که با (۳۸) داده می‌شود و ویژه‌مقدار وابسته به $H'(\mathcal{E})$ بنا بر (۳۷) عبارت است از

$$E'_n(\mathcal{E}) = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega - \frac{q^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2} \quad (39)$$

بدینسان، فرمول (۱۲) بخش پیشین را باز می‌یابیم. اما درباره عبارت (۳۸) ویژه‌بردارها، می‌توان آن‌را با بکار بردن (۲۴) و (۳۶) و همچنین فرمولهای (۲۰-۵) و (۲۱-۵) چنین نوشت

$$|\varphi'_n\rangle = |\tilde{\varphi}_n\rangle = e^{-i\frac{q\mathcal{E}}{m\hbar\omega^2}P} |\varphi_n\rangle \quad (40)$$

ما در مکمل E_{II}، عملگر $e^{-iaP/\hbar}$ را همچون عملگر انتقال به اندازه یک فاصله (جبری) a در طول Ox تعبیر کردیم. بنابراین، $(\varphi'_n |$ حالتی است که از $(\varphi_n |$ به وسیله انتقال $q\mathcal{E}/m\omega^2$ به دست می‌آید. این درست همان است که رابطه (۱۳) نشان می‌دهد.

مراجع

الکترون مقید به طور کشسان: مراجع مکمل ۱ فصل ۱۳ را ببینید.

حالت‌های همدوس "شبه کلاسیک" نوسانگر هماهنگ

۱. جستجوی حالت‌های شبه کلاسیک

الف) وارد کردن پارامتر α برای مشخص کردن یک حرکت کلاسیک

ب) شرایط معرف حالت‌های شبه کلاسیک

ج) حالت‌های شبه کلاسیک، ویژه بردارهای عملگر a هستند

۲. خواص حالت‌های $|\alpha\rangle$

الف) بسط $|\alpha\rangle$ بر روی پایهٔ حالت‌های مانای $|\varphi_n\rangle$

ب) اندازه‌های ممکن انرژی در یک حالت $|\alpha\rangle$

ج) محاسبهٔ $\langle X \rangle$ ، $\langle P \rangle$ ، ΔX و ΔP در یک حالت $|\alpha\rangle$

د) عملگر $D(\alpha)$: توابع موج $\psi_\alpha(x)$

ه) حاصلضرب زده‌ای دو حالت $|\alpha\rangle$. رابطهٔ بستاری

۳. تحول یک حالت شبه کلاسیک با زمان

الف) یک حالت شبه کلاسیک همواره ویژه بردار a باقی می‌ماند

ب) تحول خواص فیزیکی

ج) حرکت بسته موج

۴. مثالی از کاربرد: مطالعهٔ کوانتومی یک نوسانگر ماکروسکوپیکی

خواص حالت‌های مانای $|\varphi_n\rangle$ | نوسانگر هماهنگ در همین فصل مطالعه شد. به عنوان مثال، در بخش ۴-۵ دیدیم که اندازه‌های میانگین $\langle X \rangle$ و $\langle P \rangle$ موضع و تکانهٔ زاویه‌ای نوسانگر در چنین حالتی صفر هستند. اما در مکانیک کلاسیک به خوبی شناخته شده است که موضع X و تکانه P تابع‌های نوسانی از زمان‌اند، که نمی‌توانند همواره صفر باشند مگر آنکه انرژی حرکت نیز صفر باشد [رابطه‌های (۵-۵) و (۸-۵)]. از طرفی می‌دانیم که مکانیک کوانتومی، در حدی که نوسانگر هماهنگ دارای انرژی فوق‌العاده بزرگتر از کوانتوم $\hbar\omega$ است (حد اعداد کوانتومی بزرگ) باید همان نتایج مکانیک کلاسیک را به دست دهد.

بنابراین می‌توان این پرسش را مطرح کرد: آیا ممکن است حالت‌های کوانتومی‌ای ساخت که به پیش‌بینی‌هایی بینجامد که حداقل مورد یک نوسانگر ماکروسکوپیکی، عملاً همانند پیش‌بینی‌های کلاسیک باشد؟ در این مکمل خواهیم دید که چنان حالت‌های کوانتومی‌ای وجود دارند. این حالت‌ها

برهنه‌نهای خطی همدوس همه حالت‌های (φ_n) هستند که ما آنها را "حالت‌های شبه‌کلاسیک" یا "حالت‌های همدوس نوسانگر هماهنگ" می‌نامیم.

مسئله‌ای را که در اینجا مطرح می‌کنیم، در مکانیک کوانتومی، اهمیتی بس عمومی دارد. در واقع، همان‌گونه که در مقدمه و مکمل ۱ این فصل دیدیم، شمار زیادی از دستگاه‌های فیزیکی، حداقل در تقریب نخست، با یک نوسانگر هماهنگ متشابه هستند. در همه این دستگاه‌ها، جالب است بفهمیم که چگونه می‌توان در چارچوب مکانیک کوانتومی از موردی، که در آن نتایج حاصل از تقریب کلاسیک کافی است، به تدریج به موردی که در آن اثرهای کوانتومی غالب هستند برسیم. تابش الکترومغناطیسی مثال بسیار مهمی از چنین دستگاهی را به دست می‌دهد. این تابش، بسته به آزمایش، یا مشخصه کوانتومی خود را نشان می‌دهد (مورد آزمایش بحث شده در بخش ۲-۲-۱ فصل اول که در آن شار نورانی بسیار ضعیف است)، یا برعکس می‌تواند به‌طور کلاسیک بررسی شود. "حالت‌های همدوس" تابش الکترومغناطیسی به تازگی به وسیله "گلویر" عرضه شده است و امروزه به‌طور جاری در گستره اپتیک کوانتومی به‌کار می‌روند.

موضع، تکانه، و انرژی نوسانگر هماهنگ در مکانیک کوانتومی با عملگرهایی توصیف می‌شوند که جابه‌جایی‌پذیر نیستند. اینها کمیت‌های فیزیکی ناسازگار هستند. بنابراین ممکن نیست حالتی ساخت که در آن هر سه کمیت کاملاً معین باشند. ما به جستجوی بردار حالتی بسنده می‌کنیم که، t هر چه باشد، اندازه‌های میانگین $\langle X \rangle$ ، $\langle P \rangle$ ، و $\langle H \rangle$ تا حد امکان به اندازه‌های کلاسیک متناظر نزدیک باشند. این شیوه ما را به سازشی رهنمون می‌شود که در آن هیچ‌یک از این سه مشاهده‌پذیر به‌طور کامل شناخته شده نیستند. با این‌همه خواهیم دید که انحراف‌های مربعی میانگین ΔX ، ΔP ، و ΔH در حد ماکروسکوپیکی، کاملاً چشم پوشیدنی هستند.

۱. جستجوی حالت‌های شبه‌کلاسیک

الف) وارد کردن پارامتر α برای مشخص کردن یک حرکت کلاسیک

معادله‌های کلاسیک حرکت یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی به جرم m و بسامد زاویه‌ای ω چنین نوشته می‌شود

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}x(t) = \frac{1}{m}p(t) & \text{(الف-۱)} \\ \frac{d}{dt}p(t) = -m\omega^2x(t) & \text{(ب-۱)} \end{cases}$$

محاسبه‌های کوانتومی‌ای که بعداً انجام خواهیم داد با معرفی کمیت‌های بی‌بعد زیر ساده‌تر خواهد شد

$$\begin{cases} \hat{x}(t) = \beta x(t) \\ \hat{p}(t) = \frac{1}{\hbar\beta} p(t) \end{cases} \quad (۲)$$

که در آن

$$\beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \quad (۳)$$

معادله‌های (۱) در این صورت چنین نوشته می‌شوند

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \hat{x}(t) = \omega \hat{p}(t) & (۴-الف) \\ \frac{d}{dt} \hat{p}(t) = -\omega \hat{x}(t) & (۴-ب) \end{cases}$$

حالت کلاسیک نوسانگر هماهنگ در لحظه t هنگامی مشخص می‌شود که آن لحظه موضع $x(t)$ و تکانه $p(t)$ ، یعنی $\hat{x}(t)$ و $\hat{p}(t)$ شناخته شده باشند. اکنون این دو عدد حقیقی را با یکدیگر ترکیب کنیم و به صورت تنها عدد مختلط بی‌بعد $\alpha(t)$ در آوریم، که چنین تعریف می‌شود

$$\alpha(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\hat{x}(t) + i\hat{p}(t)] \quad (۵)$$

مجموعه دو معادله (۴)، هم‌ارز معادله منفرد زیر است

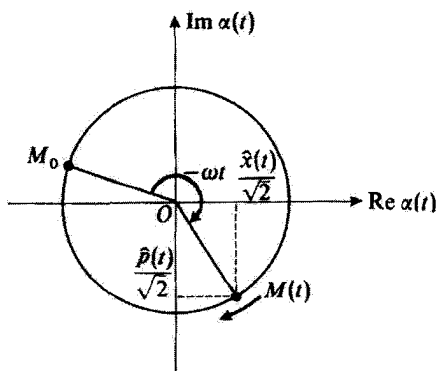
$$\frac{d}{dt} \alpha(t) = -i\omega \alpha(t) \quad (۶)$$

که پاسخ آن عبارت است از

$$\alpha(t) = \alpha_0 e^{-i\omega t} \quad (۷)$$

که در آن قرار داده‌ایم

$$\alpha_0 = \alpha(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\hat{x}(0) + i\hat{p}(0)] \quad (۸)$$



شکل ۱ نقطه M ، تصویر عدد مختلط $\alpha(t)$ ، که در هر لحظه مشخص‌کننده حالت نوسانگر هماهنگ است، M یا سرعت زاویه‌ای $-\omega$ در روی یک دایره جابه‌جا می‌شود. طول و عرض نقطه M موضع و تکانه نوسانگر را به دست می‌دهد.

اکنون در صفحه مختلط، نقاط M_0 و M ، تصویرهای اعداد مختلط α_0 و $\alpha(t)$ را در نظر می‌گیریم (شکل ۱). M در $t = 0$ بر M_0 منطبق است و با سرعت زاویه‌ای $-\omega$ دایره‌ای به مرکز O و شعاع OM_0 را ترسیم می‌کند.

چون مختصات M بنابر (۵) برابر با $\hat{x}(t)/\sqrt{2}$ و $\hat{p}(t)/\sqrt{2}$ هستند. بدینسان نمایش هندسی بسیار ساده‌ای برای تحول زمانی حالت دستگاه به دست می‌آوریم. هر حرکت ممکن متناظر با شرایط آغازی داده‌شده‌ای تماماً با نقطه M_0 یعنی با عدد مختلط α_0 مشخص می‌شود (مدول α_0 دامنه نوسان و شناسه α_0 فاز آن را می‌دهد). از طرفی بنابر (۵) و (۷) داریم

$$\begin{cases} \hat{x}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha_0 e^{-i\omega t} + \alpha_0^* e^{i\omega t}] & \text{(الف-۹)} \\ \hat{p}(t) = -\frac{i}{\sqrt{2}}[\alpha_0 e^{-i\omega t} - \alpha_0^* e^{i\omega t}] & \text{(ب-۹)} \end{cases}$$

اما در مورد انرژی کلاسیک \mathcal{H} دستگاه این انرژی در طول زمان ثابت و برابر است با

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \frac{1}{2} m [\dot{p}(0)]^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 [x(0)]^2 \\ &= \frac{\hbar \omega}{2} \{[\hat{x}(0)]^2 + [\hat{p}(0)]^2\} \end{aligned} \quad (10)$$

که با در نظر گرفتن (۸)، چنین می‌دهد

$$\mathcal{H} = \hbar\omega |\alpha_0\rangle^2 \quad (11)$$

برای یک نوسانگر ماکروسکوپیکی، انرژی \mathcal{H} از کوانتوم $\hbar\omega$ بسیار بزرگتر است، به گونه‌ای که

$$|\alpha_0| \gg 1 \quad (12)$$

ب) شرایط معرف حالت‌های شبه‌کلاسیک

ما حالتی کوانتومی را جستجو می‌کنیم که در آن اندازه‌های میانگین $\langle X \rangle$ ، $\langle P \rangle$ ، و $\langle H \rangle$ عملاً، در هر لحظه، با اندازه‌های x ، p ، و \mathcal{H} متناظر با حرکت کلاسیک داده‌شده‌ای برابر باشند.

برای محاسبه $\langle X \rangle$ ، $\langle P \rangle$ ، و $\langle H \rangle$ ، عبارتهای زیر را به کار می‌بریم

$$\begin{aligned} \hat{X} &= \beta X = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger) \\ \hat{p} &= \frac{1}{\hbar\beta} P = -\frac{i}{\sqrt{2}}(a - a^\dagger) \end{aligned} \quad (13)$$

و

$$H = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (14)$$

برای یک حالت $|\psi(t)\rangle$ دلخواه، تحول عنصر ماتریس $\langle \psi(t) | a | \psi(t) \rangle = \langle a \rangle(t)$ با زمان چنین داده می‌شود. (بخش D-1-d از فصل سوم)

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle a \rangle(t) = \langle [a, H] \rangle(t) \quad (15)$$

اما

$$[a, a^\dagger a] = \hbar\omega a [a, H] = \hbar\omega \quad (16)$$

که می‌دهد

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle a \rangle(t) = \omega \langle a \rangle(t) \quad (17)$$

یعنی

$$\langle a \rangle(t) = \langle a \rangle(0) e^{-i\omega t} \quad (18)$$

تحول $\langle a^\dagger \rangle(t) = \langle \psi(t) | a^\dagger | \psi(t) \rangle$ از معادله مختلط همیوخ زیر پیروی می‌کند

$$\begin{aligned} \langle a^\dagger \rangle(t) &= \langle a^\dagger \rangle(0) e^{i\omega t} \\ &= \langle a \rangle^*(0) e^{i\omega t} \end{aligned} \quad (19)$$

(۱۸) و (۱۹) با معادله‌های کلاسیک (۷) همسان هستند.
معادله‌های (۱۸) و (۱۹) را در (۱۳) می‌بریم، به دست می‌آید

$$\begin{cases} \langle \hat{X} \rangle(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\langle a \rangle(0) e^{-i\omega t} + \langle a \rangle^*(0) e^{-i\omega t}] \\ \langle \hat{P} \rangle(t) = -\frac{i}{\sqrt{2}} [\langle a \rangle(0) e^{-i\omega t} - \langle a \rangle^*(0) e^{i\omega t}] \end{cases} \quad (20)$$

این نتایج را با (۹) مقایسه کنیم، می‌بینیم برای آنکه در لحظه دلخواه داشته باشیم

$$\begin{cases} \langle \hat{X} \rangle(t) = \hat{x}(t) \\ \langle \hat{P} \rangle(t) = \hat{p}(0) \end{cases} \quad (21)$$

لازم و کافی است که در لحظه $t = 0$ قرار دهیم

$$\langle a \rangle(0) = \alpha_0 \quad (22)$$

α_0 پارامتر مختلطی است که حرکت کلاسیکی را مشخص می‌کند و می‌خواهیم آن را هرچه بهتر به‌طور کوانتومی باز یابیم. بنابراین، بردار حالت به‌نچار شده $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle$ نوسانگر باید از شرط زیر پیروی کند

$$\langle \psi(0) | a | \psi(0) \rangle = \alpha_0 \quad (23)$$

اینک می‌بایست اندازه میانگین آن

$$\langle H \rangle = \hbar\omega \langle a^\dagger a \rangle(0) + \frac{\hbar\omega}{2} \quad (24)$$

با انرژی کلاسیک \mathcal{H} ، داده شده توسط (۱۱)، برابر باشد. چون برای یک نوسانگر کلاسیک، $|\alpha_0|$ از یک خیلی بزرگتر است [معادله (۱۲)]، از جمله $\hbar\omega/2$ که منشأ کاملاً کوانتومی دارد، بخش ۲-۴-۵ را ببینید)، در برابر $|\alpha_0| \hbar\omega$ چشم می‌پوشیم، به‌گونه‌ای که شرط دوم بر روی بردار حالت را بتوان چنین نوشت

$$\langle a^\dagger a \rangle(\alpha_0) = |\alpha_0|^2 \quad (25)$$

یعنی

$$\langle \psi(\alpha_0) | a^\dagger a | \psi(\alpha_0) \rangle = |\alpha_0|^2 \quad (26)$$

خواهیم دید که شرط‌های (۲۳) و (۲۶) برای تعیین بردار حالت بهنجار $|\psi(\alpha_0)\rangle$ (با تقریب یک عامل فاز ثابت) کافی هستند.

ج) حالت‌های شبه‌کلاسیک، ویژه بردارهای عملگر a هستند
عملگر $b(\alpha_0)$ را وارد می‌کنیم

$$b(\alpha_0) = a - \alpha_0 \quad (27)$$

در این صورت داریم

$$b^\dagger(\alpha_0)b(\alpha_0) = a^\dagger a - \alpha_0 a^\dagger - \alpha_0^* a + \alpha_0^* \alpha_0 \quad (28)$$

و مربع هنجاریت $|\psi(\alpha_0)\rangle$ عبارت است از

$$\begin{aligned} \langle \psi(\alpha_0) | b^\dagger(\alpha_0)b(\alpha_0) | \psi(\alpha_0) \rangle = \\ \langle \psi(\alpha_0) | a^\dagger a | \psi(\alpha_0) \rangle - \alpha_0 \langle \psi(\alpha_0) | a^\dagger | \psi(\alpha_0) \rangle \\ - \alpha_0^* \langle \psi(\alpha_0) | a | \psi(\alpha_0) \rangle + \alpha_0^* \alpha_0 \end{aligned} \quad (29)$$

شرط‌های (۲۳) و (۲۶) را در این تساوی می‌بریم، خواهیم یافت

$$\langle \psi(\alpha_0) | b^\dagger(\alpha_0)b(\alpha_0) | \psi(\alpha_0) \rangle = \alpha_0^* \alpha_0 - \alpha_0 \alpha_0^* - \alpha_0^* \alpha_0 + \alpha_0^* \alpha_0 = 0 \quad (30)$$

در نتیجه کیت $b(\alpha_0) | \psi(0) \rangle$ که دارای هنجار صفر است، صفر می‌شود

$$b(\alpha_0) | \psi(0) \rangle = 0 \quad (31)$$

یعنی

$$a | \psi(0) \rangle = \alpha_0 | \psi(0) \rangle \quad (32)$$

متقابلاً اگر بردار بهنجار $| \psi(0) \rangle$ از این رابطه پیروی کند، آشکار است که شرطهای (۲۳) و (۲۶) برقرارند.

بنابراین، به این نتیجه می‌رسیم که: حالت شبه‌کلاسیک وابسته به حرکت کلاسیک مشخص شده با پارامتر α_0 ، چنان است که $| \psi(0) \rangle$ بردار ویژه عملگر a با ویژه‌مقدار α_0 است. از این پس، ویژه‌بردار a با ویژه‌مقدار α را با $|\alpha\rangle$ نشان می‌دهیم:

$$a |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle \quad (33)$$

[بعد خواهیم دید که شرط (۳۳) با تقریب یک ضریب، یکناست].

۲. خواص حالت‌های $|\alpha\rangle$

الف) بسط $|\alpha\rangle$ بر روی پایهٔ حالت‌های مانای $|\varphi_n\rangle$

با به‌کار بردن بسطی بر روی پایهٔ حالت‌های $|\varphi\rangle$ ، کیت $|\alpha\rangle$ را که پاسخ (۳۳) است، تعیین می‌کنیم

$$|\alpha\rangle = \sum_n c_n(\alpha) |\varphi_n\rangle \quad (34)$$

در این صورت داریم

$$a |\alpha\rangle = \sum_n c_n(\alpha) \sqrt{n} |\varphi_{n-1}\rangle \quad (35)$$

و با بردن این تساوی در (۳۳) چنین به‌دست می‌آید

$$c_{n+1}(\alpha) = \frac{\alpha}{\sqrt{n+1}} c_n(\alpha) \quad (36)$$

این رابطه امکان می‌دهد که به روش بازگشتی همه ضریب‌های $c_n(\alpha)$ را برحسب $c_0(\alpha)$ تعیین کنیم

$$c_n(\alpha) = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} c_0(\alpha) \quad (۳۷)$$

از اینجا چنین بر می‌آید که هنگامی که $c_0(\alpha)$ اثبات شود، همه $c_n(\alpha)$ ها نیز ثابت خواهند بود. بنابراین بردار $|\alpha\rangle$ با تقریب یک عامل ضربی، یکتاست. $c_0(\alpha)$ را حقیقی و مثبت خواهیم گرفت و $|\alpha\rangle$ را بهنجار می‌کنیم. این کار، آن را به‌طور کامل تعیین می‌کند. در این مورد ضریب‌های $c_n(\alpha)$ در رابطه زیر صادقند:

$$\sum_n |c_n(\alpha)|^2 = 1 \quad (۳۸)$$

یعنی

$$|c_0(\alpha)|^2 \sum_n \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = |c_0(\alpha)|^2 e^{|\alpha|^2} = 1 \quad (۳۹)$$

با قراردادی که گذاردیم، نتیجه می‌شود

$$c_0(\alpha) = e^{-|\alpha|^2/2} \quad (۴۰)$$

و سرانجام

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |\varphi_n\rangle \quad (۴۱)$$

(ب) اندازه‌های ممکن انرژی در یک حالت $|\alpha\rangle$

نوسانگری را در حالت $|\alpha\rangle$ در نظر بگیریم. از (۴۱) پیداست که یک اندازه‌گیری انرژی می‌تواند نتیجه $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ را با احتمال زیر به دست دهد

$$\mathcal{P}_n(\alpha) = |c_n(\alpha)|^2 = \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} e^{-|\alpha|^2} \quad (۴۲)$$

بنابراین، توزیع احتمال $\mathcal{P}_n(\alpha)$ را که به دست می آوریم، یک توزیع پواسون است. چون

$$\mathcal{P}_n(\alpha) = \frac{|\alpha|^2}{n} \mathcal{P}_{n-1}(\alpha) \quad (43)$$

به آسانی می توان تحقیق کرد که $\mathcal{P}_n(\alpha)$ هنگامی به ماکزیموم خود می رسد که

$$n = |\alpha|^2 \quad \text{بخش درست} \quad (44)$$

برای محاسبه اندازه میانگین انرژی $\langle H \rangle_\alpha$ ، می توان (۴۲) و عبارت زیر را به کار برد

$$\langle H \rangle_\alpha = \sum_n \mathcal{P}_n(\alpha) \left[n + \frac{1}{4} \right] \hbar \omega \quad (45)$$

از این رو، سریعتر می توان دید که چون رابطه الحاقی (۳۳) عبارت است از

$$\langle \alpha | \alpha^\dagger = \alpha^* \langle \alpha | \quad (46)$$

داریم

$$\langle \alpha | a^\dagger a | \alpha \rangle = \alpha^* \alpha \quad (47)$$

و بنابراین

$$\langle H \rangle_\alpha = \hbar \omega \langle \alpha | \left[a^\dagger a + \frac{1}{4} \right] | \alpha \rangle = \hbar \omega \left[|\alpha|^2 + \frac{1}{4} \right] \quad (48)$$

از مقایسه این نتیجه با (۴۴)، درمی یابیم هنگامی که $|\alpha| \gg 1$ باشد، $\langle H \rangle_\alpha$ در اندازه نسبی با انرژی E_n که متناظر با اندازه ماکزیموم $\mathcal{P}_n(\alpha)$ است اندکی تفاوت دارد. اندازه میانگین $\langle H^2 \rangle_\alpha$ را محاسبه می کنیم

$$\langle H^2 \rangle_\alpha = \hbar^2 \omega^2 \langle \alpha | \left(a^\dagger a + \frac{1}{4} \right)^2 | \alpha \rangle \quad (49)$$

با به کار بردن (۳۳) و اینکه $[a, a^\dagger] = 1$ است، به آسانی به دست می آوریم

$$\langle H^2 \rangle_\alpha = \hbar^2 \omega^2 \left[|\alpha|^4 + 2|\alpha|^2 + \frac{1}{4} \right] \quad (50)$$

از آنجا نتیجه می‌شود

$$\Delta H_\alpha = \hbar\omega |\alpha| \quad (51)$$

اگر رابطه‌های (۴۸) و (۵۱) را با یکدیگر مقایسه کنیم، این تساویها نشان می‌دهند که، اگر $|\alpha|$ بسیار بزرگ باشد، داریم

$$\frac{\Delta H_\alpha}{\langle H \rangle_\alpha} \approx \frac{1}{|\alpha|} \ll 1 \quad (52)$$

انرژی حالت $|\alpha\rangle$ اندازه نسبی، به خوبی معین است.

یادداشت:

چون

$$H = \left(N + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (53)$$

از (۴۸) و (۵۱) بی‌درنگ به دست می‌آید

$$\begin{cases} \langle N \rangle_\alpha = |\alpha|^2 \\ \Delta N_\alpha = |\alpha| \end{cases} \quad (54)$$

بدینسان می‌بینیم که برای دستیابی به یک حالت شبه‌کلاسیک، چون $\Delta N_\alpha \gg 1$ می‌باشد باید شمار بسیار بزرگی از حالت‌های $|\varphi_n\rangle$ را به‌طور خطی برهم‌نهمیم. با این همه، اندازه نسبی پاشیدگی روی N بسیار اندک است:

$$\frac{\Delta N_\alpha}{\langle N \rangle_\alpha} = \frac{1}{|\alpha|} \ll 1 \quad (55)$$

ج) محاسبه $\langle X \rangle$ ، $\langle P \rangle$ ، ΔX و ΔP در یک حالت $|\alpha\rangle$

اندازه‌های میانگین $\langle X \rangle$ و $\langle P \rangle$ را می‌توان با بیان X و P برحسب a و a^\dagger [فرمول (۱۳)] و با

بکار بستن (۳۳) و (۳۴) به دست آورد، خواهیم یافت

$$\begin{aligned}\langle X \rangle_{\alpha} &= \langle \alpha | X | \alpha \rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re}(\alpha) \\ \langle P \rangle_{\alpha} &= \langle \alpha | P | \alpha \rangle = \sqrt{2m\hbar\omega} \operatorname{Im}(\alpha)\end{aligned}\quad (56)$$

یک محاسبه همانند می دهد

$$\begin{aligned}\langle X^2 \rangle_{\alpha} &= \frac{\hbar}{2m\omega} [(\alpha + \alpha^*)^2 + 1] \\ \langle P^2 \rangle_{\alpha} &= \frac{m\hbar\omega}{2} [1 - (\alpha - \alpha^*)^2]\end{aligned}\quad (57)$$

و بنابراین

$$\begin{aligned}\Delta X_{\alpha} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \\ \Delta P_{\alpha} &= \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\end{aligned}\quad (58)$$

نه ΔX_{α} به α بستگی دارد و نه ΔP_{α} . از طرفی توجه کنید که $\Delta X \cdot \Delta P$ مقدار مینیموم خود را می یابد

$$\Delta X_{\alpha} \cdot \Delta P_{\alpha} = \hbar/2 \quad (59)$$

دا عملگر $D(\alpha)$: توابع موج $\psi_{\alpha}(x)$

عامل $D(\alpha)$ را که با رابطه زیر تعریف می شود، در نظر می گیریم

$$D(\alpha) = e^{\alpha a^{\dagger} - \alpha^* a} \quad (60)$$

این عملگر یکانی است، زیرا

$$D^{\dagger}(\alpha) = e^{\alpha^* a - \alpha a^{\dagger}} \quad (61)$$

فوراً می‌انجامد به

$$D(\alpha)D^\dagger(\alpha) = D^\dagger(\alpha)D(\alpha) = 1 \quad (62)$$

چون جابه‌جاگر عملگرهای αa^\dagger و $-\alpha^* a$ برابر با $\alpha^* \alpha$ است که یک عدد است، می‌توان برابری (۶۳) از مکمل BII (جلد اول، ترجمه فارسی همین کتاب) را به‌کار برد و چنین نوشت

$$D(\alpha) = e^{-|\alpha|^2/2} e^{\alpha a^\dagger} e^{-\alpha^* a} \quad (63)$$

اکنون کت $D(\alpha) | \varphi_0 \rangle$ را حساب می‌کنیم، چون

$$\begin{aligned} e^{-\alpha^* a} | \varphi_0 \rangle &= \left[1 - \alpha^* a + \frac{\alpha^{*2}}{2!} a^2 + \dots \right] | \varphi_0 \rangle \\ &= | \varphi_0 \rangle \end{aligned} \quad (64)$$

پس

$$\begin{aligned} D(\alpha) | \varphi_0 \rangle &= e^{-|\alpha|^2/2} e^{\alpha a^\dagger} | \varphi_0 \rangle \\ &= e^{-|\alpha|^2/2} \sum_n \frac{(\alpha a^\dagger)^n}{n!} | \varphi_0 \rangle \\ &= e^{-|\alpha|^2/2} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} | \varphi_n \rangle \end{aligned} \quad (65)$$

از مقایسه (۴۱) و (۶۵)، می‌بینیم که

$$| \alpha \rangle = D(\alpha) | \varphi_0 \rangle \quad (66)$$

بنابراین $D(\alpha)$ تبدیل یکانی‌ای است که از حالت پایه $| \varphi_0 \rangle$ حالت شبه کلاسیک $| \alpha \rangle$ را می‌سازد. فرمول (۶۶) امکان می‌دهد تابع موج را به‌دست آوریم

$$\psi_\alpha(x) = \langle x | \alpha \rangle \quad (67)$$

این تابع، حالت شبه کلاسیک $\langle \alpha \rangle$ را در نمایش $\{ |x\rangle \}$ مشخص می‌کند. برای محاسبه

$$\psi_\alpha(x) = \langle x | D(\alpha) | \varphi_0 \rangle \quad (۶۸)$$

عملگر $\alpha a^\dagger - \alpha^* a$ را برحسب X و P می‌نویسیم

$$\alpha a^\dagger - \alpha^* a = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left(\frac{\alpha - \alpha^*}{\sqrt{2}} \right) X - \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \left(\frac{\alpha + \alpha^*}{\sqrt{2}} \right) P \quad (۶۹)$$

با به‌کار بردن مجدد فرمول (۶۳) از مکمل BII (جلد اول، ترجمه فارسی همین کتاب) به‌دست می‌آوریم

$$D(\alpha) = e^{\alpha a^\dagger - \alpha^* a} = e^{\sqrt{m\omega/\hbar}(\alpha - \alpha^*/\sqrt{2})X} e^{-i/\sqrt{m\hbar\omega}(\alpha + \alpha^*/\sqrt{2})P} e^{(\alpha^{*2} - \alpha^2/2)} \quad (۷۰)$$

این نتیجه را در (۶۸) ببریم، خواهیم یافت

$$\begin{aligned} \psi_\alpha(x) &= e^{(\alpha^{*2} - \alpha^2/2)} \langle x | e^{\sqrt{m\omega/\hbar}(\alpha - \alpha^*/\sqrt{2})X} e^{-i/\sqrt{m\hbar\omega}(\alpha + \alpha^*/\sqrt{2})P} | \varphi_0 \rangle \\ &= e^{(\alpha^{*2} - \alpha^2/2)} e^{\sqrt{m\omega/\hbar}(\alpha - \alpha^*/\sqrt{2})x} \langle x | e^{-i/\sqrt{m\hbar\omega}(\alpha + \alpha^*/\sqrt{2})P} | \varphi_0 \rangle \end{aligned} \quad (۷۱)$$

اما، عملگر $e^{-i\lambda P/\hbar}$ عمگر انتقال به اندازه λ در امتداد محور Ox است (رک. EII جلد اول، ترجمه فارسی همین کتاب)

$$\langle x | e^{-i/\sqrt{m\hbar\omega}(\alpha + \alpha^*/\sqrt{2})P} = \langle x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\alpha + \alpha^*) | \quad (۷۲)$$

بنابراین تساوی (۷۱) می‌دهد

$$\psi_\alpha(x) = e^{(\alpha^{*2} - \alpha^2/2)} e^{(\sqrt{m\omega/\hbar})(\alpha - \alpha^*/\sqrt{2})x} \varphi_0 \left(x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\alpha + \alpha^*) \right) \quad (۷۳)$$

اگر α و α^* را برحسب $\langle X \rangle_\alpha$ و $\langle P \rangle_\alpha$ بنویسیم [فرمولهای (۵۶)]، بدین صورت درمی‌آید

$$\psi_\alpha(x) = e^{i\theta_\alpha} e^{i\langle P \rangle_\alpha x/\hbar} \varphi_0(x - \langle X \rangle_\alpha) \quad (۷۴)$$

که در آن ضریب فاز کلی $e^{i\theta_\alpha}$ چنین تعریف می‌شود

$$e^{i\theta_\alpha} = e^{\frac{\alpha^* \psi - \alpha^2}{\hbar}} \quad (۷۵)$$

تساوی (۷۴) نشان می‌دهد که به‌آسانی می‌توان $\psi_\alpha(x)$ را از تابع موج $\varphi_0(x)$ حالت پایه نوسانگر به‌دست آورد؛ کافی است این تابع را در امتداد Ox به اندازه $\langle X \rangle_\alpha$ انتقال دهیم و آن را در تابع نمایی نوسانی $e^{i(P)\alpha x/\hbar}$ ضرب کنیم (چون عامل $e^{i\theta_\alpha}$ هیچ نقش فیزیکی ندارد و می‌توان آن را حذف کرد).^۱

اگر تابع φ_0 را در (۷۴) توسط عبارت صریح آن بنویسیم، سرانجام به‌دست خواهیم آورد

$$\psi_\alpha(x) = e^{i\theta_\alpha} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp \left\{ - \left[\frac{x - \langle X \rangle_\alpha}{\sqrt{\Delta X_\alpha}} \right]^2 + i \langle P \rangle_\alpha \frac{x}{\hbar} \right\} \quad (۷۶)$$

بنابراین شکل بسته موج وابسته به حالت $|\alpha\rangle$ می‌شود

$$|\psi_\alpha(x)|^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \exp \left\{ - \frac{1}{2} \left[\frac{x - \langle X \rangle_\alpha}{\Delta X_\alpha} \right]^2 \right\} \quad (۷۷)$$

حالت $|\alpha\rangle$ هر چه باشد یک بسته موج گاوسی به‌دست می‌آید. این نتیجه با این واقعیت در ارتباط است که حاصلضرب $\Delta X_\alpha \cdot \Delta P_\alpha$ همیشه مینیموم است (رک. مکمل CIII، جلد اول، ترجمه فارسی همین کتاب).

ه) حاصلضرب نرده‌ای دو حالت $|\alpha\rangle$ · رابطه بستاری

حالت‌های $|\alpha\rangle$ ویژه‌بردارهای عملگر a هستند که هرمیتی نیست. بنابراین هیچ دلیلی در دست نیست که این حالتها از رابطه‌های تعامد و بستاری پیروی کنند. این موضوع را در این بخش بررسی خواهیم کرد. نخست دو ویژه‌کت $|\alpha\rangle$ و $|\alpha'\rangle$ از عملگر a را در نظر می‌گیریم. تساوی (۴۱) بی‌درنگ حاصلضرب نرده‌ای آنها را به‌دست می‌دهد، زیرا

$$\langle \alpha | \alpha' \rangle = \sum_n c_n^*(\alpha) c_n(\alpha') \quad (۷۸)$$

۱. البته تابع نمایی $e^{i(P)\alpha x/\hbar}$ یک ضریب فاز کلی نیست، زیرا مقدار آن به x بستگی دارد. حضور این تابع نمایی در (۷۴) تضمین می‌کند که اندازه میانگین P ، در حالت توصیف شده با $\psi_\alpha(x)$ ، برابر با $\langle P \rangle_\alpha$ باشد.

بنابراین داریم

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \alpha' \rangle &= e^{-|\alpha|^2/2} e^{-|\alpha'|^2/2} \sum_n \frac{(\alpha^* \alpha')^n}{n!} \\ &= e^{-|\alpha|^2/2} e^{-|\alpha'|^2/2} e^{\alpha^* \alpha'} \end{aligned} \quad (79)$$

از آنجا نتیجه می‌شود

$$|\langle \alpha | \alpha' \rangle|^2 = e^{-|\alpha - \alpha'|^2} \quad (80)$$

پس این حاصلضرب هیچ‌گاه صفر نیست.

با این همه، نشان خواهیم داد که حالت‌های $|\alpha\rangle$ ، در واقع، از رابطه بستاری پیروی می‌کند که چنین نوشته می‌شود

$$\frac{1}{\pi} \iint |\alpha\rangle \langle \alpha| d\{\operatorname{Re} \alpha\} d\{\operatorname{Im} \alpha\} = 1 \quad (81)$$

برای به دست آوردن این رابطه، در طرف نخست (۸۱) $|\alpha\rangle$ را با عبارت (۴۱) آن جایگزین می‌کنیم. خواهیم یافت

$$\frac{1}{\pi} \iint e^{-|\alpha|^2} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |\varphi_n\rangle \sum_m \frac{\alpha^{*m}}{\sqrt{m!}} \langle \varphi_m| d\{\operatorname{Re} \alpha\} d\{\operatorname{Im} \alpha\} \quad (82)$$

یعنی با به کار بردن مختصات قطبی در صفحه مختلط (با قرار دادن $\alpha = \rho e^{i\varphi}$) داریم

$$\frac{1}{\pi} \int_0^\infty \rho d\rho \int_0^{2\pi} d\varphi e^{-\rho^2} \sum_{nm} e^{i(n-m)\varphi} \frac{\rho^{n+m}}{\sqrt{n!m!}} |\varphi_n\rangle \langle \varphi_m| \quad (83)$$

انتگرال نسبت به φ به آسانی محاسبه می‌شود

$$\int_0^{2\pi} e^{i(n-m)\varphi} d\varphi = 2\pi \delta_{nm} \quad (84)$$

که در نتیجه برای (۸۳) داریم

$$\sum_n I_n \frac{1}{n!} |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \quad (85)$$

با

$$I_n = 2 \int_0^\infty \rho d\rho e^{-\rho^2} \rho^{2n} = \int_0^\infty du e^{-u} u^n \quad (86)$$

با انتگرال‌گیری جزء به جزء یک رابطه بازگشتی برای I_n به دست می‌آید

$$I_n = n I_{n-1} \quad (۸۷)$$

پاسخ این معادله عبارت است از

$$I_n = n! I_0 = n! \quad (۸۸)$$

با بردن این نتیجه در (۸۵)، می‌بینیم که طرف نخست فرمول (۸۱) سرانجام چنین نوشته می‌شود

$$\sum_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \quad (۸۹)$$

در نتیجه فرمول (۸۱) ثابت می‌شود.

۳. تحول یک حالت شبه کلاسیک با زمان

یک نوسانگر هماهنگ را در نظر می‌گیریم که، در لحظه $t = 0$ ، در یک حالت خاص $|\alpha\rangle$ است

$$|\psi(0)\rangle = |\alpha_0\rangle \quad (۹۰)$$

چگونه خواص فیزیکی این نوسانگر با زمان تحول می‌یابند؟ از پیش می‌دانیم (بخش ۱، قسمت ب) که اندازه‌های میانگین $\langle X \rangle(t)$ ، $\langle P \rangle(t)$ همواره با کمیت‌های کلاسیک متناظر برابر می‌مانند. در اینجا خواص جالب دیگر بردار حالت $|\psi(t)\rangle$ را بررسی خواهیم کرد.

الف) یک حالت شبه کلاسیک همواره ویژه بردار a باقی می‌ماند

به کمک (۴۱) می‌توان قاعده عمومی را به کار برد که امکان می‌دهد $|\psi(t)\rangle$ را، هنگامی که هامیلتونی به زمان وابسته نباشد، به دست آورد (فصل سوم، بخش a-۲-D جلد اول، ترجمه فارسی همین کتاب):

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-|\alpha_0|^2 t / \hbar} \sum_n \frac{\alpha_0^n}{\sqrt{n!}} e^{-iE_n t / \hbar} |\varphi_n\rangle \\ &= e^{-i\omega t / 2} e^{-|\alpha_0|^2 t / \hbar} \sum_n \frac{\alpha_0^n e^{-i\omega t}}{\sqrt{n!}} |\varphi_n\rangle \end{aligned} \quad (۹۱)$$

اگر این نتیجه را با (۴۱) مقایسه کنیم، می‌بینیم که برای رسیدن از $|\alpha_0\rangle = |\psi(0)\rangle$ ، به $|\psi(t)\rangle$ کافی است α_0 را به $\alpha_0 e^{-i\omega t}$ تغییر داد و کیت حاصل را در $e^{-i\omega t / 2}$ ضرب کرد (یک ضریب

فاز کلی بدون پیامد فیزیکی است)

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\omega t/2} |\alpha\rangle = |\alpha_0 e^{-i\omega t}\rangle \quad (92)$$

به عبارت دیگر، می‌بینیم که حالت شبه‌کلاسیک در طول زمان همواره ویژه بردار a ، با ویژه مقدار $\alpha_0 e^{i\omega t}$ باقی می‌ماند. این ویژه مقدار چیزی جز پارامتر $\alpha(t)$ شکل ۱ (شاخص نقطه M)، که در هر لحظه مشخص‌کننده نوسانگر کلاسیکی است که حالت $|\psi(t)\rangle$ حرکت آن را به دست می‌دهد، نیست.

ب) تحول خواص فیزیکی

با به کار بردن (۹۲) و با تغییر α به $\alpha_0 e^{-i\omega t}$ در (۵۶)، بلافاصله به دست می‌آوریم

$$\begin{cases} \langle X \rangle(t) = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re}[\alpha_0 e^{-i\omega t}] \\ \langle P \rangle(t) = \sqrt{2m\hbar\omega} \operatorname{Im}[\alpha_0 e^{-i\omega t}] \end{cases} \quad (93)$$

چنانکه پیش‌بینی می‌شد، این معادله‌ها مشابه معادله‌های کلاسیک (۹) هستند. انرژی میانگین نوسانگر چنین ناوابسته به زمان می‌شود

$$\langle H \rangle = \hbar\omega \left[|\alpha_0|^2 + \frac{1}{2} \right] \quad (94)$$

بنابر (۱۵) و (۵۸) انحرافهای مربعی میانگین ΔH ، ΔX و ΔP ، برابر با مقدار زیر می‌باشند

$$\Delta H = \hbar\omega |\alpha_0| \quad (95)$$

و

$$\begin{cases} \Delta X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \\ \Delta P = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \end{cases} \quad (96)$$

ΔX و ΔP به زمان وابسته نیستند. بسته موج در هر لحظه، یک بسته موج مینیموم باقی می‌ماند.

ج) حرکت بسته موج

بسته موج را در لحظه t محاسبه می‌کنیم

$$\psi(x, t) = \langle x | \psi(t) \rangle \quad (97)$$

که در آن $|\psi(t)\rangle$ با (۹۲) داده شده است. از (۷۶) به دست می‌آید

$$\psi(x, t) = e^{i\theta_0} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} e^{-i\omega t/2} e^{i\alpha \langle P \rangle(t)/\hbar} e^{-[\frac{x - \langle X \rangle(t)}{\Delta X}]^2} \quad (98)$$

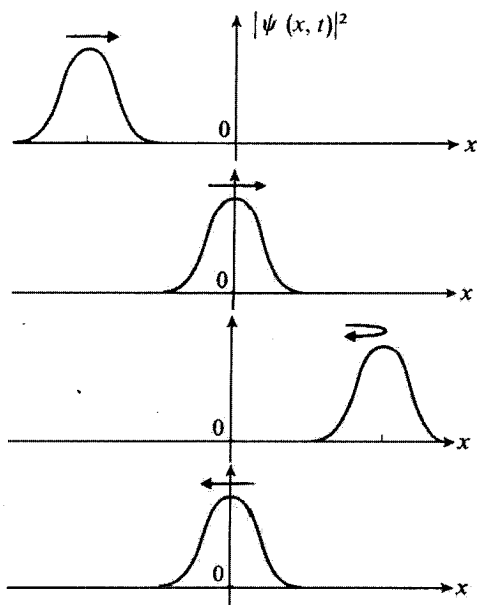
پس در لحظه t ، هنوز بسته موج گاوسی است و شکل آن با گذشت زمان تغییر نمی‌کند، زیرا

$$|\psi(x, t)|^2 = |\varphi_0 [x - \langle X \rangle(t)]|^2 \quad (99)$$

در تمام زمانها "مینیموم" باقی می‌ماند [معادله (۹۶)].

شکل ۲ حرکت بسته موج را نشان می‌دهد که بدون تغییر شکل یافتن، یک نوسان دوره‌ای Ox در طول $T (= 2\pi/\omega)$ انجام می‌دهد. در مکمل G_I (فصل اول، جلد اول ترجمه فارسی همین کتاب) دیدیم که یک بسته موج گاوسی هنگامی که آزاد است، با تغییر شکل منتشر می‌شود، زیرا پهنای آن تغییر می‌کند ("پهن‌شدگی" بسته موج). در اینجا می‌بینیم که برای بسته موجی که تحت تأثیر یک پتانسیل سهمی شکل است چنین پهن‌شدگی رخ نمی‌دهد. از دیدگاه فیزیکی، چنین نتیجه‌ای از آنجا پدید می‌آید که گرایش بسته موج به پهن‌شدن با عمل پتانسیل جبران می‌شود که اثرش پس زدن بسته موج از ناحیه‌هایی که در آنجا $V(x)$ بسیار بزرگ است، به طرف مبدأ می‌باشد.

هنگامی که $|\alpha|$ بسیار بزرگ است، چه تغییری در این نتایج پدید می‌آید؟ انحرافهای ΔX و ΔP ، چنانکه (۹۶) نشان می‌دهد تغییر نمی‌کنند. برعکس، دامنه‌های نوسانهای $\langle X \rangle(t)$ و $\langle P \rangle(t)$ در برابر ΔX و ΔP بزرگ می‌شوند. بنابراین با انتخاب مقدار به اندازه کافی بزرگی از $|\alpha|$ ، می‌توان یک حرکت کوانتومی به دست آورد که موضع و تکانه نوسان مربوط به آن، در اندازه نسبی، تا حد دلخواه معین باشد. بنابراین هنگامی که $|\alpha| \gg 1$ است، یک حالت $|\alpha\rangle$ حرکت یک نوسانگر هماهنگ ماکروسکوپیکی را به خوبی توصیف می‌کند و برای آن می‌توان موضع، تکانه، و انرژی را همانند کمیتهای کلاسیک در نظر گرفت.



شکل ۲ حرکت بسته موج گاوسی وابسته به یک حالت $|\alpha\rangle$: تحت تأثیر پتانسیل سهمی شکل $V(x)$ ، بسته موج بدون تغییر شکل یافتن نوسان می‌کند.

۴. مثالی از کاربرد: مطالعه کوانتومی یک نوسانگر ماکروسکوپیکی

برای آنکه مثالی به دست دهیم، یک جسم ماکروسکوپیکی به جرم $m = 1 \text{ kg}$ را در نظر می‌گیریم که از انتهای طنابی آویخته شده و در میدان گرانش ($g \simeq 10 \text{ m/s}^2$) قرار دارد. می‌دانیم که برای نوسانهای کوچک دوره حرکت چنین است

$$T = 2\pi\sqrt{\frac{l}{g}} \quad (100)$$

دراین مورد داریم

$$T \simeq 0.63 \text{ s}$$

$$\omega = 10 \text{ rad/s} \quad (101)$$

اکنون فرض کنیم که این نوسانگر یک حرکت دوره‌ای با دامنه $x_M = 1 \text{ cm}$ انجام دهد. حالت کوانتومی که نوسان آن را به بهترین وجه نشان می‌دهد کدام است؟

لحظه‌ای پیش دیدیم که این حالت یک حالت (α) است، که بنابر (۹۳)، α در این رابطه صدق می‌کند

$$|\alpha| = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x_M \quad (102)$$

یعنی در این مورد

$$|\alpha| \simeq \sqrt{5} \times 10^{15} \simeq 2.2 \times 10^{15} \gg 1 \quad (103)$$

شناسه α با فاز آغازی حرکت تعیین می‌شود.

انحرافهای ΔX و ΔP در این صورت عبارت‌اند از:

$$\begin{cases} \Delta X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \simeq 2.2 \times 10^{-18} \text{ m} \ll x_M \\ \Delta P = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \simeq 2.2 \times 10^{-17} \text{ kg m/s} \end{cases} \quad (104)$$

اما در مورد ΔV ، انحراف ریشه میانگین مربعی سرعت، برابر است با

$$\Delta V \simeq 2.2 \times 10^{-17} \text{ m/s} \quad (105)$$

چون سرعت ماکزیموم نوسانگر 1 m/s است، می‌بینیم که عدم قطعیت بر روی موضع و سرعت آن در مقابل کمیت‌هایی که در مسئله دخالت دارند ناچیز است. به‌عنوان مثال، ΔX کمتر از یک فرمی (10^{-15} m)، یعنی کمتر از اندازه تقریبی یک هسته است. روشن است که اندازه‌گیری یک طول ماکروسکوپیکی با این دقت خارج از موضوع است. سرانجام، انرژی نوسان با یک دقت نسبی عالی شناخته شده است، زیرا بنابر (۵۲) داریم

$$\frac{\Delta H}{\langle H \rangle} \simeq \frac{1}{|\alpha|} \simeq 0.4 \times 10^{-15} \ll 1 \quad (106)$$

بنابراین، قوانین مکانیک کلاسیک برای بررسی تحول نوسانگر ماکروسکوپیکی مورد نظر کاملاً کافی هستند.

مراجع برای مطالعه بیشتر

سخنرانیهای گلوبدر (۲۰۱۵).

مکمل ۸

مدهای طبیعی ارتعاشی دو نوسانگر هماهنگ جفتیده

۱. ارتعاشهای دو ذره در مکانیک کلاسیک

الف) حل معادله‌های حرکت

ب) معنی فیزیکی هر یک از مدها

ج) حرکت دستگاه در حالت عمومی

۲. حالت‌های ارتعاشی دستگاه در مکانیک کوانتومی

الف) رابطه‌های جابه‌جایی

ب) تبدیل عملگر هامیلتونی

ج) حالت‌های مانای دستگاه

د) تحول اندازه‌های میانگین

در این مکمل به مطالعه حرکت دو نوسانگر هماهنگ (یک بعدی) جفتیده می‌پردازیم. سودمندی این مطالعه در آن است که امکان می‌دهد یک مفهوم مهم فیزیکی را در مورد بسیار ساده‌ای وارد کنیم: "مفهوم مدهای طبیعی ارتعاش". این مفهوم که چه در مکانیک کوانتومی و چه در مکانیک کلاسیک بدان بر می‌خوریم، در مسائل بیشماری وارد می‌شود: به عنوان مثال در مطالعه ارتعاش اتم‌های یک بلور (مکمل ۱۰ همین فصل را ببینید) و در ارتعاش الکترومغناطیسی تابش (مکمل ۱۱ همین فصل را ببینید).

بدین ترتیب، دو ذره (۱) و (۲) به جرم یکسان m را در نظر بگیریم که در روی محور Ox تغییر مکان یابند و با طولهای x_1 و x_2 مشخص شوند. نخست فرض می‌کنیم که انرژی پتانسیل آنها عبارت است از

$$U_0(x_1, x_2) = \frac{1}{2} m \omega^2 (x_1 - a)^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 (x_2 + a)^2 \quad (1)$$

هنگامی که $x_1 = a$ و $x_2 = -a$ است، انرژی پتانسیل $U_0(x_1, x_2)$ مینیموم است و دو ذره در ترازمندی پایدار هستند. اگر دو ذره از وضع ترازمندیشان منحرف شوند، به ترتیب تحت تأثیر نیروهای

F_1 و F_2 به صورت زیر قرار می‌گیرند

$$\begin{cases} F_1 = -\frac{\partial}{\partial x_1} U_0(x_1, x_2) = -m\omega^2(x_1 - a) \\ F_2 = -\frac{\partial}{\partial x_2} U_0(x_1, x_2) = -m\omega^2(x_2 + a) \end{cases} \quad (2)$$

و حرکت آنها با معادله‌های

$$\begin{cases} m \frac{d^2}{dt^2} x_1(t) = -m\omega^2(x_1 - a) \\ m \frac{d^2}{dt^2} x_2(t) = -m\omega^2(x_2 + a) \end{cases} \quad (3)$$

داده می‌شود. بنابراین، هر یک از دو ذره به طور مستقل حرکت‌های سینوسی در اطراف موضع ترازمندی خود انجام می‌دهد. دامنه این حرکتها هر دو دلخواه‌اند^۱ و می‌توان آنها را با انتخاب شرایط آغازی مناسب، تثبیت کرد.

اکنون فرض کنیم که انرژی پتانسیل $U(x_1, x_2)$ ذره چنین باشد

$$U(x_1, x_2) = U_0(x_1, x_2) + V(x_1, x_2) \quad (4)$$

با

$$V(x_1, x_2) = \lambda m \omega^2 (x_1 - x_2)^2 \quad (5)$$

(λ یک ثابت مثبت بی‌بعد است که ما آن را ثابت جفتیدگی می‌نامیم). باید به نیروهای F_1 و F_2 ، که با (۲) بیان شده‌اند، نیروهای F'_1 و F'_2 را که با روابط زیر داده می‌شوند افزود

$$\begin{cases} F'_1 = -\frac{\partial}{\partial x_1} V(x_1, x_2) = 2\lambda m \omega^2 (x_2 - x_1) \\ F'_2 = -\frac{\partial}{\partial x_2} V(x_1, x_2) = 2\lambda m \omega^2 (x_1 - x_2) \end{cases} \quad (6)$$

دیده می‌شود که وارد کردن $V(x_1, x_2)$ معادل این است که یک نیروی جاذبه میان دو ذره متناسب با فاصله میان آنها به حساب آید. پس دو ذره (۱) و (۲) دیگر مستقل نیستند. اکنون

۱. البته، انتخاب پتانسیل (۱) ایجاب می‌کند که برخورد‌هایی را که در صورت بزرگ بودن دامنه به اندازه کافی امکانپذیر می‌شوند به حساب نیاوریم.

حرکت آنها به چه صورتی است؟ پیش از بررسی این مسئله در مکانیک کوانتومی، نتایجی را که مکانیک کلاسیک می دهد یادآور می شویم.

۱. ارتعاشهای دو ذره در مکانیک کلاسیک

الف) حل معادله های حرکت

در حضور جفتیدگی $V(x_1, x_2)$ ، باید به جای (۳) دستگاه معادله های دیفرانسیل جفتیده زیر را جایگزین کرد

$$\begin{cases} m \frac{d^2}{dt^2} x_1(t) = -m\omega^2(x_1 - a) + 2\lambda m\omega^2(x_2 - x_1) \\ m \frac{d^2}{dt^2} x_2(t) = -m\omega^2(x_2 + a) + 2\lambda m\omega^2(x_1 - x_2) \end{cases} \quad (7)$$

می دانیم که چگونه باید چنین دستگاهی را حل کرد [مثلاً فصل ۴، بخش ۳-۳-۳ الف]. ماتریس K را که از ضریبهای طرف دوم (۷) تشکیل شده است، قطری می کنیم

$$K = -m\omega^2 \begin{pmatrix} 1 + 2\lambda & -2\lambda \\ -2\lambda & 1 + 2\lambda \end{pmatrix} \quad (8)$$

سپس به جای $x_1(t)$ و $x_2(t)$ ترکیبهای خطی این دو تابع را (که با ویژه بردارهای K داده می شوند) وارد می کنیم، که تغییرات زمانی آنها از معادله های دیفرانسیل خطی ناجفتیده ای (با ضرایبی که ویژه مقدارهای K هستند) پیروی می کنند.

در حالتی که مورد توجه ماست، این ترکیبهای خطی عبارت اند از

$$x_G(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [x_1(t) + x_2(t)] \quad (9)$$

(موضع مرکز جرم دو ذره) و

$$x_R(t) = x_1(t) - x_2(t) \quad (10)$$

(طول "ذره نسبی"). در واقع با بردن (۹) و (۱۰) در (۷) (و با جمع و تفریق) به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2} x_G(t) &= -\omega^2 x_G(t) \\ \frac{d^2}{dt^2} x_R(t) &= -\omega^2 [x_R(t) - 2a] - 4\lambda\omega^2 x_R(t) \end{aligned} \quad (11)$$

از این معادله‌ها می‌توان بی‌درنگ انتگرال گرفت

$$\begin{cases} x_G(t) = x_G^* \cos(\omega_G t + \theta_G) \\ x_R(t) = \frac{2a}{1+4\lambda} + x_R^* \cos(\omega_R t + \theta_R) \end{cases} \quad (12)$$

با

$$\begin{cases} \omega_G = \omega \\ \omega_R = \omega\sqrt{1+4\lambda} \end{cases} \quad (13)$$

$\theta_G, \theta_R, x_G^*, x_R^*$ ثابت‌های انتگرال‌گیری هستند که با شرایط آغازی تعیین می‌شوند. برای به دست آوردن حرکت ذرات (۱) و (۲) کافی است فرمول (۹) و (۱۰) را معکوس کنیم

$$\begin{cases} x_1(t) = x_G(t) + \frac{1}{4}x_R(t) \\ x_2(t) = x_G(t) - \frac{1}{4}x_R(t) \end{cases} \quad (14)$$

و (۱۲) را در این تساویها می‌بریم.

(ب) معنی فیزیکی هر یک از مدها

به کمک تغییر تابعی که با (۹) و (۱۰) انجام شد، توانستیم حرکت دو ذره برهم‌کنش‌کننده را به دست آوریم. بدین ترتیب که به آنها دو "ذره خیالی" (G) و (R) یا طولهای $x_G(t)$ و $x_R(t)$ را نسبت دادیم که با هم برهم‌کنش ندارند، و بنابراین حرکت آنها ناوابسته به یکدیگر است، به گونه‌ای که می‌توان با انتخاب مناسبی از شرایط آغازی، به آنها دامنه و فاز دلخواهی داد. به عنوان مثال ممکن است یکی از این دو ذره خیالی را ساکن گرفت بدون آنکه دیگری دارای چنین وضعی باشد: در این صورت گوئیم که یک "مد ارتعاشی" دستگاه برانگیخته شده است. باید به خوبی دریافت که

در یک مد طبیعی ارتعاشی، ذره‌های (۱) و (۲) هر دو با یک بسامد زاویه‌ای (ω_R) یا (ω_G) بسته به مد) در حرکت‌اند. پاسخی از معادلات حرکت وجود ندارد که بنا بر آن یکی از ذره‌های حقیقی (۱) و (۲) بی حرکت بماند، در حالی که دیگری ارتعاش کند. اگر در لحظه $t = 0$ تنها به یکی از دو ذره، (۱) یا (۲)، سرعت آغازی داده شود، نیروی جفتیدگی دیگری را به حرکت در خواهد آورد (بخش ج همین بخش را ببینید).

البته ساده‌ترین مورد آن است که هیچ‌کدام از دو مد برانگیخته نشده باشد. چنین وضعی، در فرمولهای (۱۲)، متناظر است با $\dot{x}_G = \dot{x}_R = 0$. با این حال $x_G(t)$ و $x_R(t)$ پیوسته به ترتیب برابر با صفر و $2a/(1 + 4\lambda)$ می‌مانند، که بنا بر (۱۴) چنین به دست می‌آید

$$x_1 = -x_2 = \frac{a}{1 + 4\lambda} \quad (15)$$

دستگاه نوسان نمی‌کند و دو ذره (۱) و (۲) در موضع جدید ترازمندیشان که با (۱۵) داده می‌شود بی حرکت می‌مانند (می‌توان واقعاً تحقیق کرد که، برای این اندازه‌های x_1 و x_2 ، نیروهای وارد بر ذره‌ها صفرند. این واقعیت که موضعهای ترازمندی با بودن جفتیدگی نزدیکتر از مورد $\lambda = 0$ به یکدیگرند، به‌طور فیزیکی از جاذبه متقابل آنها ناشی می‌شود).

برای آنکه تنها مد متناظر با $x_G(t)$ برانگیخته شود، کافی است در لحظه آغازی، دو ذره (۱) و (۲) را در همان فاصله $2a/(1 + 4\lambda)$ مورد پیشین بگذاریم و به آنها سرعت‌های برابر بدهیم. در این صورت خواهیم دید که $x_R(t)$ همواره با $2a/(1 + 4\lambda)$ برابر می‌ماند (شرایط آغازی ایجاب می‌کند که \dot{x}_R صفر باشد). دو ذره "یکپارچه" حرکت می‌کنند ولی بی آنکه فاصله‌شان تغییر کند، یک حرکت را انجام می‌دهند. برای این مد می‌توان مجموعه دو ذره را همانند یک جسم تغییرناپذیر به جرم $2m$ در نظر گرفت که بر روی آن نیروی $F_1 + F_2 = -2m\omega^2 x_G(t)$ وارد می‌شود. اینک می‌فهمیم که چرا بسامد زاویه‌ای این مد $\omega = \omega_G$ است [فرمول (۳-۵)].

برای آنکه تنها مد متناظر با $x_R(t)$ برانگیخته شود، کافی است یک حالت آغازی را برگزینیم که موضعها و سرعت‌های آغازی دو ذره مختلف‌العلامه باشند. در این صورت چنین می‌بایم که در هر لحظه بعدی $x_G(t) = 0$ است و حرکات دو ذره نسبت به مبدأ O قرینه‌اند. برای این مد، فاصله $(x_2 - x_1)$ تغییر می‌کند و نیروی جاذبه میان دو ذره در معادله‌های حرکت وارد می‌شود. از این رو است که بسامد زاویه‌ای این مد دیگر ω نیست، بلکه $\omega_R = \omega\sqrt{1 + 4\lambda}$ است.

متغیرهای دینامیکی $x_G(t)$ و $x_R(t)$ وابسته به مدهای طبیعی مستقل، یعنی وابسته به ذره‌های خیالی (G) و (R)، "متغیرهای بهنجار" نام دارند.

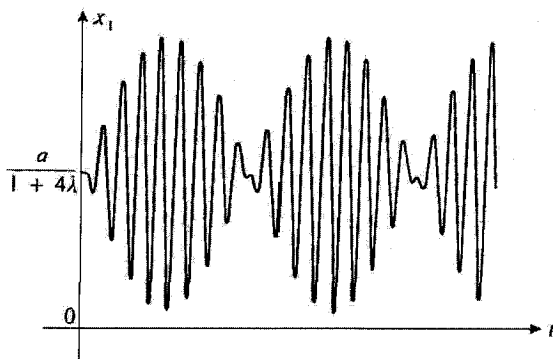
ج) حرکت دستگاه در حالت عمومی

در حالت عمومی، هر دو مد برانگیخته می‌شوند و هر دو موضع $x_1(t)$ و $x_2(t)$ با برهم‌نهی دو نوسان با بسامدهای مختلف ω_R و ω_G به دست می‌آیند [فرمول (۱۴)]. وانگهی، حرکت دستگاه، بجز در موردی که ω_G/ω_R گویا باشد، دوره‌ای نیست.^۱

ببینیم مثلاً اگر، در لحظهٔ آغازی t_0 ، ذرهٔ (۱) در موضع ترازمندی $x_1 = a/(1 + 4\lambda)$ بی‌حرکت باشد، در حالی که ذرهٔ (۲) دارای سرعت غیر صفر باشد، چه روی خواهد داد (این مسئله در مکانیک کلاسیک، مشابه مسئله‌ای است که در بخش ۳-۳-۴ فصل ۴ مطالعه شد). در غیاب جفتیدگی، ذرهٔ (۲) نوسان می‌کند و ذرهٔ (۱) بی‌حرکت می‌ماند. نشان خواهیم داد که جفتیدگی ذرهٔ (۱) را به حرکت می‌آورد. در واقع در تحول زمانی $x_1(t)$ و $x_2(t)$ دو بسامد زاویه‌ای مختلف ω_R و ω_G پدیدار می‌شود. دو نوسان متناظر پدیدهٔ زنشی را به وجود می‌آورند (شکل ۱). که بسامد آن عبارت است از

$$\nu = \frac{\omega_R - \omega_G}{2\pi} = \frac{\omega}{2\pi} [\sqrt{1 + 4\lambda} - 1] \quad (16)$$

اگر جفتیدگی ضعیف باشد ($\lambda \ll 1$)، این بسامد $\nu \simeq \lambda\omega/\pi$ در برابر ω_R و ω_G چشم‌پوشیدنی است. در این مورد، تا وقتی $1/\nu \ll (t - t_0)$ باشد، در عمل تنها ذرهٔ (۲) نوسان می‌کند. سپس



شکل ۱ نوسانهای موضع ذرهٔ (۱) که در لحظه $t = 0$ در موضع پایدارش بی‌حرکت فرض شده، در حالی که ذرهٔ (۲) دارای یک سرعت آغازی است. میان دو مد طبیعی یک پدیدهٔ زنش به وجود می‌آید و دامنهٔ نوسان ذرهٔ (۱) با زمان تغییر می‌کند.

۱. اگر $\omega_G/\omega_R = 1/\sqrt{1 + 4\lambda}$ برابر با یک گسنگویای کاهش‌ناپذیر p_1/p_2 باشد، دورهٔ حرکت عبارت است از:

$$T = 2\pi p_1/\omega_G = 2\pi p_1/\omega_R$$

انرژی ارتعاش به آهستگی به ذره (۱) منتقل می‌شود که دامنه نوسان آن افزایش می‌یابد، در حالی که دامنه نوسان (۲) کاهش می‌یابد. پس از گذشت زمانی چند، وضع آغازین وارونه می‌شود: ذره (۱) به شدت نوسان می‌کند و ذره (۲) عملاً بی‌حرکت می‌ماند. سپس، دامنه (۱) به آهستگی کاهش یافته و دامنه (۲) افزایش می‌یابد تا آنکه تقریباً همه انرژی در نوسانگر (۲) جای می‌گیرد. این فرایند لاینقطع تکرار می‌شود. بنابراین، اثر جفتیدگی ضعیف این است که پیوسته انرژی از نوسانگر وابسته به ذره (۱) به نوسانگر وابسته به ذره (۲) یا برعکس با بسامدی متناسب با شدت جفتیدگی منتقل شود.

یادداشت:

۱. اگر p_1 و p_2 به ترتیب تکانه‌های ذره‌های (۱) و (۲) باشند، تابع هامیلتونی دستگاه زیر مطالعه می‌شود

$$\mathcal{H}(x_1, x_2, p_1, p_2) = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + U_0(x_1, x_2) + V(x_1, x_2) \quad (17)$$

اگر قرار دهیم

$$\begin{cases} p_G(t) = p_1(t) + p_2(t) \\ p_R(t) = \frac{1}{\gamma} [p_1(t) - p_2(t)] \end{cases} \quad (18)$$

و

$$\begin{cases} \mu_G = 2m \\ \mu_R = \frac{m}{\gamma} \end{cases} \quad (19)$$

می‌توان تحقیق کرد که \mathcal{H} به صورت زیر در می‌آید

$$\mathcal{H} = \frac{p_G^2}{2\mu_G} + \frac{1}{\gamma} \mu_G \omega_G^2 x_G^2 + \frac{p_R^2}{2\mu_R} + \frac{1}{\gamma} \mu_R \omega_R^2 \left(x_R - \frac{\gamma a}{1 + 4\lambda} \right)^2 + m\omega^2 a^2 \frac{4\lambda}{1 + 4\lambda} \quad (20)$$

با یک تغییر مناسب در مبدأ انرژی، آخرین جمله این عبارت را، که مقدار ثابتی است، می‌توان حذف کرد. در این صورت \mathcal{H} همچون مجموع دو انرژی در می‌آید که هر یک با یکی از مدها

متناظر است. برخلاف (۱۷) که در آن جمله‌های با $x_1 x_2$ در $V(x_1, x_2)$ مسؤول جفتیدگی میان ذره‌ها هستند، در (۲۰)، جمله جفتیدگی میان مدها وجود ندارد؛ باز به این واقعیت می‌رسیم که آنها مستقل هستند.

۲. برای سادگی فرض کردیم که m_1 و m_2 جرمهای ذرات (۱) و (۲) برابرند. به آسانی می‌توان، با جایگزین کردن (۹)، (۱۰)، (۱۸)، و (۱۹)، توسط

$$\begin{cases} x_G(t) = \frac{m_1 x_1(t) + m_2 x_2(t)}{m_1 + m_2} \\ p_G(t) = p_1(t) + p_2(t) \\ \mu_G = m_1 + m_2 \end{cases} \quad (21)$$

(موضع، تکانه و جرم وابسته به مرکز جرم) و

$$\begin{cases} x_R(t) = x_1(t) - x_2(t) \\ p_R(t) = \frac{m_2 p_1(t) - m_1 p_2(t)}{m_1 + m_2} \\ \mu_R = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \end{cases} \quad (22)$$

(موضع، تکانه و جرم "ذره نسبی"). از این فرض درگذشت. در این صورت نتیجه‌ای نظیر (۲۰) به دست می‌آید.

۳. در غیاب جفتیدگی هر دو مد دارای یک بسامد زاویه‌ای هستند. با بودن جفتیدگی، دو بسامد زاویه‌ای مختلف ω_G و ω_R پدید می‌آید. در اینجا نتیجه‌ای را باز می‌یابیم که اغلب در فیزیک پدید می‌آید. اثر یک جفتیدگی میان دو نوسان، در بیشتر موارد، جدا کردن بسامدهای ویژه آنهاست (چنین پدیده‌ای در اینجا وقتی رخ می‌دهد که دو نوسانگر از آغاز دارای دو بسامد زاویه‌ای مختلفی می‌بودند). اگر به جای دو نوسانگر، تعداد بیشماری از آنها در دست باشد (که، مجزا و دارای بسامدهای یکسانی باشند)، در مکمل 10^6 همین فصل خواهیم دید که اثر جفتیدگی، پدید آوردن تعداد بیشماری بسامد متفاوت برای مدهاست. ■

۲. حالت‌های ارتعاشی دستگاه در مکانیک کوانتومی

اینک مسئله را از یک دیدگاه کوانتومی بازنگری می‌کنیم. در این صورت باید به جای موضع‌های $x_1(t)$ ، $x_2(t)$ و تکانه‌های $p_1(t)$ ، $p_2(t)$ ذره‌ها، عملگرهایی جایگزین کنیم که به ترتیب با X_1 ،

X_1, X_2, P_1 و P_2 نشان خواهیم داد. آنگاه، نظیر (۹)، (۱۰)، و (۱۸) مشاهده‌پذیرهای

$$\begin{cases} X_G = \frac{1}{\gamma}(X_1 + X_2) \\ P_G = P_1 + P_2 \end{cases} \quad (23)$$

$$\begin{cases} X_R = X_1 - X_2 \\ P_R = \frac{1}{\gamma}(P_1 - P_2) \end{cases} \quad (24)$$

را وارد کنیم. برای آنکه ببینیم آیا می‌توان H ، هامیلتونی دستگاه را، به شکلی نظیر (۲۰) نوشت، با بررسی رابطه‌های جابه‌جایی X_G, P_G, X_R, P_R و آغاز می‌کنیم.

الف) رابطه‌های جابه‌جایی

چون همهٔ مشاهده‌پذیرهای مربوط به ذره (۱) تنها با مشاهده‌پذیرهای مربوط به ذره (۲) جابه‌جا می‌شوند، تنها جابه‌جاگرهای غیرصفری که X_1, X_2, P_1 و P_2 را دخالت می‌دهند، عبارت‌اند از:

$$\begin{aligned} [X_1, P_1] &= i\hbar \\ [X_2, P_2] &= i\hbar \end{aligned} \quad (25)$$

به‌ویژه، X_1 با X_2 جابه‌جا می‌شود و بی‌درنگ می‌توان دید که

$$[X_G, X_R] = 0 \quad (26)$$

همچنین

$$[P_G, P_R] = 0 \quad (27)$$

جابه‌جاگر $[X_G, P_G]$ را با محاسبه، خواهیم داشت

$$\begin{aligned} [X_G, P_G] &= \frac{1}{\gamma} \{ [X_1, P_1] + [X_1, P_2] + [X_2, P_1] + [X_2, P_2] \} \\ &= \frac{1}{\gamma} \{ i\hbar + i\hbar \} = i\hbar \end{aligned} \quad (28)$$

همچنین خواهیم یافت

$$[X_R, P_R] = i\hbar \quad (29)$$

سرانجام، دو جابه‌جاگر $[X_G, P_R]$ و $[X_R, P_G]$ می‌ماند که باید بررسی کرد. مقدار آنها چنین است

$$\begin{aligned} [X_G, P_R] &= \frac{1}{4} \{ [X_1, P_1] - [X_1, P_2] + [X_2, P_1] - [X_2, P_2] \} \quad (30) \\ &= \frac{1}{4} \{ i\hbar - i\hbar \} = 0 \end{aligned}$$

و همچنین

$$[X_R, P_G] = 0 \quad (31)$$

بنابراین، می‌توانیم X_G و P_G و همچنین X_R و P_R را همچون عملگرهای موضع و تکانه دو ذره متمایز در نظر بگیریم. در واقع، فرمولهای (۲۸) و (۲۹) رابطه‌های جابه‌جایی بندادی برای هریک از این ذره‌ها هستند. افزون بر آن، رابطه‌های (۲۶)، (۲۷)، (۳۰)، و (۳۱) بیان می‌کنند که همه مشاهده‌پذیرهای مربوط به یکی از آنها، با همه مشاهده‌پذیرهای مربوط به دیگری جابه‌جا می‌شوند.

(ب) تبدیل عملگر هامیلتونی

با بودن جفتیدگی $V(X_1, X_2)$ ، داریم

$$H = T + U \quad (32)$$

با

$$T = \frac{1}{2m} (P_1^2 + P_2^2) \quad (33)$$

(عملگر انرژی جنبشی) و

$$U = \frac{1}{2} m \omega^2 [X_1 - a]^2 + (X_2 + a)^2 + 2\lambda (X_1 - X_2)^2 \quad (34)$$

(عملگر انرژی پتانسیل). چون P_1 و P_2 با یکدیگر جابه‌جا می‌شوند، (۳۳) را می‌توان چنان تبدیل کرد که گویی این عملگرها عدد هستند. به‌دست خواهیم آورد

$$T = \frac{1}{2\mu_G} P_G^2 + \frac{1}{2\mu_R} P_R^2 \quad (35)$$

که در آن μ_G و μ_R با (۱۹) تعریف می‌شوند. همچنین، X_1 و X_2 با یکدیگر جابه‌جا می‌شوند و همانند بالا [فرمول (۲۰)]، داریم

$$U = \frac{1}{2}\mu_G\omega_G^2 X_G^2 + \frac{1}{2}\mu_R\omega_R^2 \left(X_R - \frac{\gamma a}{1+\gamma\lambda} \right)^2 + m\omega^2 a^2 \frac{\gamma\lambda}{1+\gamma\lambda} \quad (36)$$

که ω_G و ω_R با (۱۳) داده شده‌اند.

بنابراین، می‌بینیم که H به شکلی نظیر (۲۰) در می‌آید که در آن هیچ جمله جفتیدگی پدیدار نمی‌شود

$$H = H_G + H_R + m\omega^2 a^2 \frac{\gamma\lambda}{1+\gamma\lambda} \quad (37)$$

با

$$\begin{cases} H_G = \frac{P_G^2}{2\mu_G} + \frac{1}{2}\mu_G\omega_G^2 X_G^2 \\ H_R = \frac{P_R^2}{2\mu_R} + \frac{1}{2}\mu_R\omega_R^2 \left[X_R - \frac{\gamma a}{1+\gamma\lambda} \right]^2 \end{cases} \quad (38)$$

ج) حالت‌های مانای دستگاه

فضای حالت‌های دستگاه حاصلضرب تانسوری $\mathcal{E}(1) \otimes \mathcal{E}(2)$ فضاهای حالت‌های ذرات (۱) و (۲) است. همچنین این فضا حاصلضرب تانسوری $\mathcal{E}(G) \otimes \mathcal{E}(R)$ فضاهای حالت‌های ذره‌های تصویری "مرکز جرم" و "ذره نسبی" وابسته به هریک از این دو مد است. چون H مجموع دو عملگر H_G و H_R است، که به ترتیب در $\mathcal{E}(G)$ و $\mathcal{E}(R)$ عمل می‌کنند (ثابت $\frac{m\omega^2 a^2 \gamma\lambda}{1+\gamma\lambda}$ اثری جز جابه‌جایی مبدأ انرژی ندارد). می‌دانیم (فصل دوم، بخش F) که می‌توان پایه‌ای از ویژه‌بردارهای H به شکل

$$|\varphi\rangle = |\varphi^G\rangle |\varphi^R\rangle \quad (39)$$

جستجو کرد که $|\varphi^G\rangle$ و $|\varphi^R\rangle$ به ترتیب ویژه بردارهای H_G و H_R در $\mathcal{E}(G)$ و $\mathcal{E}(R)$ هستند. اما H_R و H_G هامیلتونی نوسانگر هماهنگ یک بعدی است که ما ویژه مقادارها و ویژه بردارهای آن را می شناسیم. اگر عملگرهای a_G^\dagger و a_R^\dagger را به صورت

$$\begin{cases} a_G^\dagger = \frac{1}{\sqrt{\gamma}} \left[\sqrt{\frac{\mu_G \omega_G}{\hbar}} X_G - i \frac{P_G}{\sqrt{\mu_G \hbar \omega_G}} \right] \\ a_R^\dagger = \frac{1}{\sqrt{\gamma}} \left[\sqrt{\frac{\mu_R \omega_R}{\hbar}} X'_R - i \frac{P_R}{\sqrt{\mu_R \hbar \omega_R}} \right] \end{cases} \quad (۴۰\text{الف})$$

با

$$X'_R = X_R - \frac{\gamma a}{1 + \gamma \lambda} \quad (۴۰\text{ب})$$

تعریف کنیم، و همچنین اگر $|\varphi_0^R\rangle$ و $|\varphi_0^G\rangle$ به ترتیب حالت‌های پایه H_R و H_G را نشان دهند ویژه بردارهای H_G بردارهای

$$|\varphi_n^G\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a_G^\dagger)^n |\varphi_0^G\rangle \quad (۴۱)$$

با ویژه مقادارهای

$$E_n^G = \left(n + \frac{1}{\gamma} \right) \hbar \omega_G \quad (۴۲)$$

هستند. درحالی که ویژه بردارهای H_R عبارت‌اند از

$$|\varphi_p^R\rangle = \frac{1}{\sqrt{p!}} (a_R^\dagger)^p |\varphi_0^R\rangle \quad (۴۳)$$

با ویژه مقادارهای

$$E_p^R = \left(p + \frac{1}{\gamma} \right) \hbar \omega_R \quad (۴۴)$$

بنابراین در اینجا دارای وضعی همانند با وضعی هستیم که در مطالعه نوسانگر ناهمسانگرد دویعدی با آن روبه‌رو می‌شویم (زیرا $\omega_G \neq \omega_R$ است). حالت‌های مانای دستگاه توسط

$$|\varphi_{n,p}\rangle = |\varphi_n^G\rangle |\varphi_p^R\rangle = \frac{(a_G^\dagger)^n (a_R^\dagger)^p}{\sqrt{n! p!}} |\varphi_{0,0}\rangle \quad (۴۵)$$

داده می‌شوند و انرژی آنها عبارت‌است از

$$E_{n,p} = E_n^G a^\dagger + E_p^R + m\omega^2 \frac{4\lambda}{1+4\lambda}$$

$$= \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_G + \left(p + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_R + m\omega^2 a^\dagger \frac{4\lambda}{1+4\lambda} \quad (46)$$

بنابراین عملگرهای a_G^\dagger و a_R (یا a_R^\dagger و a_G) همچون عملگرهای نابودی و آفرینش یک کوانتوم انرژی در مد متناظر با (G) یا (R) پدیدار می‌شوند. با اثر دادن پیمایی a_R^\dagger و a_G^\dagger از (۴۵) پیداست که می‌توان به حالتهای مانای دستگاه دست یافت که در آن تعداد کوانتومها در هر مد دلخواه است. اثر a_R^\dagger , a_G , a_G^\dagger , a_R بر حالتهای مانای $|\varphi_{n,p}\rangle$ بسیار ساده است

$$a_G^\dagger |\varphi_{n,p}\rangle = \sqrt{n+1} |\varphi_{n+1,p}\rangle$$

$$a_G |\varphi_{n,p}\rangle = \sqrt{n} |\varphi_{n-1,p}\rangle$$

$$a_R^\dagger |\varphi_{n,p}\rangle = \sqrt{p+1} |\varphi_{n,p+1}\rangle$$

$$a_R |\varphi_{n,p}\rangle = \sqrt{p} |\varphi_{n,p-1}\rangle \quad (47)$$

عموماً هیچ‌یک از ترازها واگن نیست، زیرا دو زوج مختلف اعداد درست $\{n, p\}$ و $\{n', p'\}$ وجود ندارد که داشته باشیم

$$n\omega_G + p\omega_R = n'\omega_G + p'\omega_R \quad (48)$$

(بجز هنگامی که $\omega_R/\omega_G = \sqrt{1+4\lambda}$ گویا باشد).

د) تحول اندازه‌های میانگین

عمومیت‌ترین حالت دستگاه یک برهم‌نهی خطی از حالتهای مانای $|\varphi_{n,p}\rangle$ است

$$|\varphi(t)\rangle = \sum_{n,p} c_{n,p}(t) |\varphi_{n,p}\rangle \quad (49)$$

با

$$c_{n,p}(t) = c_{n,p}(0) e^{-iE_{n,p}t/\hbar} \quad (50)$$

بنابر رابطه‌های (۴۰) و الحاقیهای آنها، $X_G(X_R)$ یک ترکیب خطی از a_G^\dagger و a_R است. با به‌کار بردن (۴۷) در می‌یابیم که X_G تنها میان حالت‌های $|\varphi_{n,p}\rangle$ و $|\varphi_{n',p'}\rangle$ به‌گونه‌ای که $n - n' = \pm 1$ و $p = p'$ باشد دارای عنصر ماتریسی غیرصفر است (برای X_R' خواهیم داشت $n = n', p - p' = \pm 1$). از این واقعیت نتیجه می‌گیریم که تنها بسامدهای بوری که می‌تواند در تحول زمانی $\langle X_G \rangle(t)$ و $\langle X_R \rangle(t)$ پدیدار شوند، به‌ترتیب عبارت‌اند از^۱

$$\begin{aligned} \frac{E_{n\pm 1,p} - E_{n,p}}{\hbar} &= \pm \omega_G \\ \frac{E_{n,p\pm 1} - E_{n,p}}{\hbar} &= \pm \omega_R \end{aligned} \quad (51)$$

بدین‌گونه باز می‌یابیم که $\langle X_G \rangle(t)$ و $\langle X_R \rangle(t)$ با بسامدهای زاویه‌ای ω_G و ω_R نوسان می‌کنند، که نتایج کلاسیکی به‌دست آمده در بخش ۱-الف را یادآوری می‌کند.

مراجع برای مطالعه بیشتر
جفتیدگی بین دو نوسانگر کلاسیکی:

Berkeley 3 (7.1), §§1.4 and 3.3;
Alonso and Finn (6.1), Vol. I, §12.10.

۱. برای آنکه این بسامد حقیقتاً پدیدار شوند، افزون بر آن باید حداقل یکی از حاصلضریب‌های $c_{n',p\pm 1}^*$ یا $c_{n,p}$ مخالف با صفر باشد.

مدهای ارتعاشی یک زنجیره خطی نامحدود از نوسانگرهای هماهنگ

جفتیده؛ فونونها

۱. مطالعه کلاسیک

الف) معادله‌های حرکت

ب) پاسخهای ساده معادله‌های حرکت

ج) متغیرهای بهنجار

د) انرژی کل و انرژی هر یک از مدها

۲. رفتار مکانیک کوانتومی

الف) حالت‌های مانا در غیاب جفتیدگی

ب) اثرهای جفتیدگی

ج) عملگرهای بهنجار. رابطه‌های جابه‌جایی

د) حالت‌های مانا در حضور جفتیدگی

۳. کاربرد در مورد بررسی ارتعاشهای یک بلور: فونونها

الف) طرح مسئله

ب) مدهای طبیعی. سرعت صوت در بلور

در مکمل ۷ همین فصل، حرکت‌های دستگامی متشکل از دو نوسانگر هماهنگ جفتیده را مطالعه کردیم. ایده اساسی‌ای که به دست آوردیم چنین است: در حالی که متغیرهای دینامیکی هر نوسانگری به طور مستقل از دیگری تحول نمی‌یابند، ممکن است متغیرهای دینامیکی تازه‌ای (متغیرهای بهنجار) وارد کنیم که ترکیب‌هایی خطی از متغیرهای پیشین بوده، و دارای خاصیت مهم واجفتیده بودن باشند. این چنین متغیرهایی مدهای طبیعی ارتعاشی را توصیف می‌کند که با بسامدهای کاملاً معینی انجام می‌گیرند. برحسب این متغیرهای تازه، هامیلتونی دستگام به شکل مجموعی از هامیلتونیهای نوسانگرهای هماهنگ مستقل پدیدار می‌شود که کوانتش را آسان می‌کند.

ما در این مکمل نشان خواهیم داد که ایده‌های پیشین نیز درباره دستگامی متشکل از یک رشته نامحدود نوسانگرهای هماهنگ یکسان که به طور منظم در روی یک محور قرار گرفته و هر کدام به نوسانگر مجاور جفتیده باشد. قابل اعمال است.

برای این کار مدهای طبیعی مختلف ارتعاشهای دستگاه را تعیین می‌کنیم، و نشان می‌دهیم که هر یک از آنها با یک ارتعاش گروهی مجموعه ذرات متناظر هستند که با یک بسامد زاویه‌ای ω_k ، و یک بردار موج k مشخص می‌شود. در این صورت جستجوی ویژه‌حالتها و ویژه‌مقدارهای هامیلتونی کوانتومی فوق‌العاده ساده می‌شود، زیرا انرژی کل دستگاه مجموع انرژیهای وابسته به هریک از مدهای طبیعی ارتعاش است.

نتایج به‌دست آمده امکان می‌دهند تا چگونگی انتشار ارتعاش در یک بلور را نشان دهیم و مفهوم فونون را، که در فیزیک حالت جامد بنیادی است، وارد کنیم. البته تأکید در این مکمل بر روی وارد کردن و کوانتتس مدهای طبیعی است و نه بر روی خواص مشروح فونونها که در عهدهٔ درسی از فیزیک حالت جامد است.

۱. مطالعهٔ کلاسیک

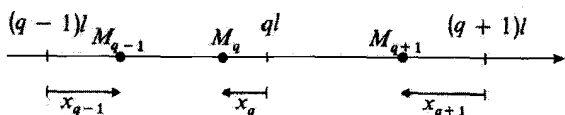
الف) معادله‌های حرکت

زنجیرهٔ نامحدودی از نوسانگرهای هماهنگ یک‌بعدی یکسان را که هر یک با یک عدد درست q (مثبت، منفی، یا صفر) مشخص می‌شود، در نظر بگیریم. ذرهٔ M_q به جرم m که نوسانگر (q) را تشکیل می‌دهد در نقطه‌ای به طول ql (شکل ۱) دارای ترازمندی است، که l فاصلهٔ دو نوسانگر در زنجیره است. انحراف (جبری) نوسانگر (q) را از وضع ترازمندیش با x_q نشان می‌دهیم. حالت دستگاه در لحظهٔ t با متغیرهای دینامیکی $x_q(t)$ و مشتقهای آنها $\dot{x}_q(t)$ در این لحظه داده می‌شود. در نبودن برهم‌کنشهای میان ذرات متفاوت، انرژی پتانسیل دستگاه به‌صورت

$$U(\dots, x_{-1}, x_0, x_1, \dots) = \sum_{q=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2} m \omega^2 x_q^2 \quad (1)$$

نوشته می‌شود، که ω بسامد زاویه‌ای هر نوسانگر است. در این صورت، تحول دستگاه با معادلات

$$m \frac{d^2}{dt^2} x_q(t) = -m \omega^2 x_q(t) \quad (2)$$



شکل ۱ زنجیرهٔ نامحدود نوسانگرها؛ تغییر مکان q امین ذره نسبت به وضع ترازمندی ql با x_q داده می‌شود.

داده می‌شود که پاسخهای آنها عبارت‌اند از

$$x_q(t) = x_q^M \cos(\omega t - \varphi_q) \quad (3)$$

ثابت‌های انتگرال‌گیری x_q^M و φ_q با شرایط آغازین حرکت تثبیت می‌شوند. بنابراین نوسانگرها به‌طور مستقل ارتعاش می‌کنند.

اکنون تصور کنیم که ذرات مورد مطالعه برهم‌کنش دارند. برای سادگی فرض می‌کنیم که کافی است تنها نیروهایی را به حساب آوریم که از دو نزدیکترین مجاور ذره به آن وارد می‌شود، که این نیروها جاذبه‌ای و همچنین متناسب بافاصله‌اند. بدینسان، ذره (q) تحت تأثیر دو نیروی جدید جاذبه قرار می‌گیرد که به وسیله ذره‌های $(q+1)$ و $(q-1)$ اعمال می‌شوند و به ترتیب با $|M_q M_{q+1}|$ و $|M_q M_{q-1}|$ متناسب هستند (ضریبهای تناسب در دو مورد یکی است). بنابراین نیروی کل F_q که به ذره (q) وارد می‌شود به صورت زیر نوشته می‌شود

$$\begin{aligned} F_q &= -m\omega^2 x_q - m\omega^2 [ql + x_q - (q+1)l - x_{q+1}] \\ &\quad - m\omega^2 [ql + x_q - (q-1)l - x_{q-1}] \\ &= -m\omega^2 x_q - m\omega^2 (x_q - x_{q+1}) - m\omega^2 (x_q - x_{q-1}) \end{aligned} \quad (4)$$

که در آن ω_1 یک ثابت هم بعد با عکس زمان است و شدت جفتیدگی را مشخص می‌کند. اکنون باید معادلات (۲) را با معادلات

$$m \frac{d^2}{dt^2} x_q(t) = -m\omega^2 x_q(t) - m\omega^2 [2x_q(t) - x_{q+1}(t) - x_{q-1}(t)] \quad (5)$$

جایگزین کرد. وانگهی به سادگی تحقیق می‌شود که نیروهای برهم‌کنش [جمله‌های برحسب ω^2 در (۴)] از انرژی پتانسیل جفتیدگی که با

$$V(\dots, x_{-1}, x_0, x_{+1}, \dots) = \frac{1}{2} m\omega^2 \sum_{q=-\infty}^{+\infty} (x_q - x_{q+1})^2 \quad (6)$$

داده می‌شود، مشتق می‌شوند.

بنابر (۵) تحول x_q به x_{q+1} و x_{q-1} وابسته است. بنابراین باید دستگاه نامحدودی از معادلات دیفرانسیل جفتیده را حل کنیم. پیش از وارد کردن متغیرهای تازه‌ای که واجفتیدگی این معادلات

را امکانپذیر سازد، جالب است سعی کنیم پاسخهای ساده‌ای برای معادلات (۵) بیابیم و محتوای فیزیکی آنها را به دقت مشخص کنیم.

(ب) پاسخهای ساده معادله‌های حرکت

۱. وجود پاسخهای ساده

زنجیره نامحدود نوسانگرهای هماهنگ جفتیده‌ای را که مطالعه می‌کنیم مشابه با یک فنر ماکروسکوپیکی نامحدود است. اما می‌دانیم که، در یک فنر، موجهای رونده طولی می‌توانند منتشر شوند (که با انبساط و انقباض حلقه‌ها انجام می‌پذیرد). تحت تأثیر یک موج سینوسی از این موج با بردار موج k و بسامد زاویه‌ای Ω ، نقطه‌ای از فنر که در ترازمندی دارای طول x است در لحظه t به $x + u(x, t)$ جابه‌جا شده‌است، که در آن

$$u(x, t) = \mu e^{i(kx - \Omega t)} + \mu^* e^{-i(kx - \Omega t)} \quad (7)$$

در حقیقت پاسخهایی از این نوع برای معادله‌های حرکت (۵) وجود دارد. با این همه، چون زنجیره نوسانگرهای یک محیط پیوسته نیست اثرات موج تنها در یک سری نقاط متناظر با $x = ql$ مشاهده می‌شود. در این صورت جابه‌جایی نوسانگر (q) را در لحظه t نشان می‌دهد

$$x_q(t) = u(ql, t) = \mu e^{i(kql - \Omega t)} + \mu^* e^{-i(kql - \Omega t)} \quad (8)$$

به‌سادگی تحقیق می‌شود که این عبارت در صورتی پاسخ معادله‌های (۵) است که Ω و k از رابطه

$$-m\Omega^2 = -m\omega^2 - m\omega^2 [2 - e^{ikl} - e^{-ikl}] \quad (9)$$

پیروی می‌کنند. بنابراین Ω با "رابطه پاشندگی"

$$\Omega(k) = \sqrt{\omega^2 + 4\omega^2 \sin^2 \left(\frac{kl}{2} \right)} \quad (10)$$

به k مرتبط می‌شود، که آن را بعداً به تفصیل بررسی خواهیم کرد (بخش ۱-ب-۴ را ببینید).

۲. تعبیر فیزیکی

در پاسخ (۸) معادله‌های حرکت، همه نوسانگرها با یک بسامد $\Omega/2\pi$ ، با یک دامنه $|\mu|$ اما

با فازی که به طور دوره‌ای به موضع در حال سکون آنها بستگی دارد، ارتعاش می‌کنند. وضع مثل آن است که جابه‌جاییهای نوسانگرهای گوناگون توسط یک موج رونده سینوسی با بردار موج k و سرعت فاز زیر تعیین می‌شوند

$$v_{\varphi}(k) = \frac{\Omega(k)}{k} \quad (11)$$

در واقع، به آسانی به کمک (۸) ثابت می‌شود که

$$x_{[q_1+q_2]}(t) = x_{q_1} \left(t - \frac{q_2 l}{v_{\varphi}} \right) \quad (12)$$

یعنی، نوسانگر $(q_1 + q_2)$ همان حرکتی را انجام می‌دهد که نوسانگر (q_1) ، ولی با تأخیر زمانی برابر با مدتی که موج، با سرعت v_{φ} ، فاصله $q_2 l$ که دو نوسانگر را از هم جدا می‌کند می‌پیماید. چون در این حال همه نوسانگرها در حرکت‌اند، پاسخهای (۸) "مدهای گروهی" ارتعاش دستگاه نامیده می‌شوند.

۳. اندازه‌های ممکن بردار موج k دو بردار موج k و k' را که اختلاف آنها مضرب درستی از $2\pi/l$ است در نظر بگیریم

$$k' = k + \frac{2n\pi}{l} \quad (n \text{ عدد درست (مثبت یا منفی)}) \quad (13)$$

البته داریم

$$\begin{cases} e^{ik'qt} = e^{ikqt} \\ \Omega(k') = \Omega(k) \end{cases} \quad (14)$$

دومین رابطه مستقیماً از (۱۰) نتیجه می‌شود.

آنگاه از (۸) پیداست که دو موج پیشرونده k و k' به حرکاتی یکسان برای نوسانگرها می‌انجامند و در نتیجه "به طور فیزیکی غیر قابل تمیز" هستند. بنابراین، در مسئله‌ای که در اینجا بررسی می‌شود، کافی است k را بازه‌ای به پهنای $2\pi/l$ تغییر دهیم. به سبب تقارن چنین انتخاب می‌کنیم

$$-\frac{\pi}{l} \leq k \leq \frac{\pi}{l} \quad (15)$$

فاصله متناظر اغلب "منطقه نخست بریلوئن" نامیده می‌شود.

۴. رابطه پاشیدگی

رابطه پاشیدگی (۱۰) که بسامد زاویه‌ای $\Omega(k)$ وابسته به هر مقداری از k را به دست می‌دهد، امکان مطالعه انتشار ارتعاشها در دستگاه را می‌دهد. برای مثال اگر "بسته موجی" از برهم‌نهی موجهایی با بردارهای موج مختلف تشکیل دهیم، می‌دانیم که به آن سرعت گروهی متناظر است که با

$$v_G = \frac{d\Omega(k)}{dk} \quad (16)$$

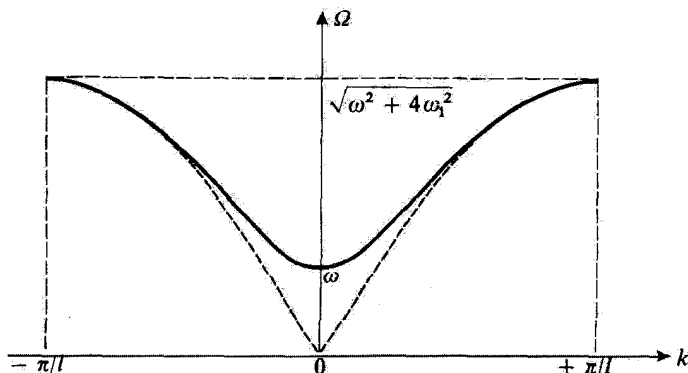
داده می‌شود و با v_φ متفاوت است.

شکل ۲ روند تغییرات $\Omega(k)$ را برحسب k ، هنگامی که k در نخستین منطقه بریلوئن تغییر می‌کند، نشان می‌دهد.

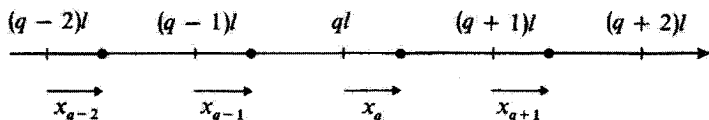
از این شکل بی‌درنگ در می‌یابیم که $\Omega(k)$ نمی‌تواند هر اندازه‌ای را بپذیرد: یک ارتعاش با بسامد ν تنها هنگامی می‌تواند آزادانه منتشر شود که در "نوار مجاز" قرار داشته باشد

$$\frac{\omega}{2\pi} \leq \nu \leq \frac{\sqrt{\omega^2 + 4\omega_1^2}}{2\pi} \quad (17)$$

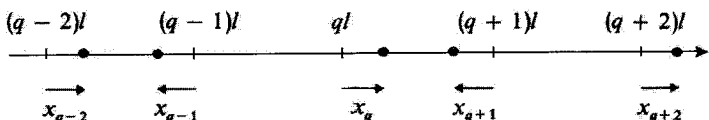
اندازه‌های دیگر ν با "نوارهای ممنوع" متناظرند. دو بسامد حدی بازه (۱۷) را اغلب "بسامدهای قطع" نامند.



شکل ۲ رابطه پاشیدگی که تغییرات بسامد زاویه‌ای مدهای طبیعی را برحسب عدد موج k در نخستین منطقه بریلوئن نشان می‌دهد. منحنی خط‌چین با مورد $\omega = 0$ متناظر است.



شکل ۳ مد با شکل پایتترین بسامد ($k = 0, \Omega = \omega$) یا جابه‌جایی همه نوسانگرها "به‌طور گروهی" متناظر است. از این‌روست که بسامد آن به جفتیگی V وابسته نیست.



شکل ۴ مدهای $k = \pm\pi/l$ آنهایی هستند که در آنها دو نوسانگر مجاور با فاز متقابل جابه‌جا می‌شوند. جفتیگی V در این مورد بسامدها را به شدت تغییر می‌دهد.

مد مربوط به پایتترین بسامد زاویه‌ای، $\Omega(0) = \omega$ دارای بردار موج صفر است؛ این مد با یک ارتعاش هم‌فاز همه نوسانگرها که در آن همه ذرات "با هم" بدون تغییر فاصله نسبی‌شان (شکل ۳) جابه‌جا می‌شوند، متناظر است. این بیان می‌کند که چرا بسامد زاویه‌ای این مد همان است که در نبودن جفتیگی وجود دارد (مکمل ۸، بخش ۱-ب). در مورد مد با بالاترین بسامد، $\Omega(\pm\pi/l) = \sqrt{\omega^2 + 4\omega^2}$ ، این مد با ارتعاشی متناظر است که در آن دو نوسانگر متوالی در فاز متقابل هستند (شکل ۴). نیروهای جاذبه مربوط به جفتیگی V ، در این صورت، ماکزیموم‌اند.

ج) متغیرهای بهنجار

۱. به‌دست آوردن معادله‌های واجفتیده

به معادله‌های حرکت (۵) بازگردیم و متغیرهای دینامیکی جدیدی را وارد کنیم که ترکیب خطی x_q بوده ولی مستقل از یکدیگر تحول می‌یابند.

بدین منظور، دو طرف (۵) را در کمیت e^{-ikql} ضرب کنیم و بر روی q جمع ببندیم. اگر توجه کنیم که

$$\begin{aligned} \sum_{q=-\infty}^{+\infty} x_{q\pm 1} e^{-ikql} &= e^{\pm ikl} \sum_{q=-\infty}^{+\infty} x_{q\pm 1} e^{-i(q\pm 1)kl} \\ &= e^{\pm ikl} \sum_{q=-\infty}^{+\infty} x_q e^{-ikql} \end{aligned} \quad (18)$$

$$\sum_{q=-\infty}^{+\infty} x_q(t) e^{-iqkl} = \xi(k, t) \quad (19)$$

می بینیم که (۵) می شود

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \xi(k, t) = -[\omega^2 + \omega_1^2(2 - e^{ikh} - e^{-ikh})] \xi(k, t) \quad (20)$$

یعنی، با در نظر گرفتن (۹)

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \xi(k, t) = -\Omega^2(k) \xi(k, t) \quad (21)$$

این تساوی نشان می دهد که تحول $\xi(k, t)$ با زمان، برای k' متفاوت از k ، مستقل از $\xi(k', t)$ است. بنابراین کمیت های $\xi(k, t)$ وارد شده با (۱۹) همگی از یکدیگر واجفیت دارند و دارای قانون تحول بی اندازه ساده ای هستند.

یادداشتها:

۱. امکان واجفیتین ساده معادله های (۵) از تغییرناپذیری مسئله به هنگام یک انتقال مجموعه نوسانگرها به اندازه $\pm l$ (جایگزینی q با $q \pm 1$) پدید می آید. این تغییرناپذیری خود پدیدار از این واقعیت است که زنجیره منظم و نامحدود است.

۲. در حقیقت، هر زنجیره ای، حتی اگر دارای شمار بسیار بزرگ N نوسانگر باشد، البته محدود است. بنابراین، برای به دست آوردن مدهای طبیعی ارتعاش باید شرایط مرزی را در دو انتهای زنجیره به حساب آورد و مسئله بسیار پیچیده تر می شود (اثرهای کناره ها). به جای آنکه مانند بالا شمار نامحدود بیوسته ای مدهای طبیعی متناظر با اندازه های مختلف k در منطقه نخست بریلون به دست آید، تعداد محدودی مد طبیعی، برابر با تعداد نوسانگرهای N ، به دست می آید. هنگامی که تنها رفتار زنجیره دور از کناره ها مورد نظر است، اغلب شرایط مرزی مصنوعی وارد می شود که با شرایط مرزی حقیقی متفاوت است، ولی این امتیاز بزرگ را دارد که، با حفظ اساس خواص فیزیکی، محاسبات را ساده می کند. به دو نوسانگری که در دو سر زنجیره قرار دارند این شرط را اعمال می کنیم که دارای یک حرکت باشند (شرایط مرزی "دوره ای" که "شرایط بورن-وان کارمن" نیز نام دارند). فرصت خواهیم داشت تا در مورد مطالعه ساختمانهای دوره ای دیگر، بدین نکته بازگردیم (مکمل ۵ فصل ۱۱؛ همچنین بخش ج-۱ از مکمل ۳ فصل ۱۶ را ببینید، جلد

دوم کتاب مکانیک کوانتومی). بیش از این بر روی شرایط مرزی دوره‌ای تأکید نمی‌کنیم و بحث را با محدود کردن آن به حالت ساده یک زنجیره نامحدود، ادامه می‌دهیم. ■

تابع $\xi(k, t)$ وارد شده با (۱۹)، بنابر تعریف مجموع یک سری فوریه است که ضریبهای آن جابه‌جاییهای $x_q(t)$ هستند. این یک تابع دوره‌ای با دوره $2\pi/l$ است، که بنابراین اگر مقادیر آن را در بازه $-\pi/l \leq k \leq \pi/l$ مشخص کنیم، کاملاً معین است [نخستین منطقه بریلوئن را که با (۱۵) تعریف شده است باز می‌یابیم]. $\xi(k, t)$ به موضع همه نوسانگرها در لحظه t وابسته است. متقابلاً این موضعی هنگامی بدون ابهام تعیین می‌شوند که، در لحظه $t = 0$ اندازه‌های ξ در بازه (۱۵) داده شوند. در واقع می‌توان تساوی (۱۹) را به کمک این رابطه معکوس کرد زیرا با استفاده از

$$\int_{-\pi/l}^{+\pi/l} dk e^{i(q-q')kl} = \frac{2\pi}{l} \delta_{qq'} \quad (22)$$

به دست می‌آوریم

$$x_q(t) = \frac{l}{2\pi} \int_{-\pi/l}^{+\pi/l} dk \xi(k, t) e^{iqkl} \quad (23)$$

وانگهی توجه داشته باشیم که چون جابه‌جاییهای $x_q(t)$ حقیقی هستند، تابع $\xi(k, l)$ در تساوی زیر صدق می‌کند

$$\xi(-k, t) = \xi^*(k, t) \quad (24)$$

همچنین می‌توان، از تکانه‌های $p_q(t) = m\dot{x}_q(t)$ تابع

$$\pi(k, t) = \sum_q p_q(t) e^{-ikql} \quad (25)$$

را تعریف کرد، که به طور معکوس می‌توان $p_q(t)$ را به کمک آن بیان کرد

$$p_q(t) = \frac{l}{2\pi} \int_{-\pi/l}^{+\pi/l} \pi(k, t) e^{ikql} dk \quad (26)$$

حقیقی بودن $p_q(t)$ ها ایجاب می‌کند که داشته باشیم

$$\pi(-k, t) = \pi^*(k, t) \quad (27)$$

با مشتق‌گیری جمله به جمله از دو طرف (۱۹) و با به‌کارگیری (۲۵) و سپس (۲۱)، سرانجام به دست می‌آوریم

$$\begin{cases} m \frac{\partial}{\partial t} \xi(k, t) = \pi(k, t) & (28\text{-الف}) \\ \frac{\partial}{\partial t} \pi(k, t) = -m\Omega^2(k)\xi(k, t) & (28\text{-ب}) \end{cases}$$

در لحظه t ، حالت دینامیکی دستگاه هم با دادن $x_q(t)$ و $p_q(t)$ برای همه اعداد درست (مثبت، منفی یا صفر) مشخص می‌شود و هم با دادن "متغیرهای بهنجار" $\xi(k, t)$ و $\pi(k, t)$ (که در آنها k همه اندازه‌های ممکن را در نخستین منطقه بریلوئن می‌پذیرد). معادله‌های تحول (۲۸) متغیرهای بهنجار متناظر با هر اندازه k ، همانهایی هستند که تحول موضع و تکانه یک نوسانگر هماهنگ به جرم m و بسامد زاویه‌ای $\Omega(k)$ را بیان می‌کنند. با این همه، ξ و π مختلط هستند. بدینسان مطالعه زنجیره نامحدود ولی ناپیوسته نوسانگرهای هماهنگ جفتیده را به بررسی مجموع پیوسته‌ای از نوسانگرهای خیالی مستقل (که با شاخص k مشخص می‌شوند). کشانیده‌ایم.

یادداشت:

با دقت بیشتر باید گفت که این نوسانگرهای خیالی کاملاً مستقل نیستند زیرا، بنابر شرایط حقیقی بودن (۲۴) و (۲۷)، اندازه‌های آغازین $\xi(k, 0)$ و $\pi(k, 0)$ باید از روابط زیر پیروی کنند

$$\begin{aligned} \xi(k, 0) &= \xi^*(-k, 0) \\ \pi(k, 0) &= \pi^*(-k, 0) \end{aligned} \quad (29)$$

۲. متغیرهای بهنجار $\alpha(k, t)$ وابسته به موجهای پیش‌رونده مناسب است (همچنین بخش ۱-الف از مکمل ۷ همین فصل) که دو متغیر بهنجار $\xi(k, t)$ و $\pi(k, t)$ را با تنها یک متغیر $\alpha(k, t)$ بیان کنیم که چنین تعریف می‌شود

$$\alpha(k, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\hat{\xi}(k, t) + i\hat{\pi}(k, t)] \quad (30)$$

که در آن $\hat{\xi}(k, t)$ و $\hat{\pi}(k, t)$ کمیت‌های بی‌بعد متناسب با $\xi(k, t)$ و $\pi(k, t)$ هستند

$$\begin{cases} \hat{\xi}(k, t) = \beta(k)\xi(k, t) \\ \hat{\pi}(k, t) = \frac{1}{\hbar\beta(k)}\pi(k, t) \end{cases} \quad (31)$$

برای ساده‌کردن محاسبات کوانتومی که کمی بعد عرضه خواهد شد، قرار خواهیم داد

$$\beta(k) = \sqrt{\frac{m\Omega(k)}{\hbar}} \quad (32)$$

به‌آسانی می‌توان از (۳۰) نشان داد که دو معادله (۲۸)، هم‌ارز با معادله یکتای

$$i\frac{\partial}{\partial t}\alpha(k, t) = \Omega(k)\alpha(k, t) \quad (33)$$

است که معادله‌ای از مرتبه نخست برحسب t است $[\alpha(k, t)]$ با دادن $\alpha(k, 0)$ کاملاً تعیین می‌شود، در حالی که $\xi(k, t)$ به $\xi(k, 0)$ و $\pi(k, t)$ وابسته است. پاسخ عمومی (۳۳) به صورت زیر نوشته می‌شود

$$\alpha(k, t) = \alpha(k, 0)e^{-i\Omega(k)t} \quad (34)$$

با به کار بردن (۱۹)، (۲۵) به آسانی عبارت $\alpha(k, t)$ را برحسب $x_q(t)$ و $p_q(t)$ به دست می‌آوریم

$$\alpha(k, t) = \frac{1}{\sqrt{V}}\beta(k)\sum_q e^{-iqkt}\left[x_q(t) + i\frac{p_q(t)}{m\Omega(k)}\right] \quad (35)$$

متقابلاً نشان می‌دهیم که $x_q(t)$ و $p_q(t)$ تنها برحسب $\alpha(k, t)$ بیان می‌شوند. بنابر (۲۴) و (۲۷) داریم

$$\begin{aligned} \alpha^*(-k, t) &= \frac{1}{\sqrt{V}}[\hat{\xi}^*(-k, t) - i\hat{\pi}^*(-k, t)] \\ &= \frac{1}{\sqrt{V}}[\hat{\xi}(k, t) - i\hat{\pi}(k, t)] \end{aligned} \quad (36)$$

از این معادله نتیجه می‌شود که

$$\begin{cases} \hat{\xi}(k, t) = \frac{1}{\sqrt{\gamma}} [\alpha(k, t) + \alpha^*(-k, t)] & \text{(الف-۳۷)} \\ \hat{\pi}(k, t) = -\frac{i}{\sqrt{\gamma}} [\alpha(k, t) - \alpha^*(-k, t)] & \text{(ب-۳۷)} \end{cases}$$

که امکان می‌دهد فرمول (۲۳) را به صورت زیر بنویسیم

$$x_q(t) = \frac{l}{2\pi\sqrt{\gamma}} \left\{ \int_{-\pi/l}^{+\pi/l} \frac{\alpha(k, t)}{\beta(k)} e^{iqkl} dk + \int_{-\pi/l}^{+\pi/l} \frac{\alpha^*(-k, t)}{\beta(k)} e^{iqkl} dk \right\} \quad (۳۸)$$

با تغییر k به $-k$ در انتگرال دوم، [چون $\beta(k)$ تابع زوجی از k است] سرانجام به دست می‌آوریم

$$x_q(t) = \frac{l}{2\pi\sqrt{\gamma}} \left\{ \int_{-\pi/l}^{+\pi/l} \frac{\alpha(k, t)}{\beta(k)} e^{iqkl} dk + \int_{-\pi/l}^{+\pi/l} \frac{\alpha^*(k, t)}{\beta(k)} e^{-iqkl} dk \right\} \quad (۳۹)$$

یک محاسبه همانند، از (۲۶) چنین می‌دهد

$$p_q(t) = \frac{l}{2\pi\sqrt{\gamma}} \frac{\hbar}{i} \left\{ \int_{-\pi/l}^{+\pi/l} \beta(k) \alpha(k, t) e^{iqkl} dk - \int_{-\pi/l}^{+\pi/l} \beta(k) \alpha^*(k, t) e^{-iqkl} dk \right\} \quad (۴۰)$$

بنابراین، حالت دستگاه هم با $\alpha(k, t)$ بیان می‌شود و هم با مجموعه $x_q(t)$ و $p_q(t)$. اگر در (۳۹)، $\alpha(k, t)$ را با عبارت عمومی (۳۴) آن جایگزین کنیم، به صورت زیر در می‌آید

$$x_q(t) = \frac{l}{2\pi\sqrt{\gamma}} \left\{ \int_{-\pi/l}^{+\pi/l} dk \frac{\alpha(k, 0)}{\beta(k)} e^{i[qkl - \Omega(k)t]} + c.c. \right\} \quad (۴۱)$$

بدین ترتیب، عمومیترین پاسخ مسئله زنجیره نوسانگرهای جفتیده همچون یک برهم‌نهی خطی از موجهای پیش‌رونده‌ای پدیدار می‌شود که در بخش ۱-ب پیشین وارد کردیم (ضریبهای این ترکیب خطی عبارت‌اند از $l/2\pi\sqrt{\gamma} \alpha(k, 0)/\beta(k)$). این موجهای پیش‌رونده مدهای طبیعی ارتعاش دستگاه را تشکیل می‌دهند.^۱

۱. همچنین می‌توانستیم مدهای متناظر با موجهای مانا را در دستگاه وارد کنیم (که مجموع دو موج پیش‌رونده هم بسامد با سرعتهای مخالف هستند). در این صورت نتایج هم‌ارزی به دست می‌آید، اما در آن حرکت‌های دستگاه بر روی "پایه" دیگری بسط داده می‌شد. وانگهی بسطی از این نوع است که در مکمل ۹ همین فصل به کار رفته است.

یادداشت:

برای هر مقدار k ، دو جمله‌ای که در طرف دوم (۳۹) و (۴۰) دیده می‌شوند همیوخ مختلط یکدیگرند. این امر، حقیقی بودن $x_q(t)$ و $p_q(t)$ را تأمین می‌کند بی‌آنکه ضروری باشد تا به $\alpha(k, t)$ شرایط دلخواهی اعمال شود. بنابراین $\alpha(k, t)$ ها حقیقتاً متغیرهای مستقلی هستند. ■

د) انرژی کل و انرژی هر یک از مدها

انرژی کل دستگاه مورد نظر مجموع انرژیهای جنبشی هر ذره (q) و انرژیهای پتانسیلی (۱) و (۶) است

$$\mathcal{H}(\dots x_{-1}, x_0, x_{+1}, \dots p_{-1}, p_0, p_{+1}, \dots) = \sum_{q=-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{2m} p_q^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x_q^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 (x_q - x_{q+1})^2 \right] \quad (42)$$

در این بخش خواهیم دید که این انرژی را به‌سادگی می‌توان برحسب انرژیهای که به هر یک از مدها نسبت داده می‌شود بیان کرد.

اکنون، جمعهای مختلفی را که در (۴۲) دخالت دارند حساب می‌کنیم. چون انحرافهای x_q ضریبهای سری فوریهای هستند که تابع $\xi(k, t)$ را تعریف می‌کنند، رابطه پارسوال [پوست الف، رابطه (۱۸)] بی‌درنگ می‌دهد

$$\sum_{q=-\infty}^{+\infty} (x_q)^2 = \frac{l}{2\pi} \int_{-\pi/l}^{+\pi/l} |\xi(k, t)|^2 dk \quad (43)$$

$$\sum_{q=-\infty}^{+\infty} (p_q)^2 = \frac{l}{2\pi} \int_{-\pi/l}^{+\pi/l} |\pi(k, t)|^2 dk \quad (44)$$

اینک آنچه برای محاسبه مانده است جمعی است که در (۲۴) متناظر با جفتیدگی است. برای این‌کار می‌توان دید که همانند (۱۸)، اگر انحرافهای x_q ضریبهای سری فوریه $\xi(k, t)$ باشند، x_{q+1} ضریبهای فوریه $e^{ikl} \xi(k, t)$ خواهند بود. پس کمیت‌های $(x_q - x_{q+1})$ ضریبهای فوریه $(1 - e^{ikl}) \xi(k, t)$ هستند، و تساوی پارسوال می‌دهد

$$\begin{aligned} \sum_{q=-\infty}^{+\infty} (x_q - x_{q+1})^2 &= \frac{l}{2\pi} \int_{-\pi/l}^{+\pi/l} | (1 - e^{ikl}) \xi(k, t) |^2 dk \\ &= \frac{l}{2\pi} \int_{-\pi/l}^{+\pi/l} 4 \sin^2 \left(\frac{kl}{2} \right) | \xi(k, t) |^2 dk \end{aligned} \quad (45)$$

با بردن (۴۳)، (۴۴) و (۴۵) در (۴۲)، سرانجام به دست می‌آوریم

$$\mathcal{H} = \frac{l}{2\pi} \int_{-\pi/l}^{+\pi/l} \left\{ \frac{m}{2} \left[\omega^2 + 4\omega^2 \sin^2 \left(\frac{kl}{2} \right) \right] | \xi(k, t) |^2 + \frac{1}{2m} | \pi(k, t) |^2 \right\} dk \quad (46)$$

این نتیجه را به صورت زیر می‌نویسیم

$$\mathcal{H} = \frac{l}{2\pi} \int_{-\pi/l}^{+\pi/l} h(k) dk \quad (47)$$

با

$$h(k) = \frac{1}{2} m \Omega^2(k) | \xi(k, t) |^2 + \frac{1}{2m} | \pi(k, t) |^2 \quad (48)$$

بدین ترتیب \mathcal{H} همچون مجموع (در واقع، انتگرال‌گیری) انرژیهای وابسته به نوسانگرهای هماهنگ خیالی واجفتیده‌ای که $\xi(k, t)$ موضع و $\pi(k, t)$ تکانه آنها را می‌دهد، پدیدار می‌شود. همچنین می‌توان $h(k)$ را برحسب متغیر $\alpha(k, t)$ بسته به هر مد طبیعی بیان کرد. در واقع، به کمک (۳۷)، عبارت (۴۸) را به شکل زیر در می‌آورند

$$h(k) = \frac{1}{2} \hbar \Omega(k) [\alpha(k, t) \alpha^*(k, t) + \alpha^*(-k, t) \alpha(-k, t)] \quad (49)$$

یعنی، با به کار گرفتن (۳۴) داریم

$$h(k) = \frac{1}{2} \hbar \Omega(k) [\alpha(k, \circ) \alpha^*(k, \circ) + \alpha^*(-k, \circ) \alpha(-k, \circ)] \quad (50)$$

بنابراین $h(k)$ وابسته به زمان نیست، و این شگفت‌انگیز نیست، زیرا $h(k)$ انرژی یک نوسانگر هماهنگ است. از سوی دیگر، از (۴۷) درمی‌یابیم که نوسانگرهای خیالی مستقل‌اند، زیرا انرژی \mathcal{H} تنها مجموع انرژیهای وابسته به هریک از آنهاست.

با بردن عبارت (۴۹) در (۴۷) خواهیم یافت

$$\mathcal{H} = \frac{l}{\sqrt{\pi}} \int_{-\pi/l}^{+\pi/l} dk \frac{1}{\sqrt{\pi}} \hbar \Omega(k) [\alpha(k, t) \alpha^*(k, t) + \alpha(-k, t) \alpha^*(-k, t)] \quad (51)$$

در این هنگام می‌توان در انتگرال جمله دوم k را به $-k$ تبدیل کرد و \mathcal{H} را همچون مجموع انرژیهای $h'(k)$ وابسته به مدهای طبیعی‌ای که با $\alpha(k, t)$ مشخص می‌شوند در نظر گرفت.

$$\mathcal{H} = \frac{l}{\sqrt{\pi}} \int_{-\pi/l}^{+\pi/l} dk h'(k) \quad (52)$$

با

$$\begin{aligned} h'(k) &= \hbar \Omega(k) \alpha^*(k, t) \alpha(k, t) \\ &= \hbar \Omega(k) \alpha^*(k, 0) \alpha(k, 0) \end{aligned}$$

۲. رفتار مکانیک کوانتومی

بررسی کوانتومی مسئلهٔ زنجیره نامحدود نوسانگرهای جفتیده، بنابر قاعدهٔ عمومی کوانتس، بر جایگزین کردن کمیت‌های کلاسیک $x_q(t)$ و $p_q(t)$ با x_q و P_q ، که از این رابطه‌های جابه‌جایی بندادی زیر پیروی می‌کنند، استوار شده است

$$[X_{q_1}, P_{q_2}] = i\hbar \delta_{q_1 q_2} \quad (54)$$

الف) حالت‌های مانا در غیاب جفتیدگی

در غیاب جفتیدگی ($\omega_1 = 0$)، هامیلتونی H دستگاه نوشته می‌شود

$$\begin{aligned} H(\omega_1 = 0) &= \sum_q \left[\frac{1}{\sqrt{2}} m \omega^2 X_q^2 + \frac{1}{\sqrt{2}m} P_q^2 \right] \\ &= \sum_q H_q \end{aligned} \quad (55)$$

که در آن H_q هامیلتونی یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی است که در فضای حالت‌های ذره (q) عمل می‌کند.

عملگر a_q را که با

$$a_q = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X_q + \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} P_q \right] \quad (56)$$

تعریف می‌شود وارد کنیم؛ در این صورت H_q را می‌توان چنین نوشت

$$H_q = \frac{1}{2} (a_q a_q^\dagger + a_q^\dagger a_q) \hbar\omega = \left(a_q^\dagger a_q + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \quad (57)$$

a_q و a_q^\dagger عملگرهای نابودی و آفرینش یک کوانتوم انرژی برای نوسانگر (q) هستند. می‌دانیم (بخش ۵-۳-۱ الف) که ویژه‌حالت‌های H_q مستقیماً با

$$|\varphi_{n_q}^q\rangle = \frac{1}{\sqrt{(n_q)!}} (a_q^\dagger)^{n_q} |\varphi_0^q\rangle \quad (58)$$

نتیجه می‌شود. $|\varphi_0^q\rangle$ حالت پایه نوسانگر (q) و n_q یک عدد درست مثبت یا صفر است. اگر $E_{n_q}^q$ انرژی حالت $|\varphi_{n_q}^q\rangle$ را نسبت به انرژی حالت پایه به‌عنوان مبدأ انرژی، در نظر بگیریم (که به معنی حذف جمله $1/2$ در (۵۷) است)، به‌دست می‌آوریم

$$E_{n_q}^q = n_q \hbar\omega \quad (59)$$

در غیاب جفتیگی، حالت‌های مانای دستگاه کلی حاصلضربهای تانسوری به شکل زیر هستند

$$\cdots \otimes |\varphi_{n_{-1}}^{-1}\rangle \otimes |\varphi_{n_0}^0\rangle \otimes |\varphi_{n_1}^1\rangle \otimes \cdots \quad (60)$$

و انرژی آنها عبارت است از

$$E = \sum_q E_{n_q}^q = [\cdots + n_{-1} + n_0 + n_1 + \cdots] \hbar\omega \quad (61)$$

۱. اگر مبدأ انرژی هر نوسانگر را با حذف جمله $1/2$ در (۵۷) تغییر نداده بودیم، اعداد کوانتومی n_q هر چه بودند، انرژی بینهایت به‌دست می‌آوردیم. هرگاه به‌جای یک زنجیره نامحدود، زنجیره‌ای شامل شمار بسیار زیاد ولی محدود نوسانگر را در نظر بگیریم این مشکل پیش نخواهد آمد. با این‌همه، مسائل مربوط به "اثرات کناره" پدیدار می‌شود.

حالت پایه، که انرژی آن به عنوان مبدأ انتخاب شده است، واگن نیست. در واقع، $E = 0$ در (۶۱) تنها هنگامی به دست می آید که

$$n_q = 0 \quad \text{به ازای همه } q \text{ ها} \quad (62)$$

پس حالت (۶۰) متناظر با آن یکتا نیست. برعکس، همه ترازهای دیگر به طور نامحدود واگن هستند. به عنوان مثال، نخستین تراز، با انرژی $\hbar\omega$ ، با همه حالت‌هایی از (۶۰) که برای آنها همه اعداد n_q صفرند، بجز یکی که برابر یک است، متناظرند؛ در این صورت، همه نوسانگرها بجز یکی، در حالت پایه خود هستند. این بدان سبب است که برانگیختگی می‌تواند بر روی هر یک از نوسانگرهایی که تراز $E = \hbar\omega$ به طور نامحدود واگن باشد، جایگزین شود.

ب) اثر جفتیدگی

هنگامی که جفتیدگی صفر نیست، عملگر هامیلتونی می‌شود

$$H = H(\omega_1 = 0) + V \quad (63)$$

با

$$V = \frac{1}{4} m \omega_1^2 \sum_q (X_q - X_{q+1})^2 \quad (64)$$

حالت‌های (۶۰) در این مورد دیگر حالت‌های مانای دستگاه نیستند. در واقع، اینها ویژه حالت‌های $H(\omega_1 = 0)$ هستند، و نه V . برای درک آن، V را برحسب عملگرهای a_q^\dagger و a_q بنویسیم

$$V = \frac{1}{4} \hbar \omega_1 \frac{\omega_1}{\omega} \sum_q (a_q + a_q^\dagger - a_{q+1} - a_{q+1}^\dagger)^2 \quad (65)$$

اینک پیداست که اثر V بر روی حالتی از نوع (۶۰) همان حالت را به دست نمی‌دهد: اعداد کوانتومی n_q دیگر "اعداد کوانتومی خوب" نیستند، زیرا به عنوان مثال V می‌تواند یک برانگیختگی جایگاه (q) را به جایگاه $(q+1)$ (جمله برحسب $a_{q+1}^\dagger a_q$) انتقال دهد.

برای به دست آوردن حالت‌های مانای دستگاه در حضور جفتیدگی، مناسب است، که همانند مکانیک کلاسیک، "متغیرهای بهنجار" یعنی عملگرهایی که به مدهای طبیعی دستگاه وابسته‌اند، به کار بریم.

ج) عملگرهای بهنجار، رابطه‌های جابه‌جایی

با عملگرهای بهنجار $\xi(k, t)$ و $\pi(k, t)$ عملگرهای $\Xi(k)$ و $\Pi(k)$ متناظر است که به صورت زیر تعریف می‌شوند

$$\Xi(k) = \sum_q X_q e^{-iqkl} \quad (۶۶-الف)$$

$$\Pi(k) = \sum_q P_q e^{-iqkl} \quad (۶۶-ب)$$

حوزه تغییرات پارامتر بیوسه k همواره به نخستین منطقه بریلوئن (۱۵) محدود می‌شود. باید توجه داشت که، چون متغیرهای بهنجار $\xi(k, t)$ و $\pi(k, t)$ مختلط هستند، عملگرهای وابسته $\Xi(k)$ و $\Pi(k)$ ، برخلاف X_q و P_q ، هرمیتی هستند. با رابطه‌های (۲۴) و (۲۷)، در اینجا رابطه‌های زیر متناظرند

$$\Xi(-k) = \Xi^\dagger(k) \quad (۶۷-الف)$$

$$\Pi(-k) = \Pi^\dagger(k) \quad (۶۷-ب)$$

رابطه‌های جابه‌جایی بنیادی (۵۴) امکان می‌دهد تا جابه‌جاگرهای بین $\Xi(k)$ و $\Pi(k)$ را محاسبه کنیم. بی‌درنگ پیداست که $\Xi(k)$ با $\Xi(k')$ و همچنین $\Pi(k)$ با $\Pi(k')$ جابه‌جا می‌شوند. اما در مورد جابه‌جاگر $[\Xi(k), \Pi^\dagger(k')]$ ، نوشته می‌شود

$$\begin{aligned} [\Xi(k), \Pi^\dagger(k')] &= \sum_q \sum_q [X_q, P_{q'}] e^{-iqkl} e^{+iq'k'l} \\ &= i\hbar \sum_q e^{-iq(k-k')l} \end{aligned} \quad (۶۸)$$

بنابر فرمول (۳۱) از بیوسه ۲ و این واقعیت که k و k' هر دو متعلق به بازه (۱۵) هستند، به دست می‌آوریم

$$[\Xi(k), \Pi^\dagger(k')] = i\hbar \frac{\pi}{l} \delta(k - k') \quad (۶۹)$$

در بخش ۱-ج-۲ دیدیم که مناسب است دو متغیر $\xi(k, t)$ و $\pi(k, t)$ را به صورت تنها یک متغیر $\alpha(k, t)$ درهم ادغام کنیم [فرمول (۳۰)]. عملگر وابسته به $\alpha(k, t)$ عبارت خواهد بود از

$$a(k) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\beta(k) \Xi(k) + \frac{i}{\hbar \beta(k)} \Pi(k) \right] \quad (۷۰)$$

که $\beta(k)$ با (۳۲) تعریف می‌شود. باید توجه داشت که الحاقی $a(k)$ چنین نوشته می‌شود

$$a^\dagger(k) = \frac{1}{\sqrt{\gamma}} \left[\beta(k)\Xi^\dagger(k) - \frac{i}{\hbar\beta(k)}\Pi^\dagger(k) \right] \quad (۷۱)$$

با به‌کار بردن (۶۹) و همچنین (۶۷)، بی‌هیچ دشواری به‌دست می‌آوریم

$$[a(k), a(k')] = [a^\dagger(k), a^\dagger(k')] = 0 \quad (۷۲\text{-الف})$$

$$[a(k), a^\dagger(k')] = \frac{\gamma\pi}{l} \delta(k - k') \quad (۷۲\text{-ب})$$

با کمیت کلاسیک $h(k)$ که با (۴۸) تعریف شده عملگر

$$H(k) = \frac{1}{2m}\Pi(k)\Pi^\dagger(k) + \frac{1}{\gamma}m\Omega^\dagger(k)\Xi(k)\Xi^\dagger(k) \quad (۷۳)$$

متناظر است زیرا $\Xi(k)$ با $\Xi(k')$ و همچنین $\Pi(k)$ با $\Pi(k')$ جابه‌جا می‌شوند. برای به‌دست آوردن هم‌ارز فرمول کلاسیک (۴۹)، باید توجه داشت که $a(k)$ و $a^\dagger(k)$ جابه‌جا نمی‌شوند و بنابراین باید ترتیبی را که عملگرها در طول محاسبه وارد می‌شوند حفظ کرد. اگر (۶۷) را منظور کنیم رابطه‌های (۳۷) در اینجا نوشته می‌شوند

$$\beta(k)\Xi(k) = \frac{1}{\sqrt{\gamma}}[a(k) + a^\dagger(-k)] \quad (۷۴\text{-الف})$$

$$\frac{1}{\hbar\beta(k)}\Pi(k) = -\frac{i}{\sqrt{\gamma}}[a(k) - a^\dagger(-k)] \quad (۷۴\text{-ب})$$

با بردن این عبارتها در (۷۳) می‌یابیم که

$$H(k) = \frac{1}{\gamma}\hbar\Omega(k)[a(k)a^\dagger(k) + a^\dagger(-k)a(-k)] \quad (۷۵)$$

هامیلتونی کل H دستگانه را می‌توان، مشابه با (۵۲) به‌صورت

$$H = \frac{l}{2\pi} \int_{-\pi/l}^{+\pi/l} dk H'(k) \quad (۷۶)$$

با

$$H'(k) = \frac{1}{\gamma}\hbar\Omega(k)[a(k)a^\dagger(k) + a^\dagger(k)a(k)] \quad (۷۷)$$

نوشت. بدین ترتیب، $a(k)$ و $a^\dagger(k)$ همچون عملگرهای نابودی و آفرینش مشابه با عملگرهای یک نوسانگر هماهنگ پدیدار می‌شوند. با این وصف، چون k شاخص پیوسته است، رابطه‌های جابه‌جایی (۷۲) تابع دیراک $\delta(k - k')$ را به جای نماد کروئکر وارد می‌کنند، در نتیجه باید $H'(k)$ را به شکل متقارن (۷۷) نگاه داشت. به آسانی می‌توان نشان داد که عملگرهای گوناگون $H'(k)$ میان خود جابه‌جا می‌شوند

$$[H'(k), H'(k')] = 0 \quad (78)$$

د) حالت‌های مانا در حضور جفتیدگی

بنابر فرمولهای (۷۶)، و (۷۷)، حالت پایه $|0\rangle$ دستگاه نوسانگرهای جفتیده با شرط

$$a(k) |0\rangle = 0 \quad (79)$$

برای همه اندازه‌های k تعریف می‌شود. حالت‌های مانای دیگر از حالت $|0\rangle$ با عمل عملگرهای $a^\dagger(k)$ به دست می‌آیند. انرژی آنها انتگرال انرژیهای وابسته به هر یک از مدهاست. مشکلاتی چند به سبب بینهایت پیوسته مدهای طبیعی پدید می‌آید. به ویژه، انرژی حالت پایه که از (۷۶) و (۷۷) حاصل می‌شود بینهایت است. ما از این دشواریها، که وانگهی برای یک زنجیره حقیقی یعنی محدود پیش نمی‌آیند، بحثی نخواهیم کرد (بخش ۲-الف).

فرمول (۱۰) اندازه کوانتوم انرژی $\hbar\omega(k)$ وابسته به هر یک از مدها را به دست می‌دهد. بنابراین مشخص می‌کند که چه کوانتوم انرژی را دستگاه می‌تواند جذب کرده یا گسیل کند: اینها الزاماً با بسامدهایی متناظرند که در نوار مجاز (۱۷) قرار دارند.

۳. کاربرد در مورد بررسی ارتعاشهای یک بلور: فونونها

الف) طرح مسئله

جسم جامدی را متشکل از شمار بسیار زیادی اتم (یا یون) در نظر می‌گیریم که موضعهای ترازمندی آنها به طور منظم در فضا در گروههای یک شبکه بلورین قرار دارند. برای سادگی، فرض می‌کنیم که این شبکه یک بعدی است و آنرا با یک زنجیره خطی از بینهایت اتم شبیه می‌دانیم. ما در اینجا می‌خواهیم نتایج بخشهای پیشین را، برای مطالعه حرکت هسته‌های این اتمها پیرامون موضع ترازمندیشان به کار ببریم.

بدین منظور، همان تقریبی را به کار خواهیم برد که در مطالعه ارتعاشهای مولکولی به کار بردیم (تقریب بورن-وپنهایمر، مکمل ۱ همین فصل، یادداشت بخش ۱-الف). فرض می‌کنیم که نخست می‌توان حرکت الکترونها را با در نظر گرفتن موضع هسته‌ها همچون پارامترهای ثابت x_q حساب کرد، یعنی می‌توان معادله شرودینگر متناظر را حل کرد (در حقیقت، این معادله بیش از آن پیچیده است که آن را بتوان به دقت حل کرد، و در اینجا نیز باید در عمل به تقریبهایی بسنده کرد). سپس انرژی دستگاه الکترونی را در حالت پایه آن به $E_{el}(\dots, x_1, x_0, x_1, \dots)$ نشان می‌دهیم [x_q جابه‌جایی هسته (q) نسبت به موضع ترازمندی آن است]. می‌توان نشان داد که در این صورت محاسبه حرکت هسته‌ها، با این نگرش که دارای یک انرژی پتانسیل کل $U_N(\dots, x_{-1}, x_0, x_1, \dots)$ برابر با مجموع انرژی برهم‌کنش الکتروستاتیک آنها و $E_{el}(\dots, x_{-1}, x_0, x_1, \dots)$ هستند، با تقریب خوبی امکانپذیر است.

در واقع، ما مسئله را با چند فرض معقول در مورد U_N (که از آن گریزی نیست، زیرا ما E_{el} را نمی‌شناسیم) باز هم ساده‌تر خواهیم کرد. فرض می‌کنیم که U_N عمدتاً برهم‌کنش هریک از هسته‌ها با نزدیکترین مجاورهایش را توصیف می‌کند (در یک زنجیره خطی نامحدود، هر هسته دارای چنین دو مجاوری است)، یعنی از نیروهایی که میان هسته‌های غیر مجاور عمل می‌کنند، می‌توان چشم پوشید. افزون بر آن، می‌پذیریم که در گستره اندازه‌هایی که جابه‌جاییهای x_q می‌توانند بگیرند، U_N به خوبی با عبارتی به شکل

$$U_N \simeq \frac{1}{2} m \omega_1^2 \sum_q (x_q - x_{q+1})^2 \quad (A_0)$$

نمایش داده می‌شود، که در آن جرم m یک هسته است و ω_1 شدت برهم‌کنش آن با مجاورهایش را مشخص می‌کند. بنابراین عبارتهای مرتبه بالاتر بر حسب $(x_q - x_{q+1})$ ، یعنی ناهماهنگی پتانسیل را به حساب نمی‌آوریم.

چون عبارت (A₀) با (۶۰) یکسان است، می‌توان نتیجه‌های بخشهای پیشین را درباره مدل ساده جسم جامدی که کمی پیش تعریف کردیم به کار برد. با این وصف خاطر نشان می‌کنیم که باید ω را مساوی با صفر بگیریم، زیرا U_N انرژی پتانسیل کل دستگاه هسته‌هاست. این هسته‌ها با مجاورهای خود در برهم‌کنش هستند، ولی افزون بر آن به طور کشسان به موضع ترازمندی وابسته نیستند.^۱

۱. مدل اینشتین را که در مکمل ۱ همین فصل شرح دادیم، بر پایه فرض متفاوتی بنا می‌شود. فرض می‌کنیم که هر هسته پتانسیل میانگینی را "می‌بندد" که ناشی از برهم‌کنش با مجموعه هسته‌های دیگر است. ولی عملاً از موضعهای این هسته‌ها مستقل است. در تقریب نخست این پتانسیل میانگین سهمی شکل در نظر گرفته شده است. در این ←

ب) مدهای طبیعی، سرعت صوت در بلور

هریک از مدهای طبیعی ارتعاشی بلور با یک بردار موج k و یک بسامد زاویه‌ای $\Omega(k)$ مشخص می‌شود. در فیزیک حالت جامد، کوانتوم انرژی وابسته به هر مد را "فونون" نامند. فونون را می‌توان همچون ذره‌ای با انرژی $\hbar\Omega(k)$ و تکانه $\hbar k$ پنداشت. در حقیقت، فونون یک ذره واقعی نیست، زیرا وجود آن با حالتی از ارتعاش گروهی ذره‌های حقیقی که بلور را می‌سازند بیان می‌شود. گاهی گفته می‌شود که فونونها "شبه ذره" هستند؛ اینها کاملاً مشابه ذره‌های تصویری با موضعهای $x_G(t)$ و $x_R(t)$ هستند که ما در مکمل ۷ همین فصل وارد کردیم. به‌علاوه یک فونون را هنگامی می‌توان به وجود آورد یا از بین برد که به‌بلور انرژی ارتعاشی متناظر با فونون را داد یا از آن باز گرفت. در حالی که (لااقل در گستره غیرنسبیتی، که خود را بدان محدود می‌کنیم) نمی‌توان ذره‌ای چون الکترون را نه به وجود آورد و نه از بین برد. در این مورد یادآوری می‌کنیم که چون تعداد فونونها در یک مد می‌تواند دلخواه باشد، فونونها بوزونها هستند (فصل ۱۴ را ببینید).

قاعده پاشیدگی که با تابع $\Omega(k)$ داده می‌شود، در مورد فونون با آنچه که در بخش ۱-ب-۳ بحث شد متفاوت است، زیرا بسامد زاویه‌ای ω در اینجا صفر است. در این مورد با قرار دادن $\omega = 0$ در (۱۰) خواهیم یافت

$$\Omega(k) = 2\omega_1 \left| \sin\left(\frac{kl}{2}\right) \right| \quad (81)$$

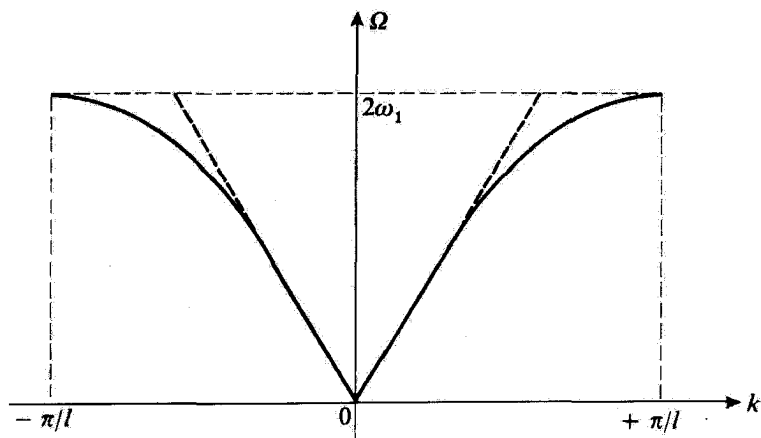
منحنی نمایش $\Omega(k)$ در شکل ۵ داده شده است. این منحنی از دو نیمه قوس سینوسی تشکیل یافته است. برعکس آنچه که برای ω متفاوت با صفر پدید می‌آید، اکنون $\Omega(k)$ برای $k = 0$ صفر می‌شود و با k ، هنگامی که k بسیار کوچک است، به‌طور خطی تغییر می‌کند. در واقع، تا هنگامی که

$$|k| \ll \frac{1}{l} \quad (82)$$

داریم

$$\Omega(k) \simeq \omega_1 |kl| = v_s |k| \quad (83)$$

مورد دارای مجموعه‌ای از نوسانگرهای مستقل هستیم. در اینجا، برعکس، با مدل دقیقتری سروکار داریم که در آن به‌طور صریح (هرچند به‌طور تقریبی) برهم‌کنش میان هسته‌های مختلف منظور می‌شود.



شکل ۵ قاعده پاشیدگی برای فونونها (منحنی شکل ۲ برای $\omega = 0$)؛ شیب منحنی در مبدأ، سرعت صوت در بلور را می‌دهد.

که در آن

$$v_s = \omega_1 l \quad (۸۴)$$

شرط (۸۲) بیان می‌کند که طول موج $|k| \approx 2\pi / \lambda$ وابسته به مد مورد نظر باید بسیار بزرگتر از فاصله بین هسته‌ها باشد. برای چنین طول موجهایی، ساختار ناپیوسته زنجیره را نمی‌توان مشاهده کرد و محیط پاشنده نیست؛ سرعت فاز $v_s \approx |\Omega(k)/k|$ مستقل از k است. این موضوع ایجاب می‌کند که بسته موجی که در آن بجز اندازه‌های کوچک k (با یک علامت) وارد نمی‌شود، بدون تغییر شکل با سرعت v_s منتشر شود. چون طول موجهای آکوستیکی در (۸۲) صدق می‌کنند، v_s سرعت صوت در بلور است.

هنگامی که $|k|$ حدود $1/l$ است، ساختار ناپیوسته زنجیره دخالت می‌کند و بسامد زاویه‌ای $\Omega(k)$ با افزایش $|k|$ کندتر از آنچه فرمول (۸۳) نشان می‌دهد، تغییر می‌کند (در شکل ۵ منحنی از خطهای راست خط‌چین که مماسهای آن در مبدأ هستند، جدا می‌شود). محیط در این صورت پاشنده است و یک بسته موج با سرعت گروه زیر جابه‌جا می‌شود

$$v_G = \frac{d\Omega(k)}{dk} \neq \frac{\Omega(k)}{k} \quad (۸۵)$$

سرانجام هنگامی که k به مرزهای نخستین منطقه بریلوئن نزدیک می‌شود ($k \rightarrow \pm\pi/l$)، در شکل ۵ دیده می‌شود همان‌طور که، سرعت گروه به سمت صفر میل می‌کند. همانند مورد یک موجبر الکترومغناطیسی، سرعت انتشار هنگامی صفر می‌شود که یک بسامد قطع دست می‌دهد (در اینجا $\omega_1/2\pi$).

شکل ۵ را همچنین می‌توان چنین در نظر گرفت که طیف انرژیهای $\hbar\Omega(k)$ ممکن فونونها را، برحسب تکانه‌هایشان $\hbar k$ به دست می‌دهد. شناخت چنین طیفی برای یک بلور واقعی، بسیار مهم است. این طیف امکان می‌دهد تا انرژیها و تکانه‌هایی را که بلور به هنگام برهم‌کنش با دستگاه دیگر می‌تواند بدهد یا دریافت کند مشخص کنیم. به‌عنوان مثال، می‌توان پراکندگی غیرکشسان نور به وسیله یک بلور پدیده بریلوئن) را نتیجه نابودی یا آفرینش یک فونون با تغییر انرژی و تکانه فوتون فرودی دانست (در حالی که انرژی و تکانه کلی در جریان فرایند پایسته می‌ماند).

یادداشت:

مدل ساده یک‌بعدی که گسترش دادیم به ما امکان داد تا مفهومهای فیزیکی مهمی را دریابیم که برای یک بلور واقعی معتبر می‌ماند: کوانتومهای انرژی وابسته به مدهای طبیعی، پاشندگی محیط، نوار بسامد (و بنابراین نوار انرژی) مجاز و ممنوع. در واقع، شبکه بلورین دارای سه بعد است، و یک مد طبیعی با یک بردار موج واقعی k مشخص می‌شود. Ω در این صورت، در حالت عمومی، نه تنها به مدول k بلکه به راستای آن نیز وابسته است. به‌علاوه، ممکن است (به‌ویژه در مورد بلورهای یونی) گره‌های شبکه همگی با ذره‌های یکسان اشغال نشده باشند و مثلاً دارای دو نوع ذره مختلف باشیم که به‌تناوب با نظم جای گرفته باشند. در این صورت برای هر بردار موج k ، چندین بسامد زاویه‌ای $\Omega(k)$ پدید می‌آید، برخی از آنها که با $|k| \rightarrow 0$ صفر می‌شوند، همانند آنهایی که در بالا دیده شد "شاخه آکوستیکی"، را تشکیل می‌دهند، و برخی دیگر به آنچه که "شاخه‌های اپتیکی"^۲ نام دارد و در آنها فونون با تکانه صفر دارای انرژی غیرصفر است، تعلق دارند. ما قصد نداریم همه این مسائل را در اینجا بررسی کنیم، هر چند که در فیزیک حالت جامد دارای اهمیت اساسی هستند.

۱. یک بلور واقعی همچنین شامل ناخالصیها و ناکاملیهایی است که به‌طور گسترده‌ای توزیع شده‌اند. در اینجا تنها از بلورهای کامل سخن می‌گوییم.
۲. این نامگذاری از این واقعیت ناشی می‌شود که، در یک بلور یونی، فونونهای "اپتیکی" با موجهای الکترومغناطیسی که همانند موجهای گستره مرئی دارای طول موجی بسیار بزرگتر از فاصله آنها هستند، جفتیده‌اند.

مراجع برای مطالعه بیشتر
زنجیرهای نوسانگرهای کلاسیکی جفتیده

Berkeley 3 (7.1), §§2.4 and 3.5.

بخش ۱۳ کتابشناسی به‌ویژه

Kittel (13.2), chap. 5.

منالهای دیگری از نوسانهای جمعی

Feynman III (1.2), chap. 15.

مدهای ارتعاشی یک دستگاه فیزیکی پیوسته. کاربرد در تابش؛

فوتونها

۱. طرح مسئله

۲. مدهای ارتعاشی یک دستگاه مکانیکی پیوسته: مثال سیم مرتعش

الف) نمادگذارها. متغیرهای دینامیکی دستگاه

ب) معادله‌های کلاسیک حرکت

ج) وارد کردن متغیرهای بهنجار

د) هامیلتونی کلاسیک

ه) کوانتس

۳. مدهای ارتعاشی تابش: فوتونها

الف) نمادگذارها. معادله‌های حرکت

ب) وارد کردن متغیرهای بهنجار

ج) هامیلتونی کلاسیک

د) کوانتس

۱. طرح مسئله

در مکملهای ۷ و ۸ همین فصل، مفهوم متغیرهای بهنجار را برای دستگاهی متشکل از دو یا یک بینهایت شمارش‌پذیر از نوسانگرهای هماهنگ جفتیده معرفی کردیم. قصد ما در این مکمل این است که نشان دهیم همان مفهوم را می‌توان دربارهٔ میدان الکترومغناطیسی نیز که یک دستگاه فیزیکی "پیوسته" است، به‌کاربرد (هیچ حد پایین طبیعی برای طول‌موج تابش وجود ندارد).

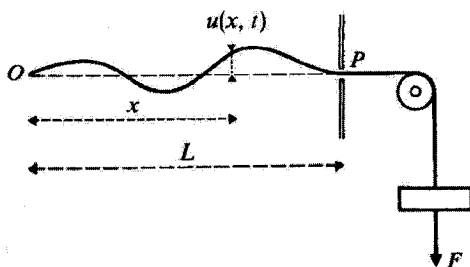
این بررسی مستلزم تحلیل بعضی مسائل ظریف خواهد بود. بنابراین، برای انتقال تدریجی‌تری از این مکمل به مکملهای پیشین (۷ و ۸)، ابتدا مطلب را در بخش ۲ با مطالعهٔ مدهای ارتعاشی یک دستگاه "مکانیکی" پیوسته شروع می‌کنیم: سیم مرتعش. بدیهی است که در مقیاس اتمی، چنین دستگاهی پیوسته نیست: سیم از شمار بسیار بزرگی اتم تشکیل شده است. با این همه، ما این ساختار اتمی را نادیده انگاشته، سیم را مانند اینکه حقیقتاً پیوسته است بررسی می‌کنیم، زیرا هدف اصلی محاسبه این است که نشان دهیم چگونه می‌توان متغیرهای بهنجار را برای یک

دستگاه پیوسته وارد کرد. چون افزون بر آن سخن بر سر دستگاهی مکانیکی است. بدون دشواری می توان گشتاورهای همیوخ متغیرهای بهنجار را تعریف کرد، هامیلتونی دستگاه را محاسبه نمود و نشان داد که حقیقتاً مانند مجموعی از هامیلتونی نوسانگرهای هماهنگ مستقل یک بعدی پدیدار می شود. همچنین جزئیات کوانتس چنین دستگاهی را بحث خواهیم کرد.

نتایج به دست آمده در بخش ۲ امکان می دهد که، در بخش ۳، مطالعه مدهای ارتعاشی تابش را بررسی کنیم. نشان خواهیم داد که مطالعه تابش محصور در یک حفره متوازی السطوح به معادله هایی بسیار شبیه به معادله های سیم مرتعش می انجامد. همان تبدیلهای امکان می دهد تا متغیرهای بهنجار کاملاً واجفته از یکدیگر را برای تابش (وابسته به موجهای مانایی که می توانند در حفره پدید آیند) وارد کنیم. سپس نتایج به دست آمده در بخش ۲ را برای تنها رسیدن به مفهوم فوتون تعمیم می دهیم (در واقع در اینجا این موضوع مطرح نیست که نشان دهیم چگونه می توان، برای دستگاهی غیرمکانیکی مانند میدان الکترومغناطیسی، گشتاورهای همیوخ، یک لاگرانژی و یک هامیلتونی تعریف کرد).

۲. مدهای ارتعاشی یک دستگاه مکانیکی پیوسته: مثال سیم مرتعش الف) نمادگذاریها. متغیرهای دینامیکی دستگاه

سیم در نقطه O ثابت شده است (شکل ۱). سیم از سوراخ ریزی که در صفحه P تعبیه شده است می گذرد و وزنه ای بدان یک نیروی کشش F وارد می کند. برای سادگی فرض می کنیم که سیم همیشه در یک صفحه که از O و P می گذرد، واقع است. حالت سیم در لحظه t در صورتی تعیین می شود که در این لحظه، انحراف $u(x, t)$ نقطه های مختلف (که با طول x روی OP نمایانده می شوند) و همچنین سرعت $\partial u(x, t) / \partial t$ متناظر شناخته شده باشد. قیدهایی که به O



شکل ۱ سیم مرتعشی که از دو نقطه ثابت O و P می گذرد و تحت تأثیر نیروی کشش F قرار دارد. $u(x, t)$ انحراف نقطه ای از سیم واقع در فاصله x از O نسبت به موضوع ترازمندی آن است.

و P اعمال می‌شوند با شرایط مرزی زیر بیان می‌شوند

$$u(0, t) = u(L, t) = 0 \quad (1)$$

0 و L طول نقطه‌های O و P هستند.

مهم است دریابیم که در این مسئله، متغیرهای دینامیکی عبارت‌اند از انحرافهای $u(x, t)$ در هر نقطه به طول x : یک بینهایت پیوسته از متغیرهای دینامیکی وجود دارد. در نتیجه x یک متغیر دینامیکی نیست بلکه شاخصی پیوسته است که امکان می‌دهد تا متغیرهای دینامیکی که مورد نظر ما هستند، نمایانده شوند (x همان نقشی را داراست که شاخصهای ۱ و ۲ در مکمل ۷ یا شاخص q در مکمل ۸ همین فصل داراست).

ب) معادله‌های کلاسیک حرکت

μ را جرم واحد طول سیم بگیریم. اگر فرض کنیم سیم سخت نباشد و به انحرافهای ضعیف بسنده کنیم، یک محاسبه ساده کلاسیک امکان می‌دهد تا معادله با مشتقات جزئی را که u در آنها صدق می‌کند به دست آوریم. خواهیم یافت

$$\left(\frac{1}{v^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) u(x, t) = 0 \quad (2)$$

که در آن

$$v = \sqrt{F/\mu} \quad (3)$$

سرعت انتشار یک اغتشاش در سیم است.

چنین معادله‌ای بیان می‌کند که تحول متغیر u متناظر با نقطه x ، به متغیرهای u در نقاط بسیار نزدیک وابسته است [اینها با واسطه $\partial^2 u / \partial x^2$ دخالت می‌کنند]. نتیجه می‌گیریم که متغیرهای $u(x, t)$ گام به گام یکی به دیگری جفتیده‌اند. در این هنگام می‌توان این پرسش را مطرح ساخت: آیا ممکن است، همانند مکملهای ۷ و ۸ همین فصل، متغیرهای جدیدی، ترکیبهای خطی از متغیرهای $u(x, t)$ وابسته به نقاط مختلف x ، وارد کرد که خود آنها از یکدیگر واجفتیده باشند؟

ج) وارد کردن متغیرهای بهنجار

مجموعه‌ای از توابع x به صورت زیر در نظر می‌گیریم

$$f_k(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(k \frac{\pi x}{L}\right) \quad (۴)$$

که در آن k عدد درست مثبتی است: $k = 1, 2, 3, \dots$. تابعهای $f_k(x)$ همان شرایط مرزی را برآورده می‌سازند که $u(x, t)$

$$f_k(0) = f_k(L) = 0 \quad (۵)$$

به علاوه، به سادگی تحقیق می‌شود که

$$\int_0^L f_k(x) f_{k'}(x) dx = \delta_{kk'} \quad (۶)$$

(رابطه راست‌هنجاری) و

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{k^2 \pi^2}{L^2}\right) f_k(x) = 0 \quad (۷)$$

می‌توان نشان داد که هر تابعی را که در $x = L$ و $x = 0$ صفر شود [مانند مورد $u(x, t)$ ، می‌توان تنها و تنها به یک گونه برحسب $f_k(x)$ بسط داد. بنابراین می‌توان نوشت

$$u(x, t) = \sum_{k=1}^{\infty} q_k(t) f_k(x) \quad (۸)$$

$q_k(t)$ ها با توجه به (۶)، به سادگی به دست می‌آیند

$$q_k(t) = \int_0^L u(x, t) f_k(x) dx \quad (۹)$$

حالت سیم در لحظه t هم با مجموعه اندازه‌های $\{u(x, t), \partial/\partial t u(x, t)\}$ متناظر با نقاط مختلف x تعریف می‌شود و هم با مجموعه اعداد $\{q_k(t), \dot{q}_k(t)\}$. همان طور که از (۹) پیداست، متغیرهای جدیدی را که وارد کردیم ترکیب‌هایی خطی از متغیرهای قدیم $u(x, t)$ هستند. عکس این مطلب نیز برقرار است [فرمول (۸)].

برای به دست آوردن معادله‌ای که $q_k(t)$ ها از آن پیروی کنند، کافی است بسط (۸) را در معادله حرکت (۲) ببریم. با به کار بردن (۷) و یک محاسبه ساده، چنین به دست می‌آید

$$\sum_{k=1}^{\infty} f_k(x) \left[\frac{1}{v^2} \frac{d^2}{dt^2} q_k(t) + \frac{k^2 \pi^2}{L^2} q_k(t) \right] = 0 \quad (10)$$

یعنی باز چون $f_k(x)$ ها به طور خطی مستقل‌اند

$$\left[\frac{d^2}{dt^2} + \omega_k^2 \right] q_k(t) = 0 \quad (11)$$

با

$$\omega_k = \frac{k\pi v}{L} \quad (12)$$

بدین ترتیب، می‌بینیم که متغیرهای جدید $q_k(t)$ ، که باز هم متغیرهای بهنجار نام دارند، مستقل از هم تحول می‌یابند: "واجفتیده" هستند. به علاوه، معادله (۱۱) با معادله نوسانگر هماهنگ یک بعدی با بسامد زاویه‌ای ω_k یکی است، که می‌انجامد به

$$q_k(t) = A_k \cos(\omega_k t - \varphi_k) \quad (13)$$

در نتیجه، هر یک از جمله‌های $q_k(t)f_k(x)$ که در طرف دوم (۸) دیده می‌شود، یک موج مانا با بسامد $\omega_k/2\pi$ و نیم طول موج L/k را نمایش می‌دهد. بنابراین، هر متغیر بهنجار q_k وابسته به یک مد طبیعی ارتعاشی سیم است و عمومترین حرکت سیم برهم نهی خطی از مد طبیعی است.

یادداشت:

در مکمل ۸ ما از یک مجموعه بینهایت گسسته از نوسانگرهای هماهنگ شروع کردیم و بینهایت پیوسته‌ای از متغیرهای بهنجار را وارد کردیم. در اینجا با موقعیت مخالفی روبه‌رو هستیم: $u(x,t)$ ها مجموعه پیوسته‌ای نسبت به شاخص x تشکیل می‌دهند، در حالی که با توجه به شرایط مرزی، متغیرهای بهنجار $q_k(t)$ با یک شاخص گسسته k نمایانده شده‌اند.

(د) هامیلتونی کلاسیک

۱. انرژی جنبشی

انرژی جنبشی بخشی از سیم میان x و $x + dx$ برابر با $\frac{1}{2}\mu dx [\partial u(x, t)/\partial t]^2$ است. در نتیجه \mathcal{T} انرژی جنبشی کل سیم برابر است با

$$\mathcal{T} = \frac{\mu}{2} \int_0^L \left[\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \right]^2 dx \quad (14)$$

با به کار بردن (۸)، \mathcal{T} تنها برحسب q_k ها بیان می شود

$$\mathcal{T} = \frac{\mu}{2} \sum_k \sum_{k'} \frac{dq_k(t)}{dt} \frac{dq_{k'}(t)}{dt} \int_0^L f_k(x) f_{k'}(x) dx \quad (15)$$

که، با توجه به (۶)، به صورت زیر نیز نوشته می شود

$$\mathcal{T} = \frac{\mu}{2} \sum_k \left(\frac{dq_k}{dt} \right)^2 \quad (16)$$

۲. انرژی پتانسیل

بخشی از سیم میان طولهای x و $x + dx$ را در نظر گیریم. این بخش با محور Ox زاویه θ می سازد و به گونه ای که

$$\tan \theta = \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \quad (17)$$

بنابراین طول آن برابر است با

$$\frac{dx}{\cos \theta} = dx \left[1 + \tan^2 \theta \right]^{\frac{1}{2}} \quad (18)$$

چون انحرافها ضعیف هستند، θ خیلی کوچک است و می توان نوشت

$$\frac{dx}{\cos \theta} \simeq dx \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right)^2 \right] \quad (19)$$

از آنجا نتیجه می‌گیریم که افزایش کل طول سیم نسبت به وضع ترازمندی آن (که برای هر مقدار x با $u = 0$ متناظر است) برابر است با

$$\Delta L = \frac{1}{\gamma} \int_0^L \left(\frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right)^2 dx \quad (20)$$

اما، ΔL معرف فاصله‌ای است که در آن فاصله وزنه سیم را می‌کشد، بنابراین \mathcal{V} انرژی پتانسیل سیم نسبت به اندازه متناظر با وضع ترازمندی آن، برابر است با

$$\mathcal{V} = F \Delta L = \frac{1}{\gamma} F \int_0^L \left(\frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right)^2 dx \quad (21)$$

همچنین می‌توانیم \mathcal{V} را برحسب متغیرهای بهشجار q_k بیان کنیم. یک محاسبه ساده، با به کار بردن (۸) و (۴) می‌دهد

$$\mathcal{V} = \frac{F}{\gamma} \sum_k \frac{k^2 \pi^2}{L^2} q_k^2 \quad (22)$$

۳. گشتاورهای همیو q_k : هامیلتونی کلاسیک لاگرانژی \mathcal{L} دستگاه (پیوست ۳ را ببینید) چنین نوشته می‌شود

$$\mathcal{L} = \mathcal{T} - \mathcal{V} = \frac{\mu}{\gamma} \sum_k [\dot{q}_k^2 - \omega_k^2 q_k^2] \quad (23)$$

از آن، عبارت p_k ، گشتاور همیو q_k ، به دست می‌آید

$$p_k = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} = \mu \dot{q}_k \quad (24)$$

به گونه‌ای که سرانجام برای هامیلتونی $\mathcal{H}(q_k, p_k)$ عبارت زیر به دست می‌آید

$$\mathcal{H} = \mathcal{T} + \mathcal{V} = \sum_k \left[\frac{p_k^2}{\gamma \mu} + \frac{1}{\gamma} \mu \omega_k^2 q_k^2 \right] \quad (25)$$

یعنی

$$\mathcal{H} = \sum_k h_k \quad (26)$$

$$h_k = \frac{p_k^2}{2\mu} + \frac{1}{2} \mu \omega_k^2 q_k^2 \quad (27)$$

چون p_k و q_k همیوژاند، h_k را هامیلتونی یک نوسانگر هماهنگ یک بعدی با بسامد زاویه‌ای ω_k باز می‌شناسیم. بنابراین \mathcal{H} یک مجموع از هامیلتونیهای نوسانگرهای هماهنگ مستقل یک بعدی می‌باشد (آنها مستقل اند زیرا متغیرهای بهنجار از یکدیگر واجتیده‌اند).

بهتر است که، همچون مکملهای ۲ و ۳ همین فصل، متغیرهای بی‌بعدی را وارد کنیم

$$\hat{q}_k = \beta_k q_k \quad (28\text{-الف})$$

$$\hat{p}_k = \frac{1}{\beta_k \hbar} p_k \quad (28\text{-ب})$$

که در آن

$$\beta_k = \sqrt{\frac{\mu \omega_k}{\hbar}} \quad (29)$$

یک ثابت (با بعد) است. \mathcal{H} ، در این صورت، چنین نوشته می‌شود

$$\mathcal{H} = \sum_k \frac{1}{2} \hbar \omega_k [\hat{q}_k^2 + \hat{p}_k^2] \quad (30)$$

ها کوانتشن

۱. یادداشت اولیه:

محاسباتی که در این بخش ارائه شده‌اند البته بدین منظور نیست که آثار نوعاً کوانتومی را در حرکت یک سیم مرتعش ماکروسکوپیکی آشکار کنند. بسامدهای ارتعاشی $\omega_k/2\pi$ که می‌توانند در چنین سیمی پراکنگخته شوند چنان ضعیف هستند (ماکزیموم در حدود کیلوهرتز) و انرژیهای ابتدایی $\hbar \omega_k$ در مقابل انرژی ماکروسکوپیکی سیم آن قدر کوچک‌اند که یک توصیف کلاسیک کاملاً بسنده می‌نماید. می‌توان تصور کرد که ω_k را ممکن است هر اندازه بخواهیم بزرگ گیریم زیرا \hbar در فرمول (۱۲) از بالا کراندار نیست. در واقع، برای طول موجهای $2L/k$ به اندازه کافی ضعیف، دیگر نمی‌توان از سختی سیم چشم پوشید و معادله (۲) دیگر معتبر نیست. به علاوه، همان‌طور که در مقدمه یادآور

شدیم، سیم واقعاً یک دستگاه پیوسته نیست و بی معنی است که طول موجهایی کوچکتر از فاصله میان اتمی را در نظر بگیریم.

محاسباتی را که در اینجا عرضه خواهیم کرد باید همچون نخستین اقدام ساده‌ای برای مطالعه مسائلی که توصیف کوانتومی تابش مطرح می‌کند، در نظر گرفت. تابش خود حقیقتاً یک دستگاه پیوسته است (زیرا هیچ حد پایین طبیعی برای طول موج وجود ندارد)، که برای هر بسامد و طول موجی که با آن سروکار داریم، از معادله‌ای همانند (۲) پیروی می‌کند.^۱

۲. ویژه‌حالتها و ویژه‌مقدارهای هامیلتونی کوانتومی H
هر نوسانگر را با وابسته کردن مشاهده‌پذیرهای \hat{Q}_k و \hat{P}_k به \hat{p}_k و \hat{q}_k [فرمول (۲۸)]، به‌گونه‌ای که

$$[\hat{Q}_k, \hat{P}_k] = i \quad (۳۱)$$

کوانتومی می‌کنیم. چون متغیرهای بهنجار از یکدیگر واجفتیده‌اند، فرض می‌کنیم که عملگرهای مربوط به دو نوسانگر مختلف جابه‌جا می‌شوند. پس به‌طور عمومی داریم

$$[\hat{Q}_k, \hat{P}_{k'}] = i\delta_{kk'} \quad (۳۲)$$

فرض کنیم

$$H_k = \frac{1}{\nu} \hbar \omega_k (\hat{Q}_k^2 + \hat{P}_k^2) \quad (۳۳)$$

هامیلتونی کوانتومی نوسانگر k باشد. بنابر نتایج این فصل، ویژه‌حالتها و ویژه‌مقدارهای آن را می‌شناسیم

$$H_k |n_k\rangle = \left(n_k + \frac{1}{\nu}\right) \hbar \omega_k |n_k\rangle \quad (۳۴)$$

که در آن n_k عدد درست غیر منفی است (برای ساده کردن نمادگذارها، $|n_k\rangle$ را به جای $|\varphi_{n_k}\rangle$ می‌نویسیم).

۱. اگر واقعاً به یک "سیم مرتعش" میکروسکوپیکی علاقه‌مندیم (مثلاً ماکرومولکول خطی)، مناسبتر آن است که، مانند مکمل ۹ همین فصل، زنجیره‌ای از آنها را در نظر می‌گیریم و علاوه بر جابه‌جاییهای طولی جابه‌جاییهای عرضی (فونونهای عرضی) آنها را هم مطالعه کنیم.

چون H_k ها میان خود جابه‌جا می‌شوند، می‌توانیم ویژه‌حالت‌های H را به صورت حاصلضرب تانسوری $|n_k\rangle$ ها بگیریم

$$|n_1\rangle |n_2\rangle \cdots |n_k\rangle \cdots = |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots\rangle \quad (35)$$

حالت پایه که "تهی" نامیده می‌شود، با همه n_k های برابر با صفر، متناظر است

$$|0, 0, \dots, 0, \dots\rangle = |0\rangle \quad (36)$$

هنگامی که مبدأ انرژی را انرژی حالت $|0\rangle$ بگیریم، انرژی حالت (35) برابر است با

$$E_{n_1, n_2, \dots, n_k, \dots} = \sum_k n_k \hbar \omega_k \quad (37)$$

می‌توان حالتی چون (35) را به صورت مجموعه‌ای از n کوانتوم انرژی $\hbar \omega_1, \dots$ و n_k کوانتوم انرژی $\hbar \omega_k, \dots$ در نظر گرفت. این کوانتوم‌های ارتعاشی همانند فونون‌هایی هستند که در مکمل ۸ همین فصل مطالعه کردیم.

سرانجام می‌توان، همانند بخش ۲-۵ به کمک \hat{P}_k و \hat{Q}_k عملگرهای آفرینش و نابودی یک کوانتوم انرژی $\hbar \omega_k$ را وارد کرد

$$a_k = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q}_k + i\hat{P}_k) \quad (38)$$

a_k^\dagger همیوخ a_k است. در این صورت داریم

$$[a_k, a_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'} \quad (39)$$

و

$$\begin{cases} a_k |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots\rangle = \sqrt{n_k} |n_1, n_2, \dots, n_k - 1, \dots\rangle \\ a_k^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots\rangle = \sqrt{n_k + 1} |n_1, n_2, \dots, n_k + 1, \dots\rangle \end{cases} \quad (40)$$

همه حالت‌های (۳۵) را می‌توان برحسب حالت $|0\rangle$ بیان کرد

$$|n_1, n_2, \dots, n_k, \dots\rangle = \frac{(a_1^\dagger)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} \frac{(a_2^\dagger)^{n_2}}{\sqrt{n_2!}} \dots \frac{(a_k^\dagger)^{n_k}}{\sqrt{n_k!}} \dots |0\rangle \quad (41)$$

۳. حالت کوانتومی دستگاه

عمومیت‌ترین حالت کوانتومی دستگاه، ترکیبی خطی از حالت‌های $|n_1, n_2, \dots, n_k, \dots\rangle$ است

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n_1, n_2, \dots, n_k, \dots} c_{n_1, n_2, \dots, n_k, \dots}(t) |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots\rangle \quad (42)$$

معادله تحول $|\psi(t)\rangle$ ، معادله شرودینگر است

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi(t) = H |\psi(t)\rangle \quad (43)$$

با به کار بردن (۳۷) و (۴۳) به آسانی خواهیم یافت

$$c_{n_1, n_2, \dots, n_k, \dots}(t) = c_{n_1, n_2, \dots, n_k, \dots}(0) e^{-i \sum_k n_k \omega_k t} \quad (44)$$

۴. مشاهده‌پذیر وابسته به متغیرهای دینامیکی $u(x, t)$

هنگامی که دستگاه را کوانتومی می‌کنیم، $u(x, t)$ یک مشاهده‌پذیر $U(x)$ می‌شود که به زمان وابسته نیست،^۱ و با جانشین کردن $q_k(t)$ با مشاهده‌پذیر Q_k در (Λ) خواهیم یافت

$$\begin{aligned} U(x) &= \sum_k f_k(x) Q_k \\ &= \sum_k \frac{1}{\beta_k \sqrt{V}} f_k(x) [a_k + a_k^\dagger] \end{aligned} \quad (45)$$

بدین ترتیب دیده می‌شود که برای هر اندازه‌ای از x می‌توان یک مشاهده‌پذیر جابه‌جایی $U(x)$ تعریف کرد که به‌طور خطی به عملگرهای نابودی و آفرینش a_k و a_k^\dagger وابسته است.

۱. یادآور شدیم که در مکانیک کوانتومی، وابستگی زمانی در حالت عمومی در بردار حالت منظور می‌شود و نه مشاهده‌پذیرها (رجوع کنید به بحث بخش D-۱-d فصل سوم).

جالب است که $\langle \psi(t) | U(x) | \psi(t) \rangle$ ، اندازه میانگین $U(x)$ ، را با کمیت کلاسیک $w(x, t)$ مقایسه کنیم. چون بنا بر (۴۰)، a_k و a_k^\dagger تنها حالت‌هایی را می‌توانند به هم مربوط کنند که اختلاف انرژی آنها $\pm \hbar \omega_k$ باشد، از (۴۵) نتیجه می‌گیریم که تنها بسامدهای بوری که می‌توانند در تحول $\langle U(x) \rangle(t)$ پدید آیند عبارت‌اند از بسامدهای $\omega_1/2\pi, \omega_2/2\pi, \dots, \omega_k/2\pi, \dots$ به ترتیب به تابعهای فضایی $f_1(x), f_2(x), \dots, f_k(x), \dots$ وابسته‌اند. بدین ترتیب برای $\langle U(x) \rangle(t)$ یک ترکیب خطی از موجهای مانایی به دست می‌آوریم که می‌توانند در سیم وجود داشته باشند. وانگهی، این همانندی می‌تواند فراتر رود. مشتق $\frac{\partial}{\partial t} \langle U(x) \rangle(t)$ را حساب کنیم. با به کار بستن این واقعیت [مکمل ۶ همین فصل، معادله (۱۷)] که

$$\frac{d}{dt} \langle a_k \rangle = -i\omega_k \langle a_k \rangle \quad (46)$$

و رابطه‌های (۷) و (۱۲) به آسانی در می‌یابیم که اندازه میانگین $U(x)$ که با (۴۵) داده شده از معادله دیفرانسیل

$$\left(\frac{1}{v^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \langle U(x) \rangle(t) = 0 \quad (47)$$

پیروی می‌کند که با (۲) یکی است.

سرانجام یادآوری می‌کنیم که چون Q_k با H_k جابه‌جا نمی‌شود، $U(x)$ با H جابه‌جا نمی‌شود. بنابراین جابه‌جایی و انرژی کل در مکانیک کوانتومی کمیت‌های فیزیکی ناسازگاری هستند.

۳. مدهای ارتعاشی تابش: فوتونها

الف) نمادگذاریها. معادله‌های حرکت

حالت کلاسیک میدان الکترومغناطیسی در لحظه t هنگامی مشخص می‌شود که اندازه‌های مؤلفه‌های میدانهای الکتریکی E و مغناطیسی B را در آن لحظه در هر نقطه r از فضا بشناسیم. بنابراین، همانند بخش ۲ در بالا، دارای بینهایت پیوسته‌ای از متغیرهای دینامیکی: شش مؤلفه E_x, E_y, E_z و B_x, B_y, B_z در هر نقطه r هستیم.

به منظور تأکید بر ایده مهم متغیرهای پنج‌جاری (یا مدهای طبیعی) یک میدان، تسهیلاتی در نظر می‌گیریم که عبارت است از نادیده انگاشتن ماهیت برداری میدانهای E و B : در مورد یک میدان

اسکالر $\mathcal{L}(r, t)$ استدلال خواهیم کرد که (مانند هریک از مؤلفه‌های \mathbf{E} و \mathbf{B}) از معادله

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right) \mathcal{L}(r, t) = 0 \quad (28)$$

پیروی می‌کند که در آن c سرعت نور است.

فرض می‌کنیم که میدان در یک حفره متوازی‌السطوحی محصور است که دیواره‌های داخلی آن کاملاً رسانا و یالهای موازی با Ox, Oy, Oz به ترتیب دارای طولهای L_1, L_2, L_3 باشند. به عنوان شرایط مرزی، می‌خواهیم که $\mathcal{L}(r, t)$ در روی دیواره‌های حفره صفر شود (در مسئله حقیقی، برای مثال مؤلفه‌های مماسی میدان الکتریک \mathbf{E} هستند که باید روی دیواره‌ها صفر شوند). پس می‌توان نوشت

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(x=0, y, z, t) &= \mathcal{L}(x=L_1, y, z, t) = \mathcal{L}(x, y=0, z, t) = \dots \\ &= \mathcal{L}(x, y, z=L_2, t) = 0 \end{aligned} \quad (49)$$

ب) وارد کردن متغیرهای بهنجار

مجموعه تابعهایی از x, y, z به صورت

$$f_{klm}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{L_1 L_2 L_3}} \sin\left(\frac{k\pi x}{L_1}\right) \sin\left(\frac{l\pi y}{L_2}\right) \sin\left(\frac{m\pi z}{L_3}\right) \quad (50)$$

که در آن m, l, k عددهای درست مثبتی هستند ($k, l, m = 1, 2, 3, \dots$). تابعهای f_{klm} بر روی دیواره‌های حفره صفر می‌شوند و بنابراین از همان شرایط مرزی $\mathcal{L}(x, y, z, t)$ پیروی می‌کنند

$$f_{klm}(x=0, y, z) = f_{klm}(x=L_1, y, z) = \dots = f_{klm}(x, y, z=L_2) = 0 \quad (51)$$

به علاوه، به آسانی می‌توان تحقیق کرد که

$$\int_0^{L_1} dx \int_0^{L_2} dy \int_0^{L_3} dz f_{klm}(x, y, z) f_{k'l'm'}(x, y, z) = \delta_{kk'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (52)$$

و

$$\left[\Delta + \left(\frac{k^2}{L_1^2} + \frac{l^2}{L_2^2} + \frac{m^2}{L_3^2} \right) \pi^2 \right] f_{klm}(x, y, z) = 0 \quad (52)$$

هر تابعی که روی دیواره‌ها صفر شود، به‌ویژه $\mathcal{L}(r, t)$ را می‌توان به یک صورت و تنها به یک صورت برحسب $f_{klm}(x, y, z)$ بسط داد. بنابراین داریم

$$\mathcal{L}(x, y, z, t) = \sum_{k,l,m} q_{klm}(t) f_{klm}(x, y, z) \quad (54)$$

فرمول (54) به‌آسانی با توجه به (52)، معکوس می‌شود

$$q_{klm}(t) = \int_0^{L_1} dx \int_0^{L_2} dy \int_0^{L_3} dz f_{klm}(x, y, z) \mathcal{L}(x, y, z, t) \quad (55)$$

بدین ترتیب می‌بینیم که حالت میدان در لحظه t هم با مجموعه متغیرهای $q_{klm}(t)$ و هم با مجموعه متغیرهای $\mathcal{L}(x, y, z, t)$ مشخص می‌شود.

فرمولهای (54) و (55) امکان می‌دهند تا از یک مجموعه به مجموعه دیگر برویم. با بردن (54) در (48) و به‌کار بستن (53)، بعد از محاسبه ساده‌ای، خواهیم یافت

$$\left[\frac{d^2}{dt^2} + \omega_{klm}^2 \right] q_{klm}(t) = 0 \quad (56)$$

که در آن

$$\omega_{klm}^2 = c^2 \pi^2 \left[\frac{k^2}{L_1^2} + \frac{l^2}{L_2^2} + \frac{m^2}{L_3^2} \right] \quad (57)$$

بنابراین متغیرهای به‌نجار $q_{klm}(t)$ واجفتیده از یکدیگرند. بنابر (56)، $q_{klm}(t)$ مانند مجموع (54) یک موج مانا (یا یک مد طبیعی ارتعاشی میدان در حفره) نمایش می‌دهد که با بسامد $\omega_{klm}/2\pi$ و وابستگی فضایی‌اش در سه راستای Ox, Oy, Oz (به‌ترتیب نیم‌طول‌موجهای $L_3/m, L_2/l, L_1/k$) مشخص می‌شود.

بدینسان توانستیم بی هیچ دشواری نتایج بخش ۲-ج پیشین را تعمیم دهیم. با این همه، باید توجه کرد، هنگامی که ویژگی برداری میدان الکترومغناطیسی را منظور می‌کنیم، ساختار مدها پیچیده‌تر خواهد شد. با این همه، ایده عمومی یکی است و به نتایج همانندی می‌رسیم.

ج) هامیلتونی کلاسیک

بر پایه تشابه بسیار نزدیکی که میان نتایج بخشهای ۲-ج و ۳-ب پیشین وجود دارد، بدون اثبات می‌پذیریم که می‌توان به میدان $\mathcal{L}(x, t)$ یک لاگرانژی \mathcal{L} نسبت داد، که از آن، می‌توانیم معادله حرکت (۴۸)، گشتاورهای همیوگ $p_{klm}(t)$ متغیرهای بهنجار و سرانجام عبارت هامیلتونی \mathcal{H} دستگاه را نتیجه بگیریم. تنها نکته‌ای که در اینجا برای ما مهم است، آن است که این هامیلتونی مشابه با (۳۰) است

$$\mathcal{H} = \sum_{k,l,m} \frac{1}{2} \hbar \omega_{klm} [(\hat{q}_{klm})^2 + (\hat{p}_{klm})^2] \quad (58)$$

که در آن \hat{q}_{klm} و \hat{p}_{klm} متغیرهای بی‌بعد متناسب با q_{klm} و p_{klm} هستند

$$\hat{q}_{klm} = \beta_{klm} q_{klm} \quad \hat{p}_{klm} = \frac{1}{\hbar \beta_{klm}} p_{klm} \quad (59)$$

β_{klm} یک ثابت با بعد مشابه با ثابتی است که در (۲۹) وارد کردیم.

یادداشتها:

۱. معادله تحول هر یک از متغیرهای بهنجار q_{klm} [که در (۵۶) تشکیل دادیم]، با معادله نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی با بسامد زاویه‌ای ω_{klm} مشابه است. بنابراین می‌بینیم که \mathcal{H} به صورت یک مجموع از هامیلتونیهای نوسانگرهای هماهنگ مستقل یک‌بعدی به دست می‌آید. وانگهی (۵۶) را می‌توان از (۵۸) به دست آورد. معادله‌های هامیلتون-ژاکوبی (پیوست ۳ را ببینید) با توجه به (۵۹)، نوشته می‌شوند

$$\begin{cases} \frac{d\hat{q}_{klm}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \hat{p}_{klm}} \\ \frac{d\hat{p}_{klm}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \hat{q}_{klm}} \end{cases} \quad (60)$$

یعنی، با شکل (۵۸) هامیلتونی \mathcal{H} می‌شود

$$\begin{cases} \frac{d\hat{q}_{klm}}{dt} = \omega_{klm} \hat{p}_{klm} & (61\text{-الف}) \\ \frac{d\hat{p}_{klm}}{dt} = -\omega_{klm} \hat{q}_{klm} & (61\text{-ب}) \end{cases}$$

با حذف \hat{P}_{klm} میان این دو معادله، (۵۶) را باز می‌یابیم.

۲. برای میدان الکترومغناطیسی واقعی، متشکل از دو میدان \mathbf{E} و \mathbf{B} نیز، بی‌آنکه نیاز باشد لاگرانژی را به‌کار ببریم. مستقیماً می‌توان عبارت (۵۸) را برای \mathcal{H} برقرار کرد. تنها می‌نویسیم که انرژی کل \mathcal{H} مجموع انرژی‌های الکتریکی و مغناطیسی محصور در حفره است

$$\mathcal{H} = \frac{\epsilon_0}{4} \int_0^{L_1} dx \int_0^{L_2} dy \int_0^{L_3} dz [\mathbf{E}^2 + c^2 \mathbf{B}^2] \quad (62)$$

و برای \mathbf{E} و \mathbf{B} بسط‌های مشابه با (۵۴) را به‌کار می‌بریم. بدین ترتیب به این نتیجه می‌رسیم که جمله‌های برحسب \hat{P}_{klm} و \hat{Q}_{klm} در (۵۸)، به ترتیب با انرژی الکتریکی و مغناطیسی متناظرند. ■

(د) کوانتشن

اکنون می‌توانیم، با شروع از معادله (۵۸)، همان عملیاتی را انجام دهیم که در بخش ۲-۵ انجام شد.

۱. ویژه‌حالتها و ویژه‌مقدارهای H

به \hat{P}_{klm} و \hat{Q}_{klm} دو مشاهده‌پذیر \hat{P}_{klm} و \hat{Q}_{klm} که جابه‌جاگر آنها \hat{H} است وابسته می‌کنیم. چون مشاهده‌پذیرهای مربوط به دو مد متفاوت جابه‌جا می‌شوند به‌طور کلی داریم

$$[\hat{Q}_{klm}, \hat{P}_{k'l'm'}] = i\delta_{kk'}\delta_{ll'}\delta_{mm'} \quad (63)$$

H_{klm} را هامیلتونی وابسته به مد (klm) بگیریم

$$H_{klm} = \frac{\hbar\omega_{klm}}{4} [(\hat{Q}_{klm})^2 + (\hat{P}_{klm})^2] \quad (64)$$

ویژه‌حالتها و ویژه‌مقدارهای آن را می‌شناسیم

$$H_{klm} |n_{klm}\rangle = \left(n_{klm} + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_{klm} |n_{klm}\rangle \quad (65)$$

که در آن n_{klm} یک عدد درست غیرمنفی است

چون H_{klm} ها میان خود جابه‌جا می‌شوند می‌توانیم ویژه‌حالت‌های $H = \sum_{klm} H_{klm}$ را به صورت حاصلضرب تانسوری $|n_{klm}\rangle$ ها، یعنی

$$|n_{111}, n_{211}, n_{112}, n_{122}, \dots, n_{klm}, \dots\rangle \quad (66)$$

در نظر بگیریم. حالت پایه که "تهی" نام دارد، با همه n_{klm} های برابر با صفر متناظر است

$$|0, 0, 0, 0, \dots, 0, \dots\rangle = |0\rangle \quad (۶۷)$$

هنگامی که انرژی حالت تهی را مبدأ می‌گیریم. انرژی حالت (۶۶) برابر است با

$$E_{n_{111}, \dots, n_{klm}, \dots} = \sum_{klm} n_{klm} \hbar \omega_{klm} \quad (۶۸)$$

می‌توان در نظر گرفت که حالتی چون (۶۶)، مجموعه‌ای از n_{111} کوانتوم انرژی $\hbar \omega_{111}$... n_{klm} کوانتوم انرژی $\hbar \omega_{klm}$... را نمایش می‌دهد. این کوانتومها چیزی جز فوتون نیستند. بنابراین می‌بینیم که نوع معینی از فوتون به هر مد طبیعی کاواک وابسته است.

می‌توان، مشابه با (۳۸) عملگرهای نابودی و آفرینش فوتون از نوع (klm) را وارد کرد

$$\begin{cases} a_{klm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q}_{klm} + i\hat{P}_{klm}) \\ a_{klm}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q}_{klm} - i\hat{P}_{klm}) \end{cases} \quad (۶۹)$$

و فرمولهایی همانند با (۳۰)، (۴۰)، و (۴۱) به دست آورد

$$[a_{klm}, a_{k'l'm'}^\dagger] = \delta_{kk'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (۷۰)$$

$$\begin{cases} a_{klm} |n_{111}, \dots, n_{klm}, \dots\rangle = \sqrt{n_{klm}} |n_{111}, \dots, n_{klm} - 1, \dots\rangle \\ a_{klm}^\dagger |n_{111}, \dots, n_{klm}, \dots\rangle = \sqrt{n_{klm} + 1} |n_{111}, \dots, n_{klm} + 1, \dots\rangle \end{cases} \quad (۷۱)$$

$$|n_{111}, \dots, n_{klm}, \dots\rangle = \frac{(a_{111}^\dagger)^{n_{111}}}{\sqrt{n_{111}!}} \dots \frac{(a_{klm}^\dagger)^{n_{klm}}}{\sqrt{n_{klm}!}} \dots |0\rangle \quad (۷۲)$$

۲. حالت کوانتومی میدان

عمومترین حالت میدان، ترکیبی خطی از حالت‌های (۶۶) است

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n_{111}, \dots, n_{klm}, \dots} c_{n_{111}, \dots, n_{klm}, \dots}(t) |n_{111}, \dots, n_{klm}, \dots\rangle \quad (۷۳)$$

معادله شرودینگر

$$i\hbar \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle = H | \psi(t) \rangle \quad (۷۴)$$

امکان می‌دهد تا ضریبهای $c_{n_{111}, \dots, n_{klm}, \dots}(t)$ را به صورت زیر به دست آوریم

$$c_{n_{111}, \dots, n_{klm}, \dots}(t) = c_{n_{111}, \dots, n_{klm}, \dots}(0) e^{-i \sum_{klm} n_{klm} \omega_{klm} t} \quad (۷۵)$$

۳. عملگر میدان

هنگام کوانتس میدان $\mathcal{L}(r, t)$ یک مشاهده پذیر $S(r)$ می‌شود که دیگر به t وابسته نیست، و با جایگزین کردن Q_{klm} به جای q_{klm} در (۵۴) به دست می‌آید

$$S(r) = \sum_{klm} \frac{1}{\beta_{klm}} f_{klm}(r) \hat{Q}_{klm} \quad (۷۶)$$

همچنین، با توجه به (۶۹)، می‌توان $S(r)$ را برحسب عملگرهای آفرینش و نابودی بیان کرد

$$S(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{klm} \frac{1}{\beta_{klm}} f_{klm}(r) [a_{klm} + a_{klm}^\dagger] \quad (۷۷)$$

استدلال مشابهی یا آنچه که در بخش ۲-۵-۴ شد، امکان می‌دهد تا به کمک فرمولهای (۷۱) و (۷۵) نشان دهیم که بسامدهای بوری که می‌توانند در جریان تحول زمانی اندازه میانگین میدان

$$\langle S(r) \rangle(t) = \langle \psi(t) | S(r) | \psi(t) \rangle$$

پدید می‌آیند، عبارت‌اند از بسامدهای $\omega_{111}/2\pi, \omega_{211}/2\pi, \dots, \omega_{klm}/2\pi, \dots$ که به ترتیب به تابعهای فضایی $f_{111}(r), f_{211}(r), \dots, f_{klm}(r), \dots$ وابسته‌اند. بدین ترتیب برای $\langle S(r) \rangle(t)$ یک ترکیب خطی از موجهای مانای کلاسیک باز می‌یابیم که می‌توانند در حفره وجود داشته باشند. یک محاسبه مشابه با محاسبه انجام شده در بخش ۲-۵-۴ امکان می‌دهد تا نشان دهیم که $\langle S(r) \rangle$ از معادله (۴۸) پیروی می‌کند.

سرانجام، دیده می‌شود که $S(r)$ و H جابه‌جا نمی‌شوند. بنابراین در نظریه کوانتومی امکانپذیر نیست که تعداد فوتونها و اندازه میدان الکترومغناطیسی را هم‌زمان در یک نقطه از فضا با قطعیت شناخت.

یادداشت:

برای میدان الکترومغناطیسی، مشابه با آنچه در مکمل ۶ همین فصل گفتیم، می‌توان حالت‌های همدوسی تشکیل داد، که بهترین سازش میان کمیت‌های ناسازگار میدان و انرژی را تحقق می‌بخشند.

۴. افت‌وخیز تهی

در بخش ۵-۴-۱ از فصل ۵ دیدیم که، در حالت پایه نوسانگر هماهنگ، $\langle X \rangle$ صفر است، در حالی که $\langle X^2 \rangle$ چنین نیست و معنای فیزیکی این اثر نوعاً کوانتومی را بحث کردیم.

در مسئله‌ای که در اینجا مطالعه می‌کنیم، $S(\mathbf{r})$ شباه بسیاری با عملگر X همین فصل نشان می‌دهد: در واقع از (۷۷) پیداست که $S(\mathbf{r})$ ترکیبی خطی از عامل‌های آفرینش و نابودی است. اندازه میانگین $S(\mathbf{r})$ را در حالت پایه $|\circ\rangle$ میدان، یعنی حالت "تهی" فوتون در نظر می‌گیریم. چون عنصرهای قطری a و a^\dagger بنا بر (۷۱) صفرند نتیجه می‌گیریم که

$$\langle \circ | S(\mathbf{r}) | \circ \rangle = 0 \quad (78)$$

برعکس، عنصر ماتریس $[S(\mathbf{r})^2]$ صفر نیست. در واقع، بنا بر (۷۱)

$$\begin{cases} a_{klm} | \circ \rangle = 0 \\ \langle \circ | a_{k'l'm'}^\dagger = 0 \\ \langle \circ | a_{k'l'm'} a_{klm}^\dagger | \circ \rangle = \delta_{kk'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \end{cases} \quad (79)$$

به‌گونه‌ای که محاسبه‌ای ساده امکان می‌دهد تا از (۷۷) به‌دست آوریم

$$\langle \circ | [S(\mathbf{r})]^2 | \circ \rangle = \frac{1}{4} \sum_{klm} \frac{1}{\beta_{klm}^2} [f_{klm}(\mathbf{r})]^2 \quad (80)$$

از آن نتیجه می‌گیریم که در تهی یعنی در غیاب فوتون، میدان الکترومغناطیسی $S(\mathbf{r})$ در هر نقطه از فضا دارای اندازه میانگین صفر ولی انحراف ریشه مربعی میانگین غیرصفر است. این بدان معنی است که اگر یک اندازه‌گیری از $S(\mathbf{r})$ انجام دهیم ممکن است نتیجه غیرصفری به‌دست آورد (که البته از یک اندازه‌گیری به دیگری تغییر می‌کند)، حتی اگر هیچ فوتونی وجود نداشته باشد. این اثر دارای هیچ هم‌ارزی در نظریه کلاسیک نیست، که در آن هنگامی که انرژی صفر است، میدان نیز دقیقاً صفر است. این نتیجه را اغلب چنین بیان می‌کنند: "تهی" فوتونها جایگاهی از افت‌وخیز میدان است که با (۷۸) و (۸۰) مشخص می‌شود و افت‌وخیز تهی نام دارد.

وجود این افت‌وخیزها برای برهم‌کنش میان یک دستگاه اتمی و میدان الکترومغناطیسی دارای نتایج فیزیکی جالبی است. برای مثال اتمی را در حالت $|E\rangle$ با انرژی E در نظر بگیریم که تحت تابش

یک موج الکترومغناطیسی در بررسی کلاسیک، قرار گرفته است. ما در مکمل ۱ فصل ۱۳ با بهکار بستن نظریهٔ اغتشاش وابسته به زمان (فصل ۱۳ را ببینید) خواهیم دید که، تحت تأثیر چنین برانگیختگی، اتم می‌تواند به حالتی با انرژی بالاتر (جذب) یا با انرژی پایینتر (گسیل القایی) برود. برعکس، در چارچوب این نظریهٔ نیمه کلاسیک اگر هیچ میدانی در فضا موجود نباشد اتم باید به‌طور نامحدود در حالت $(E |$ باقی بماند. در واقع، هم‌اکنون نشان دادیم که در غیاب هر فوتون فرودی، اتم "افت‌وخیز خلا" را که به ماهیت کوانتومی میدان الکترومغناطیسی مربوط است "می‌بیند". تحت تأثیر این افت‌وخیزها، اتم می‌تواند یک فوتون گسیل داشته و به حالتی با انرژی کمتر برود (زیرا انرژی دستگاه کلی در طول فرایند ثابت است): این پدیده گسیل خودبه‌خودی است که می‌توان بدین‌ترتیب آن را همچون "گسیل القا شده به وسیلهٔ افت‌وخیز تهی" در نظر گرفت (هیچ جذب خودبه‌خودی نیست که اتم را به حالتی با انرژی بالاتر ببرد، زیرا نمی‌توان هیچ انرژی الکترومغناطیسی از میدانی که در حالت پایه قرار دارد گرفت).

همچنین می‌توان اثر دیگری از "افت‌وخیز تهی" را نشان داد که الکترون اتم را به حرکت سرگردانی وامی‌دارد و انرژی تراز را اندکی تغییر می‌دهد. مشاهدهٔ این اثر در طیف اتم هیدروژن (جابه‌جایی لمب یا تغییر مکان لمب) نقطهٔ حرکت گسترش الکترودینامیک کوانتومی نوین را تشکیل می‌دهد.

یادداشت:

ما در بحثهای پیشین، همیشه انرژی حالت تهی را به‌عنوان مبدأ انرژی حالتهای میدان بر می‌گزیدیم. در واقع نظریهٔ نوسانگرهای هماهنگ، اندازهٔ مطلق انرژی خلا را به‌صورت زیر به‌دست می‌دهد

$$E_0 = \sum_{klm} \frac{1}{4} \hbar \omega_{klm} \quad (A1)$$

البته ارتباط نزدیکی میان E_0 و انرژی الکتریکی و مغناطیسی وابسته به "افت‌وخیز تهی" وجود دارد. یکی از دشواریهای الکترودینامیک کوانتومی، که ما در اینجا نظری اجمالی بدان افکنیم، این است که مجموع (A1) و همچنین (A^0) ، واقعاً بینهایت است. با این‌وصف می‌توان به این شکل فائق آمد: با روش معروف به "بازبهنجارش" توانسته‌اند کمیتهای بینهایت را کنار بگذارند و اثری فیزیکی عملاً مشاهده‌پذیر، همچون "جابه‌جایی لمب" را با دقت چشمگیری محاسبه کنند. روشن است که بررسی این مسائل وسیع خارج از حوصلهٔ بحث ماست.

مراجع برای مطالعهٔ بیشتر

مدهای ریسمان پیوسته در مکانیک کلاسیک:

کوانتش میدان الکترومغناطیسی:

Mandl (2.9); Schiff (1.18), chap. 14; Messiah (1.17), chap. XXI; Bjorken and Drell (2.10), chap. 11; Power (2.11); Heitler (2.13).

جابه‌جایی لَمب:

Lamb and Retherford (3.11); Frisch (3.13); Kuhn (11.1), chap. III, §A 5e; Series (11.7), chaps. VIII, IX and X.

نوسانگر هماهنگ یک بعدی در ترازمندی ترمودینامیکی در دمای T

۱. انرژی میانگین

الف) تابع افراز

ب) محاسبه $\langle H \rangle$

۲. بحث فیزیکی

الف) مقایسه با نوسانگر کلاسیک

ب) مقایسه با یک دستگاه دوترازه

۳. کاربردها

الف) تابش جسم سیاه

ب) قانون توزیع بوز-اینشتین

ج) گرمای ویژه جامدها در حجم ثابت

۴. توزیع احتمال مشاهده پذیر X

الف) تعریف چگالی احتمال $\rho(x)$

ب) محاسبه $\rho(x)$

ج) بحث فیزیکی

د) قضیه بلوخ

این مکمل به بررسی خواص فیزیکی یک نوسانگر هماهنگ یک بعدی که در ترازمندی ترمودینامیکی با یک مخزن در دمای T است، اختصاص داده شده است. می‌دانیم (مکمل EIII فصل سوم را ببینید) که چنین نوسانگری در یک حالت خالص نیست (غیر ممکن است آن را با یک کت ψ بیان کرد). اطلاعات ناقصی که راجع به این دستگاه در دست داریم و نتایج مکانیک آماری امکان می‌دهند تا آن را با یک آمیزه آماری از حالت‌های مانای (φ_n) با وزنه‌های متناسب با $e^{-E_n/kT}$ مشخص کنیم (k ثابت بولتزمن؛ E_n انرژی در حالت (φ_n)). در مکمل EIII (بخش ۵-۵) دیدیم که عملگر چگالی متناظر، در این صورت، نوشته می‌شود

$$\rho = Z^{-1} e^{-H/kT} \quad (1)$$

که در آن H عملگر هامیلتونی است و

$$Z = \text{Tr } e^{-H/kT} \quad (۲)$$

یک ضریب بهنجارش است و ما را مطمئن می سازد که

$$\text{Tr } \rho = ۱ \quad (۳)$$

(Z تابع افزار است).

اکنون اندازه میانگین $\langle H \rangle$ انرژی نوسانگر را محاسبه، و نتایج به دست آمده را به طور فیزیکی تعبیر می کنیم و نشان می دهیم که در مسائل گوناگون فیزیک وارد می شود (تابش جسم سیاه، گرمای ویژه جامدها ...). سرانجام، عبارت چگالی احتمال مربوط به عملگر X (موضع ذره) را تشکیل داده و درباره آن بحث می کنیم.

۱. انرژی میانگین

الف) تابع افراز

انرژیهای E_n حالت های $|\varphi_n\rangle$ ، بنابر نتایج بخش ۲-۵ همین فصل، برابر با $(n + 1/2)\hbar\omega$ است. چون ترازهای انرژی واکن نیستند، بنابر (۲) داریم

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{n=0}^{\infty} \langle \varphi_n | e^{-H/kT} | \varphi_n \rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-(n+1/2)\hbar\omega/kT} \\ &= e^{-\hbar\omega/2kT} [1 + e^{-\hbar\omega/kT} + e^{-2\hbar\omega/kT} + \dots] \end{aligned} \quad (۴)$$

می بینیم که داخل کروشه (۴) یک تصاعد هندسی با قدر نسبت $e^{-\hbar\omega/kT}$ است. پس

$$Z = \frac{e^{-\hbar\omega/2kT}}{1 - e^{-\hbar\omega/kT}} \quad (۵)$$

(ب) محاسبه $\langle H \rangle$

بنابر فرمول (۳۱) از مکمل EIII عبارت (۱) برای ρ

$$\langle H \rangle = \text{Tr}(H\rho) = Z^{-1} \text{Tr}(H e^{-H/kT}) \quad (۶)$$

با نوشتن صریح رد در پایه $\{|\varphi_n\rangle\}$ ، به دست می‌آید

$$\langle H \rangle = Z^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} (n + 1/2) \hbar\omega e^{-(n+1/2)\hbar\omega/kT} \quad (۷)$$

برای محاسبه این کمیت، از دو طرف (۴) نسبت به T مشتق می‌گیریم

$$\frac{dZ}{dT} = \frac{1}{kT^2} \sum_{n=0}^{\infty} (n + 1/2) \hbar\omega e^{-(n+1/2)\hbar\omega/kT} \quad (۸)$$

می‌بینیم که

$$\langle H \rangle = kT^2 \frac{1}{Z} \frac{dZ}{dT} \quad (۹)$$

بدین ترتیب محاسبه ساده‌ای از (۵) می‌دهد

$$\boxed{\langle H \rangle = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}} \quad (۱۰)$$

یادداشتها:

۱. نوسانگر سه‌بعدی همسانگرد

با به‌کار بستن نتایج و نمادگذاریهای مکمل ۵ همین فصل، می‌توان نوشت

$$\langle H \rangle = \langle H_x \rangle + \langle H_y \rangle + \langle H_z \rangle \quad (۱۱)$$

که در آن $\langle H_x \rangle$ چنین داده می‌شود

$$\begin{aligned} \langle H_x \rangle &= Z^{-1} \text{Tr}(H_x e^{-H/kT}) \\ &= \frac{\sum_{n_x=0}^{\infty} \sum_{n_y=0}^{\infty} \sum_{n_z=0}^{\infty} (n_x + 1/2) \hbar\omega e^{-[(n_x+1/2)+(n_y+1/2)+(n_z+1/2)]\hbar\omega/kT}}{\sum_{n_x=0}^{\infty} \sum_{n_y=0}^{\infty} \sum_{n_z=0}^{\infty} e^{-[(n_x+1/2)+(n_y+1/2)+(n_z+1/2)]\hbar\omega/kT}} \quad (۱۲) \end{aligned}$$

جمع بندی روی n_y و n_z را می توان جدا در نظر گرفت و از صورت و مخرج حذف کرد، به گونه ای که

$$\langle H_x \rangle = \frac{\sum_{n_x=0}^{\infty} (n_x + 1/2) \hbar \omega e^{-(n_x+1/2)\hbar\omega/kT}}{\sum_{n_x=0}^{\infty} e^{-(n_x+1/2)\hbar\omega/kT}} \quad (13)$$

سوا از جایگزینی n با n_x عبارت یکسانی با آنچه که در بخش پیش محاسبه شد، به دست آمده است. بنابراین $\langle H \rangle$ برابر اندازه ای است که در (۱۰) داده شده است. به آسانی نشان داده می شود که برای $\langle H_y \rangle$ و $\langle H_z \rangle$ نیز چنین است. بنابراین، به نتیجه زیر رسیده ایم: در ترازمندی ترمودینامیکی، انرژی میانگین یک نوسانگر سه بعدی همسانگرد سه برابر کمیت متناظر در نوسانگر یک بعدی با همان بسامد زاویه ای است.

۲. نوسانگر کلاسیک

انرژی $\mathcal{H}(x, p)$ یک نوسانگر کلاسیک یک بعدی برابر است با

$$\mathcal{H}(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (14)$$

در عبارت (۱۴)، x و p می توانند هر مقدار میان $-\infty$ و $+\infty$ را بپذیرند. بنابر نتایج مکانیک آماری کلاسیک انرژی میانگین این نوسانگر کلاسیک می شود

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{H}(x, p) e^{-\mathcal{H}(x, p)/kT} dx dp}{\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\mathcal{H}(x, p)/kT} dx dp} \quad (15)$$

اگر (۱۴) را در (۱۵) ببریم پس از محاسبه ساده ای به دست می آوریم

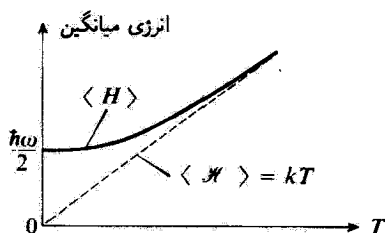
$$\langle \mathcal{H} \rangle = kT \quad (16)$$

استدلال مشابهی با آنچه در قسمت ۱ همین یادداشت داده شد، نشان می دهد که نتیجه (۱۶) را به هنگام رفتن از یک بعد به سه بعد، باید در ۳ ضرب کرد. ■

۲. بحث فیزیکی

الف) مقایسه با نوسانگر کلاسیک

در شکل ۱، انرژی میانگین $\langle H \rangle$ نوسانگر کوانتومی یک بعدی را بر حسب T با منحنی خط پرو انرژی میانگین $\langle \mathcal{H} \rangle$ نوسانگر کلاسیک را با منحنی خط چین نشان داده ایم.



شکل ۱ تغییرات انرژی میانگین نوسانگر کوانتومی برحسب دما (منحنی خطیر) در مقایسه با تغییرات انرژی میانگین نوسانگر کلاسیک (خط راست خطچین).

برای $T = 0$ داریم $\langle H \rangle = \hbar\omega/2$. این نتیجه متناظر با این واقعیت است که در صفر مطلق مطمئن هستیم که نوسانگر در حالت پایه (φ_0) با انرژی $\hbar\omega/2$ است (بدین سبب گاهی $\hbar\omega/2$ "انرژی نقطه صفر" نامیده می‌شود). اما نوسانگر کلاسیک، در موضع ترازمندی پایدار خود $(x = 0)$ بی حرکت $(p = 0)$ و دارای انرژی صفر است: $\langle \mathcal{H} \rangle = 0$.

تا هنگامی که T ضعیف است، به عبارت دقیقتر تا هنگامی که $kT \ll \hbar\omega$ است، تنها جمعیت تراز پایه قابل ملاحظه است و $\langle H \rangle$ عملاً برابر با $\hbar\omega/2$ می‌ماند: در این ناحیه، منحنی خطیر در شکل ۱ دارای مماس افقی است. می‌توان این واقعیت را از عبارت (۱۰) دریافت که، برای T کم نوشته می‌شود

$$\langle H \rangle \simeq \frac{\hbar\omega}{2} + \hbar\omega e^{-\hbar\omega/kT} \quad (17)$$

برعکس، برای T زیاد، یعنی برای $kT \gg \hbar\omega$ ، همین فرمول را می‌دهد

$$\langle H \rangle = \frac{\hbar\omega}{2} + kT \left(1 - \frac{1}{2} \frac{\hbar\omega}{kT} + \dots \right) \quad (18)$$

یعنی، با تقریب بینهایت کوچک $kT(\hbar\omega/kT)^2$

$$\langle H \rangle \simeq kT \quad (19)$$

بنابراین بجانب منحنی $\langle H \rangle$ برحسب T خط $\langle \mathcal{H} \rangle = kT$ است.

در نتیجه، نوسانگر کوانتومی و کلاسیک در دماهای بالا ($kT \gg \hbar\omega$) دارای انرژی میانگین یکسان kT هستند. اختلاف بارز در دماهای پایین ($kT \lesssim \hbar\omega$) پدید می‌آید: به مجرد اینکه انرژی kT ، مشخصه مخزن، در حدود فاصله $\hbar\omega$ جدایی دو تراز بی‌درپی نوسانگر می‌شود، دیگر نمی‌توان کوانتش انرژی نوسانگر را نادیده گرفت.

ب) مقایسه با یک دستگاه دوترازه

جالب است که نتایج پیشین را با آنچه که دربارهٔ یک دستگاه دوترازه به دست آوردیم، مقایسه کنیم. $\langle \psi_1 |$ و $\langle \psi_2 |$ را حالت‌های متناظر با انرژی‌های E_1 و E_2 (با $E_1 < E_2$) بگیریم. برای چنین دستگاهی، معادلهٔ عمومی (۶) می‌دهد

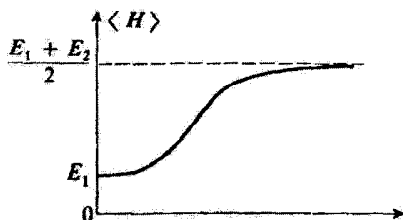
$$\langle H \rangle = \frac{E_1 e^{-E_1/kT} + E_2 e^{-E_2/kT}}{e^{-E_1/kT} + e^{-E_2/kT}} \quad (20)$$

انرژی میانگین یک دستگاه دوترازه، که با (۲۰) داده می‌شود، در شکل ۲ نمایش داده شده است. برای T کوچک ($kT \ll E_2 - E_1$)، عبارتهای بر حسب $e^{-E_1/kT}$ در صورت و مخرج (۲۰) مؤثر هستند (زیرا $E_1 < E_2$) و خواهیم یافت

$$\langle H \rangle \xrightarrow{T \rightarrow 0} E_1 \quad (21)$$

می‌توان تحقیق کرد که منحنی با یک مماس افقی شروع می‌شود. برای T بزرگ ($kT \gg E_2 - E_1$)، منحنی دارای مجانبی موازی با محور T با عرض $(E_1 + E_2)/2$ خواهد شد. این نتایج به آسانی قابل درک است: برای $T = 0$ ، دستگاه در حالت پایه $\langle \psi_1 |$ خود با انرژی E_1 است و در دمای بالا، جمعیت‌های دو تراز عملاً برابرند و $\langle H \rangle$ به نصف مجموع دو انرژی E_1 و E_2 میل می‌کند.

اگرچه دو منحنی خط پر در شکل‌های ۱ و ۲ در دمای پایین به یک شکل هستند، می‌بینیم که در دمای بالا ابتدا وضع چنین نیست. برای نوسانگر هماهنگ، $\langle H \rangle$ کراندار نیست و به‌طور خطی با T افزایش می‌یابد، در حالی که برای دستگاه دوترازه $\langle H \rangle$ نمی‌تواند از اندازهٔ معینی بگذرد. این تفاوت از این واقعیت ناشی می‌شود که طیف انرژی نوسانگر هماهنگ به‌طور نامحدودی به طرف بالا گسترده است؛ هنگامی که T افزایش می‌یابد، ترازهای دارای n بیش از پیش بزرگ اشغال می‌شوند و همین است که $\langle H \rangle$ را افزایش می‌دهد. برعکس، در مورد یک دستگاه دوترازه به محض اینکه جمعیت دو تراز برابر شد، افزایش اضافی دما دیگر انرژی میانگین را تغییر نمی‌دهد.



شکل ۲ انرژی میانگین یک دستگاه کوانتومی دوترازه با انرژی‌های E_1 و E_2 در ترازمندی ترمودینامیکی در دمای T .

۳. کاربرد

الف) تابش جسم سیاه

قبلاً در مقدمه این فصل خاطر نشان کردیم (و این نتیجه را در مکمل ۹ به طور دقیقتری توجیه کردیم) که در یک حفره، میدان الکترومغناطیسی هم ارز با مجموعه‌ای از نوسانگرهای هماهنگ مستقل یک‌بعدی است. هر یک از این نوسانگرها به یکی از مدهای مانایی که می‌تواند در حفره پدیدار گردد (مدهای طبیعی) وابسته است و دارای بسامد زاویه‌ای این موج است. نشان می‌دهیم که ترکیب این نتیجه با (H) و (\mathcal{H}) ، که کمی پیش به دست آوردیم، به سادگی به قانونهای ریلی-جینز و پلانک برای تابش جسم سیاه می‌انجامد.

حجم حفره را \mathcal{V} بگیریم و دیواره‌های آن را کاملاً بازتاب‌دهنده فرض کنیم. نخستین مدهای حفره (یعنی آنهایی که دارای پایستریز بسامدند) به طور بحرانی به شکل حفره بستگی دارند. برعکس، برای مدهای با بسامد بالا (یعنی مدهایی که طول موج $\lambda = c/v$ آنها در مقابل ابعاد حفره کوچک است)، با یک محاسبه الکترومغناطیس کلاسیک، می‌توان نتیجه زیر را به دست آورد: اگر $N(v)dv$ تعداد مدهای با بسامد محدود میان v و $v + dv$ باشد، $N(v)$ عملاً به شکل حفره بستگی ندارد و برابر است با

$$N(v) = \frac{8\pi v^2}{c^3} \mathcal{V} \quad (22)$$

$u(v)dv$ را انرژی الکترومغناطیسی در واحد حجم حفره وابسته به بسامدهای واقع در نوار $(v, v + dv)$ هنگامی که حفره در ترازمندی ترمودینامیکی در دمای T است، در نظر بگیریم. برای به دست آوردن انرژی $u(v)dv$ ، باید تعداد مدهایی را که بسامد آنها میان v و $v + dv$ محصور است در انرژی میانگین نوسانگرهای هماهنگ متناظر ضرب کرد. این انرژی را در پیش محاسبه کردیم و بسته به اینکه مسئله را به طور کلاسیک یا به طور کوانتومی بررسی کنیم، برابر است با (\mathcal{H}) یا $\hbar\omega/2$. (H) در این صورت با به کار گرفتن (۱۰)، (۱۶)، و (۲۲) در یک بررسی کلاسیک به دست می‌آوریم

$$u_{cl}(v) = \frac{8\pi v^2}{c^3} kT \quad (23)$$

و در یک بررسی کوانتومی خواهیم یافت

$$u_Q(v) = \frac{8\pi \hbar v^3}{c^3} \frac{1}{e^{\hbar v/kT} - 1} \quad (24)$$

(۲۳) قانون ریلی-جینز و (۲۴) قانون پلانک است که در حد بسامدهای ضعیف یا دماهای بالا $(\hbar v/kT \ll 1)$ به (۲۳) تبدیل می‌شود. اختلاف میان این دو قانون، نشانه‌دهنده تفاوتی است که میان

۱. دلیل به کار بردن $(H) - \hbar\omega/2$ و نه (H) این است که $u(v)$ معرف انرژی الکترومغناطیسی‌ای است که می‌توان از حفره خارج کرد. در صفر مطلق، همه نوسانگرها در حالت پایه خود هستند و هیچ انرژی نمی‌تواند به طرف خارج تابش شود، زیرا دستگاه در پایستریز حالت انرژی خود است. بنابراین $u(v)$ باید در صفر مطلق باشد، همچنان‌که به طور تجربی به تحقق رسیده است. این واقعیت ایجاب می‌کند که انرژی میانگین میدان در حفره نسبت به انرژی متناظر با $T = 0$ تعیین شود.

دو منحنی شکل ۱ وجود دارد. اگر $\nu \rightarrow \infty$ ، کمیت $u_{cl}(\nu)$ در رابطه (۲۳) نیز به سمت بینهایت میل می‌کند که از نظر فیزیکی بی‌معنی است. برای رفع این اشکالهای قانونی ریلی-جینز در فرکانسهای بالا بود که پلانک به این فرض هدایت شد که انرژی هر نوسان‌کننده به گونه‌ای ناپیوسته، با جهشهایی متناسب با ν ، تغییر می‌کند (کوانتس انرژی). او بدینسان فرمول (۲۴) را به دست آورد که نتایج تجربی را کاملاً به دست می‌دهد.

ب) قانون توزیع بوز-اینشتین

به جای محاسبه اندازه میانگین انرژی (H) که در بخش ۱ به دست آوردیم، میانگین عملگر N را محاسبه می‌کنیم. چون بنابر فرمول (۳۴-۵) داریم

$$H = \left(N + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad (25)$$

از نتیجه (۱۰) خواهیم یافت

$$\langle N \rangle = \frac{1}{e^{\hbar \omega / kT} - 1} \quad (26)$$

این واقعیت که ترازهای نوسانگر هماهنگ یک بعدی هم فاصله‌اند امکان می‌دهد تا به نوسانگر در حالت $\langle \varphi_n |$ مجموعه‌ای از n ذره (کوانتوم) یکسان با یک انرژی $\hbar \omega$ نسبت دهیم. با این تعبیر، عملگرهای a^\dagger و a که باعث عبور از $\langle \varphi_n |$ به $\langle \varphi_{n+1} |$ یا $\langle \varphi_{n-1} |$ می‌شوند، یک ذره می‌آفرینند یا نابود می‌کنند. N در این صورت عملگر وابسته به تعداد ذرات است ($\langle \varphi_n |$ ویژه حالت N با ویژه مقدار n است).

در مورد خاص میدان الکترومغناطیسی، کوانتومهای وابسته به هر نوسانگر هماهنگ، همان "فوتونها" هستند. با هر حفره که در بخش پیشین در نظر گرفته شد، فوتونهایی متناظرند که نوع آنها با بسامد، قطبش، و توزیع فضایی مد مشخص می‌شوند. عبارت (۲۶) شمار میانگین فوتونهای وابسته به یک مد با بسامد ν را، در ترازمندی ترمودینامیکی، به دست می‌دهد. عبارت (۲۶) قانون توزیع بوز-اینشتین است که آن را می‌توان در یک چارچوب عمومیتری به دست آورد. ما در اینجا آن را فقط از مطالعه نوسانگر هماهنگ و تعبیری از حالتی $\langle \varphi_n |$ به دست آوردیم.

یادداشت:

دقیقاً، قانون توزیع بوز-اینشتین برای بوزونهای با انرژی ϵ چنین نوشته می‌شود

$$\langle N \rangle = \frac{1}{e^{(\epsilon - \mu) / kT} - 1} \quad (27)$$

که در آن μ پتانسیل شیمیایی است. در مورد فوتون $\mu = 0$ است و بدین واقعیت مربوط می‌شود که تعداد کل فوتونهای دستگاه کلی تابش-مخزن، به سبب امکان جذب یا گسیل فوتون از دیواره‌ها، ثابت نیست. ■

ج) گرمای ویژه جامدها در حجم ثابت

ما در اینجا خود را به مدل اینشتین محدود می‌کنیم (مکمل ۱ همین فصل)، که در آن جسم جامد متشکل از \mathcal{N} اتم در نظر گرفته می‌شود که مستقل از یکدیگر پیرامون وضع ترازمندیشان، با یک بسامد زاویه‌ای ω_E ارتعاش می‌کنند. بنابراین انرژی داخلی U جسم جامد در دمای T برابر با مجموع انرژیهای میانگین \mathcal{N} نوسانگر ناهمسانگرد سه‌بعدی در ترازمندی ترمودینامیکی در این دماست. با به‌کار بستن یادداشت (۱) بخش ۱ پیشین، می‌بینیم که

$$U = 3\mathcal{N}\langle H \rangle \quad (28)$$

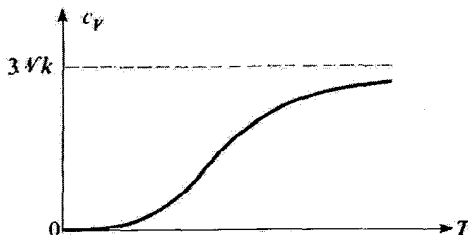
که در آن $\langle H \rangle$ انرژی میانگین یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی با بسامد زاویه‌ای ω_E است. از طرف دیگر می‌دانیم که گرمای ویژه در حجم ثابت c_V ، مشتق انرژی داخلی U نسبت به دماست

$$c_V = \frac{dU}{dT} = 3\mathcal{N} \frac{d}{dT} \langle H \rangle \quad (29)$$

که با در نظر گرفتن (۱۰)، می‌دهد

$$c_V = 3\mathcal{N}k \frac{\left(\frac{\hbar\omega_E}{kT}\right)^2 e^{\hbar\omega_E/kT}}{[e^{\hbar\omega_E/kT} - 1]^2} \quad (30)$$

تغییرات c_V برحسب T در شکل ۳ نمایش داده شده است. بنابر (۲۹)، c_V با مشتق منحنی خطی شکل ۱ متناسب است. بنابراین به آسانی می‌توان روند تغییرات دمای ویژه c_V را برحسب دما شناخت. در شکل ۱، دیده می‌شود $\langle H \rangle$ که از مبدأ با مماس افقی شروع می‌شود بسیار کند افزایش می‌یابد. بنابراین c_V برای $T = 0$ صفر است و همچنین بسیار کند افزایش می‌یابد. برعکس، برای T بزرگ ($kT \gg \hbar\omega_E$)، $\langle H \rangle$ به سمت kT میل می‌کند و از آن نتیجه می‌گیریم که c_V به ثابت $3\mathcal{N}k$ مستقل از ω_E میل می‌کند. گذر میان دو ناحیه برای $\hbar\omega_E/kT \approx 1$ انجام می‌گیرد.



شکل ۳ گرمای ویژه c_V (با حجم ثابت) یک جامد در مدل اینشتین. حد در دمای بالا با قانون کلاسیک دولون و پتی متناظر است.

مجانِب شکل ۳ با قانون دولون و پتی متناظر است: اگر یک اتم گرم از جسم جامد دلخواهی در نظر بگیریم، \mathcal{N} برابر عدد آوگادرو است و اندازه حدی c_V برابر با $3R$ (R ثابت گازهای کامل) یعنی در حدود $6 \text{ cal deg}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ است.

چنانکه کمی پیش از این اشاره کردیم، ماهیت کوانتومی ارتعاشهای بلورین در دماهای پایین، هنگامی که kT حدود $\hbar\omega_E$ یا کمتر است، نمایان می شود تا آنجا که به c_V مربوط است، این امر با این واقعیت بیان می شود که گرمای ویژه با T به سمت صفر میل می کند. درست مثل این است که گویی درجات آزادی متناظر، با ارتعاشات بلوری، در پایینتر از یک دمایی "منجمد" می شوند و دیگر در گرمای ویژه دخالت نمی کنند. این ویژگی به طور فیزیکی قابل فهم است. در صفر مطلق، هر نوسانگر در حالت پایه (φ_0) خویش است و تا $kT \ll \hbar\omega_E$ است، نمی تواند انرژی گرمایی جذب کند، زیرا انرژی نخستین تراز برانگیخته آن خیلی بیشتر از kT است.

یادداشتها:

۱. مقایسه با گرمای ویژه یک دستگاه دوترازه

می توان استدلال مشابهی را برای نمونه ای که شامل مجموعه ای از دستگاههای دوترازه است، (برای مثال یک نمونه پارامغناطیسی شامل \mathcal{N} اسپین $1/2$) به کار برد: گرمای ویژه c_V آن، با تقریب یک ضریب، با مشتق منحنی شکل ۲ داده می شود. برای چنین دستگاهی، تغییرات c_V برحسب T در شکل ۴ نمایش داده شده است.

روند برای $T \approx 0$ همان است که در شکل ۳ نشان داده شده است. برعکس، می بینیم که برای $kT \gg E_2 - E_1$ ، c_V به صفر میل می کند، زیرا در این هنگام انرژی مستقل از T و برابر با $(E_1 + E_2)/2$ می شود (شکل ۲). بنابراین c_V برای یک دستگاه دوترازه یک ماکزیموم نشان می دهد (ناهنجار شونکی) که تعبیر فیزیکی آن چنین است: همانند نوسانگر هماهنگ، دستگاه دوترازه در دماهای بسیار پایین، تا وقتی که $kT \gg E_2 - E_1$ است، نمی تواند انرژی گرمایی جذب کند؛ بنابراین c_V از صفر شروع می کند. سپس به تدریج که T افزایش می یابد، جمعیت تراز E_2 زیاد می شود و c_V افزایش می یابد. هنگامی که دما به اندازه ای بالاست که جمعیت دوترازه عملاً برابر شوند، دستگاه دیگر نمی تواند انرژی گرمایی جذب کند زیرا



شکل ۴ گرمای ویژه c_V برای مجموعه ای از دستگاههای دوترازه. اینکه c_V در دماهای بالا صفر می شود، مربوط به این واقعیت است که طیف انرژی از بالا کراندار است.

جمعیتها نمی‌توانند دیگر تغییر کنند: بنابراین هنگامی که $T \rightarrow \infty$ ، c_V به سمت صفر میل می‌کنند.

۲. مدل اینشتین به تنهایی امکان می‌دهد دریابیم چرا هنگامی که دمای T به صفر میل می‌کند، گرمای ویژه c_V به صفر میل می‌کند (نتیجه‌ای که به‌طور کلاسیک غیر قابل توضیح است). با این همه، بیش از آن طرح‌وار است که بتواند وابستگی دقیق c_V را در دمای پایین بیان کند.

در یک بلور حقیقی، نوسانگرهای مختلف جفتیده هستند، این امر سبب پدیدار شدن مجموعه‌ای از مدهای طبیعی ارتعاشی (فونونها) می‌شود که بسامد آنها از صفر تا یک بسامد معین قطع تغییر می‌کند (مکمل ۹ همین فصل را ببینید). در این صورت باید (۳۰) را بر روی بسامدهای مختلف ممکن (با در نظر داشتن این واقعیت که تعداد مدهای با بسامد محصور میان ν و $\nu + d\nu$ به ν وابسته است). جمع‌بندی کرد. بدین ترتیب عبارتی برای گرمای ویژه به‌دست می‌آید که، در دمای پایین، همچون T^3 تغییر می‌کند (که به‌خوبی با تجربه تأیید شده است).

۴. توزیع احتمال مشاهده‌پذیر X

الف) تعریف چگالی احتمال $\rho(x)$

به نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی در ترازمندی ترمودینامیکی بازگردیم. احتمال $\rho(x)dx$ را برای اینکه به هنگام یک اندازه‌گیری موضع X ذره، نتیجه‌ای میان x و $x + dx$ به‌دست آوریم، جستجو می‌کنیم. استنباط می‌شود که $\rho(x)$ در شمار زیادی از مسائل فیزیکی دارای نقش مهمی است: به‌عنوان مثال، برای جامدی که با مدل اینشتین توصیف می‌شود، پهنای $\rho(x)$ ایده‌ای از دامنه ارتعاش آنها را به‌دست می‌دهد و بررسی تغییرات این پهنای برحسب T امکان می‌دهد تا پدیده ذوب درک شود [این پدیده هنگامی رخ می‌دهد که پهنای $\rho(x)$ دیگر در مقابل فاصله میان اتمی چشم پوشیدنی نیست].

هنگامی که نوسانگر در حالت مانای $\langle \varphi_n |$ است، چگالی احتمال $\rho_n(x)$ متناظر عبارت است از

$$\rho_n(x) = |\langle \varphi_n(x) |^2 = \langle x | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | x \rangle \quad (31)$$

در ترازمندی ترمودینامیکی، نوسانگر با یک آمیزه آماری از حالت‌های $\langle \varphi_n |$ با وزنهای $Z^{-1} e^{-E_n/kT}$ توصیف می‌شود. چگالی احتمال $\rho(x)$ در این صورت برابر است با

$$\rho(x) = Z^{-1} \sum_n \rho_n(x) e^{-E_n/kT} \quad (32)$$

$\rho(x)$ مجموع توزین شده چگالی‌های احتمال $\rho_n(x)$ وابسته به حالت‌های مختلف $\langle \varphi_n |$ است

که برخی از آنها در شکل‌های ۵-۵ و ۶-۵ نشان داده شده‌اند. بعداً خواهیم دید که نوسانهای تابع $\rho_n(x)$ در این شکلها، در جمع‌بندی روی شاخص n ناپدید می‌شوند: در واقع نشان خواهیم داد که $\rho(x)$ تنها یک تابع گاوسی است.

چگالی احتمال $\rho(x)$ که با (۳۲) تعریف شده است به‌طور بسیار ساده به عملگر چگالی ρ نوسانگر هماهنگ در ترازمندی ترمودینامیکی وابسته است. در واقع، با به‌کار بستن (۳۱) و (۳۲) به‌دست می‌آوریم

$$\rho(x) = Z^{-1} \sum_n e^{-E_n/kT} \langle x | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | x \rangle \quad (۳۳)$$

می‌توان، در طرف دوم، عملگر $e^{-H/kT}$ را پدید آورد که، با توجه به رابطه بستاری روی حالت‌های $|\varphi_n\rangle$ ، نوشته می‌شود

$$e^{-H/kT} = e^{-H/kT} \sum_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| = \sum_n e^{-E_n/kT} |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \quad (۳۴)$$

در این صورت می‌بینیم که

$$\rho(x) = Z^{-1} \langle x | e^{-H/kT} | x \rangle = \langle x | \rho | x \rangle \quad (۳۵)$$

که در آن عملگر چگالی ρ با فرمول (۱) داده شده است. بنابراین $\rho(x)$ به‌صورت عنصر قطری ρ متناظر با کیت $|x\rangle$ پدیدار می‌شود.

ب) محاسبه $\rho(x)$

می‌دانیم که

$$H = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (۳۶)$$

بنابراین $\rho(x)$ را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$\rho(x) = Z^{-1} e^{-\lambda/2} F_\lambda(x) \quad (۳۷)$$

با

$$\lambda = \frac{\hbar\omega}{kT} \quad (۳۸)$$

و

$$F_\lambda(x) = \langle x | e^{-\lambda a^\dagger a} | x \rangle \quad (۳۹)$$

پس برای شناختن $\rho(x)$ ، کافی است این عنصر قطری ماتریس را محاسبه کنیم. بدین منظور، تغییرات $F_\lambda(x)$ را هنگام تغییر x به $x + dx$ محاسبه می‌کنیم. چون کت $|x + dx\rangle$ توسط [مکمل EII، رابطه (۲۰)]

$$|x + dx\rangle = \left(1 - i \frac{dx}{\hbar} P\right) |x\rangle \quad (۴۰)$$

داده می‌شود، با بردن این تساوی و تساوی الحاقی آن در (۳۹) (و با چشمپوشی از بینهایت کوچکیهای مرتبه دوم برحسب dx)، به دست می‌آوریم

$$F_\lambda(x + dx) = F_\lambda(x) + i \frac{dx}{\hbar} \langle x | [P, e^{-\lambda a^\dagger a}] | x \rangle \quad (۴۱)$$

عنصر ماتریسی که در طرف دوم (۴۱) دیده می‌شود، عملگر P را وارد می‌کند که با $(a - a^\dagger)$ متناسب است. اما عملگر X ، متناسب با $(a + a^\dagger)$ است که به گونه ساده‌ای روی کتهای $|x\rangle$ اثر می‌کند. از این رو $[P, e^{-\lambda a^\dagger a}]$ را تغییر می‌دهیم تا X پدید آید. بدین منظور، برای شروع، رابطه‌ای را که میان $a e^{-\lambda a^\dagger a}$ و $e^{-\lambda a^\dagger a} a$ وجود دارد، جستجو می‌کنیم. این رابطه به سادگی در نمایش $\{\varphi_n\}$ به دست می‌آید: در واقع

$$a e^{-\lambda a^\dagger a} | \varphi_n \rangle = \sqrt{n} e^{-\lambda n} | \varphi_{n-1} \rangle \quad (۴۲الف)$$

$$e^{-\lambda a^\dagger a} a | \varphi_n \rangle = \sqrt{n} e^{-\lambda(n-1)} | \varphi_{n-1} \rangle \quad (۴۲ب)$$

یعنی

$$e^{-\lambda a^\dagger a} = e^\lambda a e^{-\lambda a^\dagger a} \quad (۴۳)$$

که می‌توان آن را همچنین نوشت

$$\left(1 - \tanh \frac{\lambda}{\gamma}\right) e^{-\lambda a^\dagger a} = \left(1 + \tanh \frac{\lambda}{\gamma}\right) a e^{-\lambda a^\dagger a} \quad (۴۴)$$

به همین گونه نشان می‌دهیم که

$$e^{-\lambda a^\dagger a} a^\dagger = e^{-\lambda} a^\dagger e^{-\lambda a^\dagger a} \quad (۴۵)$$

یا

$$\left(1 + \tanh \frac{\lambda}{\gamma}\right) e^{-\lambda a^\dagger a} a^\dagger = \left(1 - \tanh \frac{\lambda}{\gamma}\right) a^\dagger e^{-\lambda a^\dagger a} \quad (۴۶)$$

اکنون دو طرف تساویهای (۴۴) و (۴۶) را از یکدیگر کم کنیم، به دست می آوریم

$$[a - a^\dagger, e^{-\lambda a^\dagger a}] = -\tanh \frac{\lambda}{\gamma} [a + a^\dagger, e^{-\lambda a^\dagger a}]_+ \quad (۴۷)$$

که در آن نماد $[A, B]_+$ نشاندهندهٔ یاد جابه جاگر

$$[A, B]_+ = AB + BA \quad (۴۸)$$

است. اگر ضریبهای عددی را که از فرمولهای (۵-۲۰) و (۵-۲۶) پدید می آیند منظور کنیم، سرانجام (۴۷) خواهد شد

$$[P, e^{-\lambda a^\dagger a}] = i m \omega \tanh \frac{\lambda}{\gamma} [X, e^{-\lambda a^\dagger a}]_+ \quad (۴۹)$$

این نتیجه را در رابطه (۴۱) ببریم، خواهیم یافت

$$\begin{aligned} F_\lambda(x + dx) - F_\lambda(x) &= -\frac{m\omega}{\hbar} dx \tanh x \left| \frac{\lambda}{\gamma} \langle [X, e^{-\lambda a^\dagger a}]_+ | x \rangle \right. \\ &= -\gamma x \frac{m\omega}{\hbar} \tanh \frac{\lambda}{\gamma} F_\lambda(x) dx \end{aligned} \quad (۵۰)$$

بنابراین $F_\lambda(x)$ از معادلهٔ دیفرانسیل

$$\frac{d}{dx} F_\lambda(x) + \frac{\gamma x}{\xi^2} F_\lambda(x) = 0 \quad (۵۱)$$

پیروی می کند که در آن ξ ، که دارای بعد طول است، چنین تعریف می شود

$$\xi = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega} \coth \frac{\lambda}{\gamma}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega} \coth \left(\frac{\hbar\omega}{\gamma kT} \right)} \quad (۵۲)$$

معادله (۵۱) فوراً حل می شود

$$F_\lambda(x) = F_\lambda(0) e^{-x^2/\xi^2} \quad (۵۳)$$

بنابراین ما $\rho(x)$ را با تقریب یک ضریب ثابت می شناسیم، زیرا بنابر (۳۷)

$$\rho(x) = Z^{-1} e^{-\lambda/\gamma} F_\lambda(0) e^{-x^2/\xi^2} \quad (۵۴)$$

چون می دانیم که انتگرال $\rho(x)$ روی تمام محور x ها باید برابر یک شود، سرانجام به دست می آوریم

$$\rho(x) = \frac{1}{\xi \sqrt{\pi}} e^{-x^2/\xi^2} \quad (۵۵)$$

بنابراین تابع $\rho(x)$ یک تابع گاوسی است که پهنای آن با طول ξ ، که با (۵۲) تعریف شده است، مشخص می شود.

ج) بحث فیزیکی

از چگالی احتمال (۵۵)، به آسانی محاسبه می‌کنیم

$$\langle X \rangle = 0$$

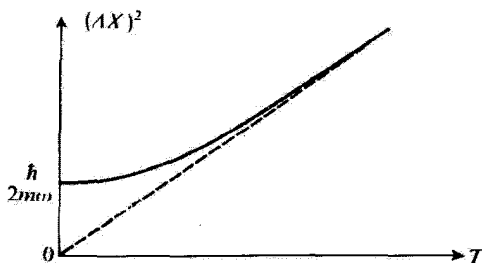
$$\langle X^2 \rangle = (\Delta X)^2 = \frac{\xi^2}{2} \quad (56)$$

شکل ۵ تغییرات $(\Delta X)^2$ را برحسب T نشان می‌دهد. از (۵۲) درمی‌یابیم که هنگامی که $T = 0$ است، $(\Delta X)^2$ برابر $\hbar/2m\omega$ است. این نتیجه شگفت‌آور نیست: در $T = 0$ ، نوسانگر در حالت پایه خود است و $\rho(x) = |\varphi_0(x)|^2$ منطبق است. برای ΔX ، انحراف ریشه میانگین مربعی X در حالت پایه به دست می‌آید [فرمول (۵-۹۷ الف)]. سپس $(\Delta X)^2$ افزایش می‌یابد و هنگامی که $kT \gg \hbar\omega$ خواهیم داشت

$$(\Delta X)^2 \underset{T \rightarrow \infty}{\sim} \frac{kT}{m\omega^2} \quad (57)$$

وانگهی، $\rho(x)$ در این مورد با چگالی احتمال یک نوسانگر کلاسیک در ترازمندی ترمودینامیکی در دمای T یکی می‌شود

$$\rho_{cl}(x) = \frac{e^{-V(x)/kT}}{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-V(x)/kT} dx} = \frac{1}{\sqrt{\frac{2\pi kT}{m\omega^2}}} e^{-m\omega^2 x^2 / 2kT} \quad (58)$$



شکل ۵ تغییرات انحراف ریشه میانگین مربعی ΔX برحسب T ، برای یک نوسانگر هماهنگ در ترازمندی ترمودینامیکی. هنگامی که $T \rightarrow \infty$ ، ΔX با مقدار کلاسیکی‌اش، که با منحنی خط‌چین نمایش داده شده است یکی می‌شود. در دمای پایین، اثرهای کوانتومی (رابطه عدم قطعیت هایزنبرگ) مانع می‌شوند که ΔX به صفر میل کند.

که به $(\Delta x_{cl})^2 = kT/m\omega^2$ می‌انجامد (خط نقطه‌چین شکل ۵). در اینجا نیز پیش‌بینیهای کلاسیک و کوانتومی برای $\hbar\omega \gg kT$ به هم می‌رسند.

اکنون نتایج پیشین را به مسئله ذوب یک جسم جامد به‌کار بندیم (برای آسانی، مدل اینشتین یک‌بعدی را برمی‌گزینیم؛ مکمل ۱ همین فصل را ببینید). تجربه نشان می‌دهد هنگامی که ΔX حدود یک کسر η از فاصلهٔ میان اتمی d است، جسم جامد ذوب می‌شود. در نتیجه دمای ذوب به‌طور تقریب توسط رابطه

$$\frac{\xi^2}{2d^2} \simeq \eta^2 \quad (59)$$

داده می‌شود که در آن به جای ξ عبارت (۵۲) با $T = T_f$ قرار می‌گیرد. فرض کنیم T_f آن قدر بزرگ باشد که داشته باشیم $\hbar\omega_E \gg kT_f$ ، در این صورت می‌توانیم در (۵۹) صورت مجانبی (۵۷) را به‌کار بندیم و برای T_f قانون زیر را به‌دست آوریم^۱

$$\frac{kT_f}{m\omega_E^2} \simeq \eta^2 d^2 \quad (60)$$

اگر قرار دهیم

$$\hbar\omega_E = k\Theta_E \quad (61)$$

Θ_E "دمای اینشتین" نام دارد) و توجه داشته باشیم که d از یک ماده به ماده دیگر تغییر اندکی دارد (در هر حال خیلی کمتر از ω_E یعنی Θ_E)، قانون تقریبی زیر را به‌دست می‌آوریم

$$\frac{T_f}{m\Theta_E^2} \simeq C^{te} \quad (62)$$

پس دمای ذوب یک بلور به‌طور تقریبی با مجذور یک بسامد ارتعاش مشخصهٔ بلور متناسب است.

(د قضیهٔ بلوخ

عملگر e^{-iqX} را که در آن q متغیری حقیقی است در نظر بگیریم. اندازهٔ میانگین آن

$$\langle e^{-iqX} \rangle = \text{Tr}[\rho e^{-iqX}] \quad (63)$$

۱. این همیشه شدنی نیست. در واقع، یادآوری کنیم که هلیوم در فشار جو، حتی در $T = 0$ ، به‌صورت مایع می‌ماند: T هرچه باشد، ξ در مقابل d هیچ‌گاه چشم‌پوشیدنی نیست (مکمل ۱ همین فصل).

[که در آن ρ با (۱) داده می‌شود] تابعی از q است که ما آن را با $f(q)$ نمایش می‌دهیم

$$f(q) = \langle e^{-iqX} \rangle \quad (۶۴)$$

در حساب احتمالات، $f(q)$ تابع سرشتی متغیر کتراهی x نام دارد. $f(q)$ را می‌توان به آسانی در نمایش $\{ |x\rangle \}$ حساب کرد

$$\begin{aligned} f(q) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle x | \rho e^{-ikX} | x \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle x | \rho | x \rangle e^{-ikx} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \rho(x) e^{-ikx} \end{aligned} \quad (۶۵)$$

بنابراین $f(q)$ ، با تقریب یک ضریب $\sqrt{2\pi}$ ، تبدیل فوریه تابع $\rho(x)$ است که در بالا محاسبه شد (بخش ۴-ب). اما $\rho(x)$ یک تابع گاوسی است [فرمول (۵۵)]، پس $f(q)$ نیز یک تابع گاوسی است [پیوست ۱، رابطه (۵۰)]

$$f(q) = e^{-\xi^2 q^2 / 4} \quad (۶۶)$$

که بنا بر فرمول (۵۶) نوشته می‌شود

$$\langle e^{-iqX} \rangle = e^{-q^2 / 4 \langle X^2 \rangle} \quad (۶۷)$$

می‌توان محاسبات همانندی را با آنچه که در بخشهای ۴-الف و ۴-ب انجام شد، برای مشاهده‌پذیر P ، به جای X ، به‌کار برد. در این صورت چگالی احتمال $\bar{\rho}(p)$ چنین تعریف خواهد شد

$$\bar{\rho}(p) = Z^{-1} \sum_n e^{-E_n / kT} | \bar{\varphi}_n(p) |^2 \quad (۶۸)$$

فرمول (۲۴) از مکمل ۴ این فصل نشان می‌دهد

$$\bar{\rho}(p) = \frac{1}{m\omega} \rho \left(x = \frac{p}{m\omega} \right) \quad (۶۹)$$

بنابراین

$$\bar{\rho}(p) = \frac{1}{m\omega\xi\sqrt{\pi}} e^{-p^2 / m^2\omega^2\xi^2} \quad (۷۰)$$

در نتیجه، بررسی $\langle e^{-iqP} \rangle$ به همان نتیجه (۶۷) می‌انجامد

$$\langle e^{-iqP} \rangle = e^{-\langle q^2 \rangle / 4 \langle P^2 \rangle} \quad (۷۱)$$

تعمیم فرمولهای (۶۷) و (۷۱) به نام قضیه بلوخ معروف است: اگر $G(x, p)$ ترکیبی خطی از موضع X تکانه P یک نوسانگر هماهنگ یک بعدی در ترازمندی ترمودینامیکی در دمای T باشد، در این صورت

$$\langle e^{-iqG} \rangle = e^{-(q^2/2)\langle G^2 \rangle} \quad (۷۲)$$

این قضیه در فیزیک حالت جامد، برای مثال، در نظریه گسیل بدون پس زنی فوتونها توسط هسته‌های یک شبکه بلورین (اثر موسباور)، به کار رفته است.

مراجع برای مطالعه بیشتر
گرمای ویژه:

Kittel (8.2), chap. 6, p. 91 and 100; Kittel (13.2), chap. 6; Seitz (13.4), chap. III; Ziman (13.3), chap. 2.

تابش جسم سیاه:

Eisberg and Resnick (1.3), chap. 1; Kittel (8.2), chap. 15; Reif (8.4) §§9-13 to 9-15; Bruhat (8.3), chap. XXII.

قضیه بلوخ:

Messiah (1.17), chap. XII, §II-12.

مکمل ۱۲

تمرینات

۱. یک نوسانگر هماهنگ با جرم m و بسامد زاویه‌ای ω در نظر بگیرید. در لحظه $t = 0$ ، حالت این نوسانگر چنین داده می‌شود

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle$$

که در آن $|\varphi_n\rangle$ حالت‌های مانا با انرژی $(n + 1/2)\hbar\omega$ هستند.

الف) احتمال \mathcal{P} برای آنکه در یک اندازه‌گیری انرژی نوسانگر، که در لحظه دلخواه $t > 0$ انجام می‌گیرد، نتیجه‌ای بیش از $2\hbar\omega$ به دست دهد، چیست؟ هنگامی که $\mathcal{P} = 0$ است، ضریب‌های غیرصفر c_n کدام‌اند؟

ب) از اکنون به بعد می‌پذیریم که تنها c_0 و c_1 غیرصفرند. شرط بهنجارش $|\psi(0)\rangle$ و اندازه میانگین انرژی $\langle H \rangle$ را برحسب c_0 و c_1 بنویسید. با قبول شرط اضافی $\langle H \rangle = \hbar\omega$ ، $|c_0|^2$ و $|c_1|^2$ را محاسبه کنید.

ج) چون بردار حالت بهنجار $|\psi(0)\rangle$ با تقریب یک ضریب فاز کلی تعریف می‌شود، این ضریب فاز را با حقیقی و مثبت گرفتن c_0 تثبیت می‌کنیم. قرار می‌دهیم $c_1 = |c_1| e^{i\theta_1}$. اضافه بر $\langle H \rangle = \hbar\omega$ ، فرض می‌کنیم

$$\langle X \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

θ_1 را حساب کنید.

د) با مشخص شدن $|\psi(0)\rangle$ بدین ترتیب، $|\psi(t)\rangle$ را برای $t > 0$ بنویسید و اندازه θ_1 را در لحظه t محاسبه کنید. از آن، اندازه میانگین موضع $\langle X \rangle(t)$ را در لحظه t نتیجه بگیرید.

۲. نوسانگر هماهنگ ناهمسانگرد سه‌بعدی

در یک مسئله سه‌بعدی، ذره‌ای به جرم m و انرژی پتانسیل

$$V(X, Y, Z) = \frac{m\omega^2}{4} \left[\left(1 + \frac{2\lambda}{3}\right) (X^2 + Y^2) + \left(1 - \frac{4\lambda}{3}\right) Z^2 \right]$$

در نظر بگیریم که در آن ω و λ ثابتهایی هستند که در شرایط زیر صدق میکنند

$$\omega \geq 0, 0 \leq \lambda < \frac{3}{4}$$

الف) ویژه حالت‌های هامیلتونی و انرژیهای متناظر کدامند؟

ب) تغییرات انرژی، پارامتر و مرتبه واگنی تراز پایه و دو تراز نخست برانگیخته را برحسب λ حساب کرده بحث کنید.

۳. نوسانگر هماهنگ: دو ذره

دو ذره با جرم یکسان m با موضعیهای X_1, X_2 ، یا تکانه‌های P_1 و P_2 تحت اثر یک پتانسیل به شکل

$$V(X) = \frac{1}{4} m \omega^2 X^2$$

قرار دارند. دو ذره برهم‌کنش ندارند.

الف) عملگر H ، هامیلتونی دستگاه دو ذره را بنویسید. نشان دهید که می‌توان H را چنین نوشت

$$H = H_1 + H_2$$

که در آن H_1 و H_2 تنها به ترتیب در فضا‌های ذره (۱) و ذره (۲) عمل می‌کنند. انرژی دستگاه دو ذره، مرتبه واگنی و تابعی موج متناظر را محاسبه کنید.

ب) آیا H یک مجموعه کامل مشاهده‌پذیر جابه‌جایی‌پذیر می‌سازد؟ همین سؤال برای مجموعه $\{H_1, H_2\}$ ، ویژه‌بردارهای مشترک H_1 و H_2 را با $|\Phi_{n_1, n_2}\rangle$ نشان می‌دهیم. رابطه‌های راست‌هنجاری و بستاری حالت‌های $|\Phi_{n_1, n_2}\rangle$ را بنویسید.

ج) دستگاهی را در نظر می‌گیریم که، در لحظه $t = 0$ ، در حالت

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{4} (|\Phi_{0,0}\rangle + |\Phi_{1,0}\rangle + |\Phi_{0,1}\rangle + |\Phi_{1,1}\rangle)$$

است. چه نتایجی را با چه احتمالهایی برای اندازه‌گیری کمیات زیر در همین لحظه می‌توان به دست آورد:

- انرژی کل دستگاه؟

- انرژی ذره (۱)؟

- موضع و سرعت این ذره؟

۴. (این تمرین دنباله تمرین پیشین است و در آن همان نمادگذاریها به کار می روند.)

دستگاه دو ذره، در لحظه $t = 0$ ، در حالت $(\psi(0) | \psi(0) |$ است که در تمرین ۳ داده شده است.

الف) در لحظه $t = 0$ ، انرژی کل H اندازه گیری می شود و نتیجه $2\hbar\omega$ به دست می آید.

۱. اندازه های میانگین موضع، تکانه، و انرژی ذره (۱) را، در لحظه t مثبت دلخواه،

حساب کنید. همین کار را برای ذره (۲) نیز انجام دهید.

۲. در لحظه $t > 0$ ، انرژی ذره (۱) اندازه گیری می شود. چه نتایجی را با چه احتمالهایی

می توانیم به دست آوریم؟ به همین سؤال اگر موضع ذره (۱) اندازه گیری شود جواب دهید.

منحنی ای که چگالی احتمال متناظر را به دست می دهد، رسم کنید.

ب) به جای آنکه، در لحظه $t = 0$ ، انرژی کل H اندازه گیری شود، انرژی H_2 ذره (۲) را اندازه

می گیریم. نتیجه به دست آمده $\hbar\omega/2$ است. جوابهای سؤالهای (۱) و (۲) قسمت الف) در این

صورت چه هستند؟

۵. (این تمرین دنباله تمرین ۳ است و در آن همان نمادها حفظ می شوند.)

ویژه حالت های مشترک H_1 و H_2 را با $|\Phi_{n_1, n_2}\rangle$ و ویژه مقدرهای آنها را با $(n_1 + 1/2)\hbar\omega$

و $(n_2 + 1/2)\hbar\omega$ نشان می دهیم. عملگر P_e "تبادل دو ذره" چنین تعریف می شود

$$P_e |\Phi_{n_1, n_2}\rangle = |\Phi_{n_2, n_1}\rangle$$

الف) نشان دهید که $P_e^{-1} = P_e$ یکانی است. ویژه مقدرهای P_e کدام اند؟ $B' = P_e B P_e^\dagger$

را مشاهده پذیر حاصل از تبدیل مشاهده پذیر دلخواه B به وسیله P_e بگیریم. نشان دهید که شرط

$B' = B$ (یعنی تغییرناپذیری B در تبادل دو ذره) با $[B, P_e] = 0$ هم ارز است.

ب) نشان دهید

$$P_e H_1 P_e^\dagger = H_2$$

$$P_e H_2 P_e^\dagger = H_1$$

آیا H با P_e جابه جا می شود؟ تبدیل عملگرهای X_1, P_1, X_2, P_2 توسط P_e را محاسبه کنید.

ج) پایه ای از ویژه بردارهای مشترک H و P_e بسازید. آیا این دو عملگر یک مجموعه کامل

مشاهده پذیر جابه جایی پذیر تشکیل می دهند؟ طیف H و واگنی ویژه مقدرهای آن به چه صورتی

در می‌آیند، اگر تنها ویژه‌بردارهای $\langle \Phi |$ مربوط به H را به گونه‌ای که $\langle \Phi | \Phi \rangle = -1$ باشد در نظر بگیریم؟

۶. نوسانگر هماهنگ باردار در یک میدان الکتریکی متغیر

یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی از ذره‌ای به جرم m ، بار q ، و انرژی پتانسیل $V(X) = \frac{1}{2}m\omega^2 X^2$ تشکیل شده است. در این تمرین فرض می‌کنیم که ذره در یک میدان الکتریکی $\mathcal{E}(t)$ وابسته به زمان در راستای Ox قرار دارد، به گونه‌ای که به $V(x)$ باید انرژی پتانسیل زیر را افزود

$$W(t) = -q\mathcal{E}(t)X$$

الف) هامیلتونی $H(t)$ را برحسب عملگرهای a و a^\dagger بنویسید. جایه‌جاگرهای a و a^\dagger را با $H(t)$ حساب کنید.

ب) $\alpha(t)$ را عددی بگیریم که توسط

$$\alpha(t) = \langle \psi(t) | a | \psi(t) \rangle$$

تعریف می‌شود و در آن $\langle \psi(t) |$ بردار حالت به‌نحار ذره مورد مطالعه است. از نتایج سؤال پیشین نتیجه بگیرید که $\alpha(t)$ از معادله دیفرانسیل

$$\frac{d}{dt}\alpha(t) = -i\omega \alpha(t) + i\lambda(t)$$

پرومی می‌کند که در آن $\lambda(t)$ چنین تعریف می‌شود

$$\lambda(t) = \frac{q}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\mathcal{E}(t)$$

این معادله دیفرانسیل را حل کنید. اندازه‌های میانگین موضع و تکانه ذره در لحظه t چه هستند؟
ج) کت $|\varphi(t)\rangle$ توسط

$$|\varphi(t)\rangle = [a - \alpha(t)] | \psi(t) \rangle$$

تعریف شده است و در آن $\alpha(t)$ کمیتی است که در قسمت (ب) محاسبه شده است. با به کار بستن نتایج سؤالهای (الف) و (ب)، نشان دهید که تحول $|\varphi(t)\rangle$ چنین داده می شود

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\varphi(t)\rangle = [H(t) + \hbar\omega] |\varphi(t)\rangle$$

هنجار $|\varphi(t)\rangle$ برحسب زمان چگونه تغییر می کند؟

(د) فرض کنیم که $|\psi(0)\rangle$ ویژه بردار a با ویژه مقدار $\alpha(t)$ است. نشان دهید که $|\psi(t)\rangle$ نیز ویژه بردار a با ویژه مقداری است که محاسبه خواهید کرد. از آن، اندازه میانگین هامیلتونی نامغشوش

$$H_0 = H(t) - W(t)$$

را در لحظه t برحسب $\alpha(0)$ نتیجه بگیرید. انحرافهای ریشه میانگین مربعی ΔP ، ΔX ، و ΔH_0 را به دست دهید. این انحرافها چگونه برحسب زمان تغییر می کنند؟

(ه) فرض می کنیم که در لحظه $t = 0$ ، نوسانگر در حالت پایه $|\varphi_0\rangle$ باشد. میدان الکتریکی در میان لحظه های 0 و T اثر کرده و سپس صفر می شود. هنگامی که $t > T$ است، تحول اندازه های میانگین $\langle X \rangle(t)$ و $\langle P \rangle(t)$ چگونه است؟ کار برد: فرض کنیم که در میان لحظه های 0 و T ، میدان $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \cos(\omega' t)$ داده شود. درباره پدیده های مشاهده شده (تشدید)، برحسب $\omega' - \omega = \Delta\omega$ بحث کنید. اگر در لحظه $t > T$ انرژی را اندازه گیریم، چه نتایجی با چه احتمالهایی می توان به دست آورد؟

۷. یک نوسانگر هماهنگ یک بعدی را با هامیلتونی H و حالتهای مانای $|\varphi_n\rangle$ در نظر می گیریم

$$H |\varphi_n\rangle = (n + 1/2)\hbar\omega |\varphi_n\rangle$$

عملگر $U(k)$ را با

$$U(k) = e^{ikX}$$

تعریف می کنیم که در آن k عددی حقیقی است.

الف) آیا $U(k)$ یکانی است؟ نشان دهید که n هر چه باشد، عنصرهای ماتریس آن از رابطه زیر پیروی می‌کند

$$\sum_{n'} |\langle \varphi_n | U(k) | \varphi_{n'} \rangle|^2 = 1$$

ب) $U(k)$ را برحسب عملگرهای a و a^\dagger بنویسید: فرمول گلوبر [فرمول (۶۳) از مکمل BII] را به‌کار برید و $U(k)$ را به صورت حاصلضرب عملگرهای نمایی درآوردید. (ج) رابطه‌های زیر را به‌دست آورید

$$e^{\lambda a} | \varphi_0 \rangle = | \varphi_0 \rangle$$

$$\langle \varphi_n | e^{\lambda a^\dagger} | \varphi_0 \rangle = \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}$$

که در آن λ پارامتر مختلط دلخواهی است.

د) عبارتی برحسب $E_k = \hbar^2 k^2 / 2m$ و $E_\omega = \hbar\omega$ برای این عنصر ماتریس بیابید.

$$\langle \varphi_0 | U(k) | \varphi_n \rangle$$

چه رخ خواهد داد اگر k به صفر میل کند؟ آیا می‌توان این نتیجه را مستقیماً پیش‌بینی کرد؟

۸. عملگر تحول $U(t, 0)$ یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی چنین نوشته می‌شود

$$U(t, 0) = e^{-iHt/\hbar}$$

ب

$$H = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right)$$

الف) عملگرهای زیر را در نظر می‌گیریم

$$\bar{a}(t) = U^\dagger(t, 0) a U(t, 0)$$

$$\bar{a}^\dagger(t) = U^\dagger(t, 0) a^\dagger U(t, 0)$$

با محاسبه اثر آنها بر روی ویژه کتهای $\langle \varphi_n |$ عملگر H ، عبارت $\bar{a}(t)$ و $\bar{a}^\dagger(t)$ را برحسب a و a^\dagger بیابید.

ب) عملگرهای $\tilde{X}(t)$ و $\tilde{P}(t)$ را از X و P به وسیله تبدیل یکانی

$$\tilde{X}(t) = U^\dagger(t, 0) X U(t, 0)$$

$$\tilde{P}(t) = U^\dagger(t, 0) P U(t, 0)$$

به دست آورید. رابطه‌هایی که بدین ترتیب به دست می‌آیند، چگونه تعبیر می‌شوند؟

ج) نشان دهید که $U^\dagger(\frac{\pi}{\omega}, 0) | x \rangle$ ویژه بردار P با ویژه مقداری است که مشخص خواهید کرد. همچنین نشان دهید که $U^\dagger(\frac{\pi}{\omega}, 0) | p \rangle$ ویژه بردار X است.

د) در لحظه $t = 0$ ، تابع موج نوسانگر $\psi(x, 0)$ چگونه می‌توان تابع موج نوسانگر را از $\psi(x, 0)$ در لحظه‌های بعدی $t_q = q\pi/2\omega$ (که در آن q عدد درست مثبتی است) به دست آورد؟

ه) برای $\psi(x, 0)$ تابع موج $\varphi_n(x)$ وابسته به یک حالت مانا را در نظر بگیریم. از سؤال پیش، رابطه‌ای را که باید میان $\varphi_n(x)$ و تبدیل فوریه آن $\bar{\varphi}_n(p)$ وجود داشته باشد، به دست آورید.

و) تحول تابع موج را در این حالتها به طور کیفی توضیح دهید.

۱. $\psi(x, 0) = e^{ikx}$ ، عدد حقیقی داده شده‌ای است.

۲. $\psi(x, 0) = e^{-\rho x}$ ، عدد حقیقی و مثبت است.

۳.

$$\psi(x, 0) \begin{cases} = \frac{1}{\sqrt{a}} & \text{اگر } -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ = 0 & \text{هر جای دیگر} \end{cases}$$

۴. $\psi(x, 0) = e^{-\rho^2 x^2}$ ، که ρ عدد حقیقی است.

۶

خواص عمومی تکانه زاویه‌ای در مکانیک
کوانتومی

۱-۶ مقدمه: اهمیت تکانه زاویه‌ای

- ۲-۶ روابط جابه‌جایی مشخصه
تکانه‌های زاویه‌ای
- ۱-۲-۶ تکانه زاویه‌ای مداری
- ۲-۲-۶ تعمیم: تعریف یک تکانه زاویه‌ای
- ۳-۲-۶ بیان مسئله

۳-۶ نظریه عمومی تکانه زاویه‌ای

- ۱-۳-۶ تعاریف و نمادگذاریها
- الف) عملگرهای J_+ و J_-
- ب) نمادگذاری برای ویژه‌مقدارهای J^2 و J_z
- ج) معادلات ویژه‌مقداری برای J^2 و J_z
- ۲-۳-۶ ویژه‌مقدارهای J^2 و J_z
- الف) لمها
- ب) تعیین طیف J^2 و J_z
- ۳-۳-۶ نمایشهای "سنجه‌ای" $\{|k, j, m\rangle\}$
- الف) حالت‌های پایه
- ب) فضاها $\mathcal{E}(k, j)$
- ج) نمایش ماتریسی عملگرهای تکانه زاویه‌ای

۴-۶ کاربرد در تکانه زاویه‌ای مداری

- ۱-۴-۶ ویژه‌مقدارها و ویژه‌تابعهای L^2 و L_z
- الف) معادلات ویژه‌مقداری در نمایش $\{|r\rangle\}$
- ب) مقادیر l و m
- ج) خواص اساسی هماهنگ‌های کروی
- د) پایه‌های "سنجه‌ای" فضای تابع‌موجهای یک ذره بدون اسپین
- ۲-۴-۶ ملاحظات فیزیکی
- الف) مطالعه حالت $|k, l, m\rangle$
- ب) محاسبه پیش‌بینیهای فیزیکی مربوط به اندازه‌گیرهای L^2 و L_z

۱-۶ مقدمه: اهمیت تکانه زاویه‌ای

فصل حاضر اولین فصل از یک رشته فصلهایی است (۶، ۷، ۹، و ۱۰) که به مطالعه تکانه‌های زاویه‌ای در مکانیک کوانتومی اختصاص داده شده است. این موضوع مسئله فوق‌العاده مهمی است، و نتایجی که به دست خواهیم آورد، در زمینه‌های بسیار متعدد فیزیک به کار می‌روند: طبقه‌بندی طیفهای اتمی، مولکولی و هسته‌ای، اسپین ذرات بنیادی، مغناطیسی، و غیره.

تکانه زاویه‌ای در مکانیک کلاسیک نقش مهمی ایفا می‌کند؛ تکانه زاویه‌ای کل یک دستگاه فیزیکی منفرد یک "ثابت حرکت است". به علاوه، این مطلب در بعضی موارد که در آن دستگاه منفرد نیست نیز صادق است. به عنوان مثال، اگر یک نقطه مادی P ، به جرم m ، در یک پتانسیل مرکزی (پتانسیلی که فقط به فاصله بین P و یک نقطه ثابت بستگی دارد) حرکت کند، نیرویی که P تحت تأثیر آن قرار می‌گیرد، همیشه به سمت O متوجه است. در نتیجه، گشتاور آن نسبت به O صفر است، و بنابراین قضیه تکانه زاویه‌ای داریم

$$\frac{d}{dt} \mathcal{L} = 0 \quad (1-6)$$

که در آن \mathcal{L} تکانه زاویه‌ای P نسبت به O است. این واقعیت نتایج مهمی در بردارد: حرکت ذره P در یک صفحه ثابت صورت می‌گیرد (صفحه‌ای که از O گذشته و بر تکانه زاویه‌ای \mathcal{L} عمود است)؛ به علاوه، این حرکت از قانون مساحتها (قانون دوم کپلر) تبعیت می‌کند.

تمام این خواص دارای معادلهایی در مکانیک کوانتومی هستند. به تکانه زاویه‌ای \mathcal{L} یک دستگاه کلاسیکی یک مشاهده‌پذیر L_z ، یعنی در واقع مجموعه‌ای از سه مشاهده‌پذیر L_x ، L_y ، و L_z که متناظر با سه مؤلفه \mathcal{L} در چارچوب دکارتی هستند، وابسته است. در فصل ۷ خواهیم دید که اگر دستگاه فیزیکی تحت مطالعه یک نقطه متحرک در یک پتانسیل مرکزی باشد، L_x ، L_y ، و L_z به مفهوم مکانیک کوانتومی، ثابتهای حرکت‌اند، یعنی با هامیلتونی H که توصیف‌کننده ذره در پتانسیل مرکزی $V(r)$ است جابه‌جاپذیرند. این خاصیت مهم به طور قابل ملاحظه‌ای تعیین و دسته‌بندی ویژه‌حالت‌های H را ساده می‌کند.

از طرف دیگر، در فصل ۴، تجربه اشترن-گرلاخ، که "کوانتش تکانه زاویه‌ای" را آشکار می‌ساخت، تشریح کردیم؛ مؤلفه تکانه زاویه‌ای ذاتی یک اتم در امتداد یک محور ثابت می‌تواند فقط مقادیر گسسته معینی را بگیرد. خواهیم دید که تمام تکانه‌های زاویه‌ای به این طریق کوانتیده هستند. از این مطلب می‌توان مغناطیسی اتمی، اثر زیمان، و غیره را فهمید. به علاوه، تحلیل تمام این پدیده‌ها مستلزم وارد کردن "تکانه‌های زاویه‌ای نوعاً کوانتومی هستند، و هیچ معادل کلاسیکی ندارند" (تکانه‌های زاویه‌ای ذاتی ذرات بنیادی؛ فصل ۹).

از این به بعد، هر تکانه زاویه‌ای را که دارای یک معادل کلاسیکی باشد، "تکانه زاویه‌ای مداری" (و مشاهده‌پذیرهای مربوطه را با L_x)، و هر تکانه زاویه‌ای ذاتی یک ذره بنیادی را "تکانه زاویه‌ای اسپینی" می‌نامیم (و برای آن حرف S را انتخاب می‌کنیم). در یک دستگاه پیچیده، نظیر یک اتم، یک هسته، یا یک مولکول، تکانه زاویه‌ای مداری L_x ذرات بنیادی تشکیل‌دهنده دستگاه (الکترونها، پروتونها، نوترونها، ...) با یکدیگر و با تکانه زاویه‌ای اسپینی S_x همین ذرات ترکیب شده و "تکانه زاویه‌ای کل" J دستگاه را به وجود می‌آورند. طریقی که بر طبق آن تکانه‌های زاویه‌ای در مکانیک کوانتومی ترکیب می‌شوند (جفتیدگی تکانه‌های زاویه‌ای) در فصل ۱۰ مورد مطالعه قرار خواهد گرفت. بالاخره، این را هم اضافه کنیم که وقتی لزومی در مشخص کردن اینکه منظور یک تکانه زاویه‌ای مداری، اسپینی یا ترکیبی از چندین تکانه زاویه‌ای نباشد، می‌توان J را به‌عنوان یک تکانه زاویه‌ای اختیاری تلقی کرد.

قبل از شروع به مطالعه مسائل فیزیکی فوق‌الذکر (ترازهای انرژی یک ذره در یک پتانسیل مرکزی، اسپینی، اثر زیمان، جمع‌بندی تکانه‌های زاویه‌ای و ...)، در این فصل خواص کوانتومی عمومی وابسته به تمام تکانه‌های زاویه‌ای را، صرفنظر از طبیعت آنها، به‌دست خواهیم آورد. این خواص از روابط جابه‌جایی که در مورد سه مشاهده‌پذیر J_x ، J_y ، و J_z (مؤلفه‌های یک تکانه زاویه‌ای اختیاری J) برقرارند، حاصل می‌شود. منشأ این روابط جابه‌جایی در بخش ۲-۶ مورد بحث قرار گرفته است: برای یک تکانه زاویه‌ای مداری، این روابط همان نتایج قوانین کوانتس (بخش ۵-B فصل سوم) و روابط جابه‌جایی بُنادادی [فرمولهای (E-۳۰)] از فصل دوم هستند؛ در مورد تکانه زاویه‌ای اسپینی، که معادل کلاسیکی ندارند، این روابط برای تعریف مشاهده‌پذیرهای متناظر به‌کار می‌روند. در بخش ۳-۶، پیامدهای این روابط جابه‌جایی سرشتی تکانه‌های زاویه‌ای مورد مطالعه قرار می‌گیرند. به‌ویژه، به کوانتس فضایی، یعنی این حقیقت که هر مؤلفه تکانه زاویه‌ای دارای یک طیف گسسته است، می‌رسیم. بالاخره، در بخش ۴-۶، نتایج عمومی‌ای که به این طریق به‌دست می‌آیند، به تکانه زاویه‌ای مداری یک ذره اعمال می‌شوند.

۲-۶ روابط جابه‌جایی مشخصه تکانه‌های زاویه‌ای

۱-۲-۶ تکانه زاویه‌ای مداری

جهت به‌دست آوردن مشاهده‌پذیرهای L_x ، L_y ، و L_z وابسته به سه مؤلفه تکانه زاویه‌ای L یک ذره بدون اسپین در مکانیک کوانتومی، کافی است قوانین کوانتس بیان شده در بخش ۵-B از فصل

۱. منشأ اصلی این روابط تعویض‌پذیری به‌طور محض هندسی است. این نکته به‌طور مفصل در مکتب ۲ فصل ۶ مورد بحث قرار خواهد گرفت که در آن رابطه نزدیک بین تکانه زاویه‌ای یک سیستم نسبت به نقطه O و "دورانهای هندسی" این دستگاه حول O را نشان می‌دهیم.

سوم را به‌کار ببریم. مؤلفه \mathcal{L}_x تکانهٔ زاویه‌ای کلاسیکی را در نظر بگیریم

$$\mathcal{L}_x = yp_z - zp_y \quad (۲-۶)$$

به متغیرهای مکانی y و z ، مشاهده‌پذیرهای Y و Z و به متغیرهای تکانهٔ p_y و p_z ، مشاهده‌پذیرهای P_y و P_z را وابسته می‌کنیم. اگرچه فرمول (۲-۶) شامل حاصلضربهای دو متغیر کلاسیکی است، هنگام جایگزینی آنها توسط مشاهده‌پذیرهای متناظر، نیازی به رعایت احتیاط نیست، زیرا Y و P_z ، Z و P_y جابه‌جایی‌پذیرند [روابط جابه‌جایی بندادی (E-۳۰) از فصل دوم]. بنابراین جهت به‌دست آوردن عملگر L_x ، احتیاجی به مقارن کردن عبارت (۲-۶) نیست

$$L_x = YP_z - ZP_y \quad (۳-۶)$$

به‌همین دلیل (Y و P_z و همچنین Z و P_y جابه‌جایی‌پذیرند)، عملگری که به این طریق به‌دست می‌آید هرمیتی است.

عملگرهای L_x و L_y متناظر با مؤلفه‌های \mathcal{L}_y و \mathcal{L}_z تکانهٔ زاویه‌ای کلاسیکی نیز به‌همین طریق پیدا می‌شوند. از این‌رو می‌توان نوشت

$$\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P} \quad (۴-۶)$$

با شناسایی روابط جابه‌جایی بندادی مشاهده‌پذیرهای مکان \mathbf{R} و تکانهٔ \mathbf{P} می‌توان به‌سهولت جابه‌جاگر عملگرهای L_x ، L_y و L_z را بین آنها محاسبه کرد. به‌عنوان مثال $[L_x, L_y]$ را جستجو کنیم

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= [YP_z - ZP_y, ZP_x - XP_z] \\ &= [YP_z, ZP_x] + [ZP_y, XP_z] \end{aligned} \quad (۵-۶)$$

زیرا YP_z با XP_z و ZP_y با ZP_x جابه‌جایی‌پذیرند

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= Y[P_z, Z]P_x + X[Z, P_z]P_y \\ &= -i\hbar YP_x + i\hbar XP_y \\ &= i\hbar L_z \end{aligned} \quad (۶-۶)$$

محاسبات مشابهی، دو جابه‌جاگر دیگر را به دست می‌هند، و بالاخره داریم

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= i\hbar L_z \\ [L_y, L_z] &= i\hbar L_x \\ [L_z, L_x] &= i\hbar L_y \end{aligned} \quad (۷-۶)$$

به این طریق، روابط جابه‌جایی بین مؤلفه‌های تکانه زاویه‌ای یک ذره بدون اسپین را به دست آورده‌ایم.

این نتیجه می‌تواند به سهولت به یک دستگاه N ذره‌ای بدون اسپین تعمیم داده شود. در مکانیک کوانتومی، تکانه زاویه‌ای کل یک چنین دستگاهی عبارت است از

$$\mathbf{L} = \sum_{i=1}^N \mathbf{L}_i \quad (۸-۶)$$

با

$$\mathbf{L}_i = \mathbf{R}_i \times \mathbf{P}_i \quad (۹-۶)$$

بنابراین، هر تکانه زاویه‌ای انفرادی \mathbf{L}_i در رابطه (۷-۶) صادق بوده، و با \mathbf{L}_i به شرطی که \mathbf{z} برابر \mathbf{z}_i نباشد (عملگرهای عمل‌کننده در فضای حالت‌های ذرات مختلف)، جابه‌جاپذیر است. پس ملاحظه می‌شود که برای تکانه‌های زاویه‌ای کل \mathbf{L} ، روابط (۷-۶) معتبر می‌مانند.

۲-۲-۶ تعمیم: تعریف یک تکانه زاویه‌ای

بنابراین سه عملگر وابسته به مؤلفه‌های یک تکانه زاویه‌ای کلاسیکی اختیاری، در روابط جابه‌جایی (۷-۶) صدق می‌کنند. به علاوه، می‌توان نشان داد که (مکمل ۲ فصل ۶) منشأ این روابط در خواص هندسی دورانها در فضای سه‌بعدی واقع است. به این دلیل، با پذیرفتن یک دیدگاه عمومی‌تر، هر مجموعه‌ای از سه مشاهده‌پذیر J_x, J_y, J_z را که در روابط

$$\begin{aligned} [J_x, J_y] &= i\hbar J_z \\ [J_y, J_z] &= i\hbar J_x \\ [J_z, J_x] &= i\hbar J_y \end{aligned} \quad (۱۰-۶)$$

صدق کنند تکانهٔ زاویه‌ای \mathbf{J} می‌نامیم. اکنون عملگر زیر را که مجذور (عددی) تکانهٔ زاویه‌ای \mathbf{J} است وارد کنیم

$$\mathbf{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 \quad (۱۱-۶)$$

این عملگر هرمیتی است، زیرا J_x, J_y, J_z و J_z هرمیتی‌اند. فرض خواهیم کرد که این عملگر یک مشاهده‌پذیر است. \mathbf{J}^2 ، با سه مؤلفهٔ \mathbf{J} جابه‌جایی‌پذیر است

$$\boxed{[\mathbf{J}^2, \mathbf{J}] = 0} \quad (۱۲-۶)$$

به‌عنوان مثال، محاسبه را برای J_x انجام می‌دهیم

$$\begin{aligned} [\mathbf{J}^2, J_x] &= [J_x^2 + J_y^2 + J_z^2, J_x] \\ &= [J_y^2, J_x] + [J_z^2, J_x] \end{aligned} \quad (۱۳-۶)$$

زیرا J_x مسلماً با خودش، و بنابراین با مجذور خودش جابه‌جایی‌پذیر است. دو جابه‌جاگر دیگر به‌سهولت از (۱۰-۶) به‌دست می‌آیند

$$\begin{aligned} [J_y^2, J_x] &= J_y [J_y, J_x] + [J_y, J_x] J_y \quad (الف) \quad (۱۴-۶) \\ &= -i\hbar J_y J_z - i\hbar J_z J_y \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [J_z^2, J_x] &= J_z [J_z, J_x] + [J_z, J_x] J_z \quad (ب) \quad (۱۴-۶) \\ &= i\hbar J_z J_y + i\hbar J_y J_z \end{aligned}$$

در واقع، مجموع این دو جابه‌جاگر، که در (۱۳-۶) وارد می‌شود، صفر است. نظریهٔ تکانهٔ زاویه‌ای در مکانیک کوانتومی کاملاً بر پایهٔ روابط جابه‌جایی (۱۰-۶) استوار است. توجه کنید که این روابط می‌رسانند که غیرممکن است به‌طور هم‌زمان سه مؤلفهٔ یک تکانهٔ زاویه‌ای را اندازه گرفت؛ برعکس، \mathbf{J}^2 با هر مؤلفهٔ غیر مشخص \mathbf{J} سازگار است

۳-۲-۶ بیان مسئله

حال به مسئلهٔ ذرهٔ بدون اسپین در یک پتانسیل مرکزی، که در مقدمه ذکر شد، بر می‌گردیم. در فصل ۷ خواهیم دید که، در این مورد سه مؤلفهٔ تکانهٔ زاویه‌ای \mathbf{L} ذره با هامیلتونی H

جابه‌جایی‌پذیر است. بنابراین، این مطلب در مورد عملگر L_z^2 نیز صادق است. پس، چهار ثابت حرکت در اختیار داریم: L_x^2 ، L_y^2 ، L_z^2 و L^2 . اما این چهار عملگر همه با هم جابه‌جایی‌پذیر نیستند. برای اینکه با H یک مجموعه کامل مشاهده‌پذیرهای جابه‌جایی‌پذیر تشکیل دهیم، باید فقط L^2 و یکی از سه عملگر دیگر، به‌عنوان مثال L_z ، را انتخاب کنیم. برای ذره‌ای که تحت تأثیر یک میدان مرکزی قرار دارد، می‌توان ویژه‌حالت‌هایی از هامیلتونی H را که در عین حال ویژه‌بردارهای L^2 و L_z هستند جستجو کرد، بدون اینکه محدودیتی در عمومیت مسئله ایجاد شود. اما، غیر ممکن است پایه‌ای از فضای حالت‌هایی که از ویژه‌بردارهای مشترک سه مؤلفه L تشکیل شده است به‌دست آورد زیرا این سه مشاهده‌پذیر جابه‌جایی‌پذیر نیستند.

در حالت کلی وضع به‌همین صورت است: چون مؤلفه‌های یک تکانه زاویه‌ای اختیاری J جابه‌جایی‌پذیر نیستند، نمی‌توان به‌طور همزمان آنها را قطری کرد. پس، دستگاه ویژه‌بردارهای مشترک J^2 و J_z ، مشاهده‌پذیرهای متناظر با مربع قدرمطلق تکانه زاویه‌ای و مؤلفه آن در طول محور Oz را جستجو خواهیم کرد.

۳-۶ نظریه عمومی تکانه زاویه‌ای

در این بخش، طیف J^2 و J_z را در حالت کلی تعیین کرده و ویژه‌بردارهای مشترک آنها را مطالعه خواهیم کرد. استدلال‌ها شبیه به استدلال‌هایی خواهند بود که در فصل ۵ برای نوسانگر هماهنگ به‌کار رفته بودند.

۳-۶-۱ تعاریف و نمادگذارها

الف) عملگرهای J_+ و J_-

به جای استفاده از مؤلفه‌های J_x و J_y تکانه زاویه‌ای J ، راحت‌تر است ترکیبات خطی زیر را وارد کنیم

$$\begin{cases} J_+ = J_x + iJ_y \\ J_- = J_x - iJ_y \end{cases} \quad (15.6)$$

نظیر عملگرهای a و a^\dagger نوسانگر هماهنگ، J_+ و J_- هرمیتی نیستند، ولی الحاقی یکدیگرند.

در بقیه این بخش، فقط از عملگرهای J_+ , J_- , J_z ، و \mathbf{J}^2 استفاده می‌کنیم. از روی (۱۰-۶) و (۱۲-۶) می‌توان به سهولت نشان داد که این عملگرها در روابط جابه‌جایی زیر صدق می‌کنند

$$[J_z, J_+] = \hbar J_+ \quad (۱۶-۶)$$

$$[J_z, J_-] = -\hbar J_- \quad (۱۷-۶)$$

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z \quad (۱۸-۶)$$

$$[\mathbf{J}^2, J_+] = [\mathbf{J}^2, J_-] = [\mathbf{J}^2, J_z] = 0 \quad (۱۹-۶)$$

حال حاصلضرب J_+J_- و J_-J_+ را حساب کنیم. خواهیم یافت

$$\begin{aligned} J_+J_- &= (J_x + iJ_y)(J_x - iJ_y) \\ &= J_x^2 + J_y^2 - i[J_x, J_y] \\ &= J_x^2 + J_y^2 + \hbar J_z \end{aligned} \quad (۲۰-۶ \text{ الف})$$

$$\begin{aligned} J_-J_+ &= (J_x - iJ_y)(J_x + iJ_y) \\ &= J_x^2 + J_y^2 + i[J_x, J_y] \\ &= J_x^2 + J_y^2 - \hbar J_z \end{aligned} \quad (۲۰-۶ \text{ ب})$$

با استفاده از تعریف (۱۱-۶) برای عملگر \mathbf{J}^2 ، این عبارتها را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$J_+J_- = \mathbf{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z \quad (۲۱-۶ \text{ الف})$$

$$J_-J_+ = \mathbf{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z \quad (۲۱-۶ \text{ ب})$$

با جمع کردن طرفین روابط (۲۰-۶) داریم

$$\mathbf{J}^2 = \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) + J_z^2 \quad (۲۲-۶)$$

(ب) نمادگذاری برای ویژه‌مقدارهای J^2 و J_z

برطبق (۱۱-۶)، J^2 مجموع مربعات سه عملگر هرمیتی است. در نتیجه، برای هرکیت ψ ، عنصر ماتریسی $\langle \psi | J^2 | \psi \rangle$ مثبت یا صفر است

$$\begin{aligned} \langle \psi | J^2 | \psi \rangle &= \langle \psi | J_x^2 | \psi \rangle + \langle \psi | J_y^2 | \psi \rangle + \langle \psi | J_z^2 | \psi \rangle \\ &= \| J_x | \psi \rangle \|^2 + \| J_y | \psi \rangle \|^2 + \| J_z | \psi \rangle \|^2 \geq 0 \end{aligned} \quad (23-6)$$

توجه کنید که این خاصیت از لحاظ فیزیکی قانع‌کننده است زیرا J^2 متناظر با مربع قدرمطلق تکانه زاویه‌ای J است. از اینجا، به‌ویژه نتیجه می‌شود که "تمام ویژه‌مقدارهای J^2 مثبت یا صفرند"؛ در واقع اگر ψ ویژه‌بردار J^2 باشد، $\langle \psi | J^2 | \psi \rangle$ عبارت است از حاصلضرب ویژه‌مقدار مربوطه در مربع هنجار $\langle \psi | \psi \rangle$ ، که همیشه مثبت است.

ویژه‌بردارهای J^2 را به‌صورت $\hbar^2 j(j+1)$ خواهیم نوشت، با این "قرارداد" که

$$j \geq 0 \quad (24-6)$$

این نمادگذاری جهت سهولت استدلالهایی که به دنبال می‌آیند وارد شده است؛ و تأثیری روی نتیجه آنها ندارد. چون J دارای بعد \hbar است، یک ویژه‌مقدار J^2 به‌صورت $\lambda \hbar^2$ می‌باشد، که λ یک عدد حقیقی بدون بعد است. همان‌طور که در فوق دیدیم λ باید مثبت یا صفر باشد؛ بنابراین به‌سهولت می‌توان نشان داد که معادلهٔ درجهٔ دوم

$$j(j+1) = \lambda \quad (25-6)$$

برحسب j ، همیشه دارای یک و فقط یک ریشهٔ مثبت یا صفر است. پس اگر شرط (۲۴-۶) را اعمال کنیم، با معلوم شدن λ یک مقدار برای j خواهیم داشت. بنابراین، هر ویژه‌مقدار J^2 می‌تواند به‌صورت $\hbar^2 j(j+1)$ نوشته شود که در آن j مثبت یا صفر است.

همین‌طور در مورد ویژه‌مقدارهای J_z ، که دارای همان ابعاد \hbar هستند، به‌طور مرسوم به‌صورت $m\hbar$ نوشته می‌شوند، که m یک عدد بدون بعد است.

(ج) معادلات ویژه‌مقداری برای J^2 و J_z

ویژه‌بردارهای مشترک J^2 و J_z شاخصهای j و m که ویژه‌مقدارهای وابسته را مشخص می‌کنند، نشانه‌گذاری می‌کنیم. معذالک J^2 و J_z به‌طور کلی تشکیل یک مجموعهٔ کامل مشاهده‌پذیر

جابه‌جایی‌پذیر نمی‌دهند (به‌عنوان مثال، بخش ۷-۱ از فصل ۷ را ملاحظه کنید)، و وارد کردن یک شاخص سوم جهت تمیز بین ویژه‌بردارهای مختلف مربوط به یک ویژه‌مقدار $j(j+1)\hbar^2$ و $m\hbar$ از J^2 و J_z ضروری است (این مطلب در بخش ۳-۳ تا ۳-۶ الف زیر روشن خواهد شد). این شاخص را k می‌نامیم (که دلالت بر این نمی‌کند که لزوماً همیشه یک شاخص گسسته است). بنابراین سعی خواهیم کرد معادلات ویژه‌مقدار همزمانی زیر را حل کنیم

$$\begin{aligned} J^2 |k, j, m\rangle &= j(j+1)\hbar^2 |k, j, m\rangle \\ J_z |k, j, m\rangle &= m\hbar |k, j, m\rangle \end{aligned} \quad (۲۶-۶)$$

۲-۳-۶ ویژه‌مقدارهای J^2 و J_z

نظیر بخش ۵-۲ تا ۵-۲، با اثبات سه لیم که می‌توان از روی آن طیف J^2 و J_z را تعیین کرد، شروع خواهیم کرد.

الف) لمها

۱. لیم یک (خواص ویژه‌مقدارهای J^2 و J_z)

اگر $j(j+1)\hbar^2$ و $m\hbar$ ویژه‌مقدارهای J^2 و J_z وابسته به یک ویژه‌بردار $|k, j, m\rangle$ باشند، j و m در نامساوی زیر صدق می‌کنند

$$-j \leq m \leq j \quad (۲۷-۶)$$

جهت اثبات این لیم، بردارهای $|k, j, m\rangle$ و $|k, j, m\rangle$ را در نظر بگیریم و متذکر شویم که مربع هنجار آنها مثبت یا صفر است

$$\|J_+ |k, j, m\rangle\|^2 = \langle k, j, m | J_- J_+ |k, j, m\rangle \geq 0 \quad (الف) (۲۸-۶)$$

$$\|J_- |k, j, m\rangle\|^2 = \langle k, j, m | J_+ J_- |k, j, m\rangle \geq 0 \quad (ب) (۲۸-۶)$$

برای محاسبه طرف چپ این نامساویها، می‌توانیم از فرمولهای (۲۱-۶) استفاده کنیم. داریم (اگر

فرض کنیم $\langle k, j, m |$ بهنجار باشد)

$$\langle k, j, m | J_- J_+ | k, j, m \rangle = \langle k, j, m | (J^2 - J_z^2 - \hbar J_z) | k, j, m \rangle \quad (۲۹-۶ \text{ الف})$$

$$= j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 - m\hbar^2$$

$$\langle k, j, m | J_+ J_- | k, j, m \rangle = \langle k, j, m | (J^2 - J_z^2 + \hbar J_z) | k, j, m \rangle \quad (۲۹-۶ \text{ ب})$$

$$= j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 + m\hbar^2$$

با بردن این عبارتها در نامساویهای (۲۸-۶)، خواهیم یافت

$$j(j+1) - m(m+1) = (j-m)(j+m+1) \geq 0 \quad (۳۰-۶ \text{ الف})$$

$$j(j+1) - m(m-1) = (j-m+1)(j+m) \geq 0 \quad (۳۰-۶ \text{ ب})$$

یعنی

$$-(j+1) \leq m \leq j \quad (۳۱-۶ \text{ الف})$$

$$-j \leq m \leq j+1 \quad (۳۱-۶ \text{ ب})$$

این دو شرط در صورتی به‌طور همزمان برقرارند که m در نامساوی (۲۷-۶) صدق کند.

۲. لم دوم (خواص بردار $(J_- | k, j, m)$)

فرض می‌کنیم $| k, j, m \rangle$ یک ویژه بردار J^2 و J_z با ویژه مقادیرهای $j(j+1)\hbar^2$ و $m\hbar$ باشد.

(۱) اگر $m = -j$ باشد، $J_- | k, j, -j \rangle = 0$.

(۲) اگر $m > -j$ باشد، $J_- | k, j, m \rangle$ یک ویژه بردار غیر صفر J^2 و J_z با ویژه مقادیرهای

$j(j+1)\hbar^2$ و $(m-1)\hbar$ است.

(۱) بنابر (۲۹-۶ ب)، مربع هنجار $J_- | k, j, m \rangle$ برابر است با $\hbar^2 [j(j+1) - m(m-1)]$

و از این رو به ازای $m = -j$ صفر می‌شود. چون هنجار یک بردار، وقتی و فقط وقتی صفر است

که این بردار یک بردار صفر باشد، نتیجه می‌گیریم که تمام بردارهای $J_- | k, j, -j \rangle$ صفرند

$$m = -j \Rightarrow J_- | k, j, -j \rangle = 0 \quad (۳۲-۶)$$

به علاوه، به سهولت می‌توان معکوس (۳۱-۶) را اثبات کرد

$$J_- | k, j, m \rangle = 0 \Rightarrow m = -j \quad (۳۳-۶)$$

با اثر دادن J_+ بر دوطرف معادله (۳۳-۶) و با به‌کار بردن (۲۱-الف)، خواهیم یافت

$$\begin{aligned} \hbar^2 [j(j+1) - m^2 + m] |k, j, m\rangle \\ = \hbar^2 (j+m)(j-m+1) |k, j, m\rangle = 0 \quad (۳۴-۶) \end{aligned}$$

با در نظر گرفتن (۲۷-۶)، معادله (۳۳-۶) فقط یک جواب $m = -j$ دارد.

(۲) حال فرض می‌کنیم m بزرگتر از $-j$ باشد. برطبق (۲۹-ب)، $J_- |k, j, m\rangle$ یک بردار غیرصفر است، زیرا مربع هنجار آن مخالف صفر است. حال نشان می‌دهیم که این بردار یک ویژه‌بردار J^2 و J_z است. عملگرهای J_- و J^2 جابه‌جا می‌شوند، در نتیجه

$$[J^2, J_-] |k, j, m\rangle = 0 \quad (۳۵-۶)$$

که می‌تواند به صورت زیر نوشته شود

$$\begin{aligned} J^2 J_- |k, j, m\rangle &= J_- J^2 |k, j, m\rangle \\ &= j(j+1)\hbar^2 J_- |k, j, m\rangle \quad (۳۶-۶) \end{aligned}$$

این عبارت بیان می‌دارد که $J_- |k, j, m\rangle$ ویژه‌بردار J^2 با ویژه‌مقدار $j(j+1)\hbar^2$ است. از طرف دیگر، اگر معادله عملگری (۱۷-۶) را به $|k, j, m\rangle$ اثر دهیم، داریم

$$[J_z, J_-] |k, j, m\rangle = -\hbar J_- |k, j, m\rangle \quad (۳۷-۶)$$

در نتیجه

$$\begin{aligned} J_z J_- |k, j, m\rangle &= J_- J_z |k, j, m\rangle - \hbar J_- |k, j, m\rangle \\ &= m\hbar J_- |k, j, m\rangle - \hbar J_- |k, j, m\rangle \\ &= (m-1)\hbar J_- |k, j, m\rangle \quad (۳۸-۶) \end{aligned}$$

بنابراین $J_- |k, j, m\rangle$ ویژه‌بردار با ویژه‌مقدار $(m-1)\hbar$ است.

۳. لم سوم (خواص بردار $(J_+ | k, j, m\rangle)$

فرض می‌کنیم $| k, j, m\rangle$ یک ویژه بردار J^2 و J_z با ویژه مقادیرهای $j(j+1)\hbar^2$ و $m\hbar$ باشد.

(۱) اگر $j = m$ باشد، داریم $J_+ | k, j, j\rangle = 0$.

(۲) اگر $m < j$ باشد، $J_+ | k, j, m\rangle$ یک ویژه بردار غیر صفر J^2 و J_z با ویژه مقادیرهای

$j(j+1)\hbar^2$ و $(m+1)\hbar$ است.

(۱) استدلال نظیر استدلال قبلی (بخش ۶-۳-۲ قسمت الف-۲) است. برطبق (۶-۲۸ الف)،

اگر $j = m$ باشد، مربع هنجار $J_+ | k, j, m\rangle$ صفر است. بنابراین

$$m = j \Rightarrow J_+ | k, j, j\rangle = 0 \quad (۶-۳۹)$$

به همین طریق معکوس آن، یعنی

$$J_+ | k, j, m\rangle = 0 \iff m = j \quad (۶-۴۰)$$

اثبات می‌شود.

(۲) اگر $m < j$ باشد، استدلالی نظیر استدلال قسمت ۲ لم دوم، با استفاده از فرمولهای (۶-۱۹)

و (۶-۱۶)، می‌دهد

$$J^2 J_+ | k, j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 J_+ | k, j, m\rangle \quad (۶-۴۱)$$

$$J_z J_+ | k, j, m\rangle = (m+1)\hbar J_+ | k, j, m\rangle \quad (۶-۴۲)$$

(ب) تعیین طیف J^2 و J_z

حال نشان خواهیم داد که از سه لم فوق می‌توان مقادیر ممکن j و m را به دست آورد. فرض

می‌کنیم $| k, j, m\rangle$ یک ویژه بردار غیر صفر J^2 و J_z با ویژه مقادیرهای $j(j+1)\hbar^2$ و $m\hbar$ باشد.

برطبق لم اول، داریم: $j \leq m \leq -j$. بنابراین مطمئناً یک صحیح مثبت یا صفر وجود دارد،

به طوری که

$$-j \leq m - p < -j + 1 \quad (۶-۴۳)$$

رشته بردارهایی را در نظر بگیرید

$$| k, j, m\rangle, J_- | k, j, m\rangle, \dots, (J_-)^p | k, j, m\rangle \quad (۶-۴۴)$$

برطبق لم دوم، هر بردار $(J_-)^n | k, j, m \rangle$ این رشته $(n = 0, 1, \dots, p)$ یک ویژه‌بردار غیرصفر J_z و J^2 با ویژه‌مقدارهای $j(j+1)\hbar^2$ و $(m-n)\hbar$ است.

اثبات به طریقی تکراری انجام می‌گیرد. بنا به فرض، $| k, j, m \rangle$ غیرصفر بوده و متناظر با ویژه‌مقدارهای $j(j+1)\hbar^2$ ، $m\hbar$ است و $(J_-)^n | k, j, m \rangle$ از تأثیر J_- روی $(J_-)^{n-1} | k, j, m \rangle$ ، که ویژه‌بردار J_z و J^2 با ویژه‌مقدارهای $j(j+1)\hbar^2$ و $(m-n+1)\hbar$ است، به دست می‌آید. این ویژه‌مقدار آخری دقیقاً بیشتر از $-j$ است، زیرا بر طبق (۴۳-۶) داریم

$$m - n + 1 \geq m - p + 1 \geq -j + 1 \quad (45-6)$$

از نکته (۲) لم دوم، نتیجه می‌شود که $(J_-)^n | k, j, m \rangle$ ویژه‌بردار غیرصفر J_z و J^2 است و ویژه‌مقدارهای متناظر عبارت‌اند از $j(j+1)\hbar^2$ و $(m-n)\hbar$.

حال J_- را روی $(J_-)^p | k, j, m \rangle$ اثر می‌دهیم. ابتدا فرض کنیم که ویژه‌مقدار $(m-p)\hbar$ عملگر J_z وابسته به بردار $(J_-)^p | k, j, m \rangle$ ، دقیقاً بیشتر از $-j\hbar$ است، یعنی

$$m - p > -j \quad (46-6)$$

در این صورت از نکته (۲) لم دوم نتیجه می‌شود که $J_-(J_-)^p | k, j, m \rangle$ غیرصفر بوده و متناظر با ویژه‌مقدارهای $j(j+1)\hbar^2$ و $(m-p-1)\hbar$ است. این متناقض با لم اول است زیرا، بر طبق (۴۳-۶) داریم

$$m - p - 1 < -j \quad (47-6)$$

بنابراین لزوماً باید $(m-p)$ برابر $-j$ باشد. در این مورد، $(J_-)^p | k, j, m \rangle$ متناظر با ویژه‌مقدار $-j$ از J_z است، و برطبق نکته (۱) از لم دوم، $J_-(J_-)^p | k, j, m \rangle$ صفر است. بنابراین، رشته بردارهای (۴۴-۶) که از تأثیر مکرر J_- روی $| k, j, m \rangle$ به دست می‌آید، محدود است و دیگر تناقضی با لم اول وجود ندارد.

بنابراین، در بالا نشان دادیم که یک عدد صحیح مثبت یا صفر p وجود دارد، به طوری که

$$m - p = -j \quad (48-6)$$

یک استدلال کاملاً مشابه با استدلال پیشین ما را قادر می‌سازد تا به کمک لم سوم ثابت کنیم

۳۵۶ خواص عمومی تکانه زاویه‌ای در مکانیک کوانتومی

یک عدد درست مثبت یا صفر q وجود دارد به طوری که

$$m + q = j \quad (۴۹-۶)$$

زیرا یک رشته بردارهای

$$|k, j, m\rangle, J_+ |k, j, m\rangle, \dots, (J_+)^q |k, j, m\rangle \quad (۵۰-۶)$$

باید محدود باشند تا تناقضی با لم اول پیش نیاید.

با ترکیب (۴۸-۶) و (۴۹-۶)، داریم

$$p + q = 2j \quad (۵۱-۶)$$

پس j برابر با یک عدد صحیح مثبت یا صفر تقسیم بر ۲ است. از این مطلب نتیجه می‌شود که j لزوماً درست یا نیمه درست است.^۱ به علاوه، اگر یک بردار غیرصفر $|k, j, m\rangle$ وجود داشته باشد، تمام بردارهای رشته‌های (۴۴-۶) و (۴۹-۶) نیز غیرصفرند، همچنین ویژه‌بردارهای J^2 با ویژه‌مقدار $\hbar^2 j(j+1)$ و ویژه‌بردارهای J_z با ویژه‌مقدارهای

$$-j\hbar, (-j+1)\hbar, (-j+2)\hbar, \dots, (j-2)\hbar, (j-1)\hbar, j\hbar \quad (۵۲-۶)$$

نتایج به دست آمده را می‌توانیم به طریق زیر خلاصه کنیم

فرض کنیم J یک تکانه زاویه‌ای اختیاری باشد، که از روابط جابه‌جایی (۱۰-۶)

تبعیت کند. اگر $\hbar^2 j(j+1)$ و $m\hbar$ معرف ویژه‌مقدارهای J^2 و J_z باشند، پس

- تنها مقادیر ممکن برای j اعداد درست، نیمه درست مثبت یا صفر هستند، یعنی: $0, 1/2, 1, 3/2, 2, \dots$ (این مقادیر تنها مقادیر ممکن هستند، ولی لزوماً تمام آنها برای تمام تکانه‌های زاویه‌ای محقق نمی‌شوند).

- برای یک مقدار ثابت j ، تنها مقادیر ممکن برای m عبارت‌اند از $(2j+1)$ عدد $-j, -j+1, \dots, j-1, j$ ؛ پس اگر j عدد درست یا نیمه درست باشد، m نیز درست یا نیمه درست خواهد بود. اگر یکی از این مقادیر m محقق شود، تمام مقادیر m محقق می‌شود.

۱. عددی را نیمه درست گویند که برابر یک عدد فرد تقسیم بر ۲ باشد.

۳-۳-۶ نمایشهای "سنجدهای" $\{|k, j, m\rangle\}$

اکنون به مطالعه ویژه‌بردارهای مشترک J^2 و J_z پردازیم. این ویژه‌بردارها تشکیل پایه‌ای در فضای حالتها می‌دهند، زیرا بنا به فرض J^2 و J_z مشاهده‌پذیرند.

الف) حالت‌های پایه

تکانه زاویه‌ای J را که در فضای حالت‌های \mathcal{E} عمل می‌کند در نظر می‌گیریم، نشان خواهیم داد که چطور می‌توان، در \mathcal{E} ، یک پایه راست‌هنجار مرکب از ویژه‌بردارهای مشترک J^2 و J_z ساخت.

یک جفت ویژه‌مقدار $\hbar^2 j(j+1)$ و $m\hbar$ را، که در مورد خاص بررسی شده محقق شدند، در نظر بگیریم. مجموعه ویژه‌بردارهای وابسته به این جفت ویژه‌مقدار تشکیل یک زیرفضای برداری در \mathcal{E} می‌دهد که آن را با $\mathcal{E}(j, m)$ مشخص می‌کنیم؛ بعد $g(j, m)$ این زیرفضا از پیش بیشتر از ۱ است، زیرا J^2 و J_z عموماً تشکیل یک مجموعه کامل مشاهده‌پذیر جابه‌جاپذیر می‌دهند. در $\mathcal{E}(j, m)$ یک پایه راست‌هنجار اختیاری $\{|k, j, m\rangle; k = 1, 2, \dots, g(j, m)\}$ انتخاب می‌کنیم.

اگر m برابر j نباشد، لزوماً یک زیرفضای $\mathcal{E}(j, m+1)$ دیگری در \mathcal{E} ، مرکب از ویژه‌بردارهای J^2 و J_z وابسته به ویژه‌مقدارهای $\hbar^2 j(j+1)$ و $(m+1)\hbar$ وجود دارد. همچنین، اگر m برابر $-j$ نباشد، یک زیرفضای $\mathcal{E}(j, m-1)$ وجود دارد. در موردی که m برابر j یا $-j$ نباشد، از روی پایه‌ای که در $\mathcal{E}(j, m)$ انتخاب کرده بودیم، یک پایه راست‌هنجار در $\mathcal{E}(j, m+1)$ و در $\mathcal{E}(j, m-1)$ می‌سازیم.

ابتدا نشان می‌دهیم که، اگر k_1 برابر k_2 نباشد، $J_+ |k_1, j, m\rangle$ و $J_+ |k_2, j, m\rangle$ و همچنین $J_- |k_1, j, m\rangle$ و $J_- |k_2, j, m\rangle$ متعامدند. می‌توان حاصلضرب برداری $J_\pm |k_1, j, m\rangle$ و $J_\pm |k_2, j, m\rangle$ را با استفاده از فرمولهای (۲۱-۶) پیدا کرد

$$\begin{aligned} \langle k_2, j, m | J_\mp J_\pm | k_1, j, m \rangle &= \langle k_2, j, m | (J^2 - J_z^2 \mp \hbar J_z) | k_1, j, m \rangle \\ &= [j(j+1) - m(m \pm 1)] \hbar^2 \langle k_2, j, m | k_1, j, m \rangle \end{aligned} \quad (۵۳-۶)$$

پس، اگر $k_1 \neq k_2$ باشد، این حاصلضربهای برداری صفرند، زیرا پایه $\mathcal{E}(j, m)$ راست‌هنجار است. برای $k_1 = k_2$ ، مربع هنجار $J_\pm |k_1, j, m\rangle$ برابر می‌شود با

$$[j(j+1) - m(m \pm 1)] \hbar^2$$

حال مجموعه $g(j, m)$ بردار را که به صورت زیر تعریف شده‌اند در نظر بگیریم

$$|k, j, m + 1\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}} J_+ |k, j, m\rangle \quad (54-6)$$

بنابر آنچه در بالا ثابت کردیم، این بردارها راست‌هنجارند. به علاوه تشکیل پایه‌ای در $\mathcal{E}(j, m + 1)$ می‌دهند. فرض می‌کنیم که در $\mathcal{E}(j, m + 1)$ برداری مثل $|\alpha, j, m + 1\rangle$ وجود دارد که بر تمام $|k, j, m + 1\rangle$ حاصل از (54-6) عمود است. بردار $J_- |\alpha, j, m + 1\rangle$ نمی‌تواند صفر باشد، زیرا $(m + 1)$ نمی‌تواند برابر $-j$ باشد؛ این بردار متعلق به $\mathcal{E}(j, m)$ بوده و بر تمام بردارهای $|k, j, m + 1\rangle$ عمود خواهد بود؛ برطبق (54-6)، بردار $J_- |k, j, m + 1\rangle$ متناسب با $J_- J_+ |k, j, m\rangle$ ، یعنی $|k, j, m\rangle$ است [فرمول (6-20)ب]. بنابراین، $J_- |\alpha, j, m + 1\rangle$ بردار غیرصفری از $\mathcal{E}(j, m)$ خواهد بود که بر تمام بردارهای پایه $\{|k, j, m\rangle\}$ عمود است، و این غیر ممکن است. در نتیجه، مجموعه بردارهای (54-6) یک پایه در $\mathcal{E}(j, m + 1)$ تشکیل می‌دهند. با استدلالی کاملاً مشابه با استدلال پیشین، می‌توان نشان داد که بردارهای $|k, j, m - 1\rangle$ توسط

$$|k, j, m - 1\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}} J_- |k, j, m\rangle \quad (55-6)$$

تعریف می‌شوند، یک پایه راست‌هنجار در $\mathcal{E}(j, m - 1)$ تشکیل می‌دهند.

به‌ویژه ملاحظه می‌شود که، بعد زیرفضاهای $\mathcal{E}(j, m + 1)$ و $\mathcal{E}(j, m - 1)$ برابر با بعد $\mathcal{E}(j, m)$ است. به عبارت دیگر، این بعد مستقل از m است^۱

$$g(j, m + 1) = g(j, m - 1) = g(j, m) = g(j) \quad (56-6)$$

در این صورت به روش زیر عمل می‌کنیم. برای هر مقدار j که در مسئله مورد نظر محقق می‌شود، یکی از زیرفضاهای وابسته به این مقدار j ، به‌عنوان مثال، $\mathcal{E}(j, j)$ را که متناظر با $j = m$ است، انتخاب می‌کنیم. در این زیرفضا یک پایه راست‌هنجار دلخواه: $\{|k, j, j\rangle; k = 1, 2, \dots, g(j)\}$ انتخاب می‌کنیم. سپس با استفاده از فرمول (55-6)، به طریق تکراری، پایه‌ای که هر کدام از j زیرفضای دیگر $\mathcal{E}(j, m)$ در آن آورده خواهند شد، می‌سازیم؛ پیکانه‌های جدول ۱-۶ روش به‌کار رفته را به‌طور طرحوار نشان می‌دهند. با بررسی تمام مقادیر j که

۱. اگر این بعد بینهایت باشد، باید نتیجه را به‌صورت زیر تفسیر کرد: بین بردارهای پایه دو زیرفضای مربوط به یک مقدار j یک تناظر یک‌به‌یک وجود دارد.

جدول ۱ نمایش طرحوار ساختن $g(j)(2j+1)$ بردار یک "پایه سنجهای" وابسته به یک مقدار ثابت j ; با تأثیر J_- روی هر کدام از $g(j)$ بردار $|k, j, j\rangle$ در اولین سطر، $(2j+1)$ بردار همان ستون ساخته می‌شود.

هر زیرفضای $\mathcal{E}(j, m)$ از $g(j)$ بردار واقع در یک سطر پدید می‌آید. برعکس، برای پدید آوردن هر زیرفضای $\mathcal{E}(k, j)$ باید $(2j+1)$ بردار یک ستون را در نظر گرفت.

$g(j)$ مقدار مختلف از k

		$k = 1, 2, \dots, g(j)$		
		$ 1, j, j\rangle$	$ 2, j, j\rangle \dots$	$ g(j), j, j\rangle$
		$\Downarrow J_-$	$\Downarrow J_-$	$\Downarrow J_-$
		$ 1, j, j-1\rangle$	$ 2, j, j-1\rangle \dots$	$ g(j), j, j-1\rangle$
		$\Downarrow J_-$	$\Downarrow J_-$	$\Downarrow J_-$
		\vdots	\vdots	\vdots
$(2j+1)$ فضای $\mathcal{E}(j, m)$	$\left\{ \begin{array}{l} \Downarrow J_- \\ \Downarrow J_- \\ \vdots \\ \Downarrow J_- \\ \vdots \end{array} \right.$	$ 1, j, m\rangle$	$ 2, j, m\rangle \dots$	$ g(j), j, m\rangle$
		$\Downarrow J_-$	$\Downarrow J_-$	$\Downarrow J_-$
		\vdots	\vdots	\vdots
		$ 1, j, -j\rangle$	$ 2, j, -j\rangle \dots$	$ g(j), j, -j\rangle$
		$\mathcal{E}(k=1, j)$	$\mathcal{E}(k=2, j)$	$\mathcal{E}(k=g(j), j)$
		$\mathcal{E}(k, j)$ فضای $g(j)$		

در مسئله مورد مطالعه محقق می‌شوند، به این صورت، به جایی می‌رسیم که آنرا "پایه سنجهای" فضای حالت‌های \mathcal{E} می‌نامند. روابط راست‌هنجاری و بستاری برای چنین پایهای عبارت‌اند از

$$\langle k, j, m | k', j', m' \rangle = \delta_{kk'} \delta_{jj'} \delta_{mm'} \quad (الف) \quad (۵۷-۶)$$

$$\sum_j \sum_{m=-j}^{+j} \sum_{k=1}^{g(j)} |k, j, m\rangle \langle k, j, m| = 1 \quad (ب) \quad (۵۷-۶)$$

یادداشت:

۱. استفاده از فرمول (۵۵-۶) انتخاب فازی را ایجاب می‌کند: بردارهای پایه در $\mathcal{E}(j, m-1)$ با ضریب تناسبی حقیقی و مثبت، متناسب با بردارهای حاصل از عمل J_- روی پایه $\mathcal{E}(j, m)$ انتخاب می‌شوند.

۲. فرمولهای (۵۴-۶) و (۵۵-۶) با یکدیگر سازگارند. در واقع، اگر J_+ را بر هر دو طرف (۵۵-۶) اعمال کنیم و فرمول (۶-۲۱الف) را به حساب آوریم، (۶-۵۳) را باز می‌یابیم [که در آن به جای m مقدار $(m-1)$ جانشین شده است]. این بخصوص می‌رساند که، مجبور نیستیم، نظیر آنچه که انجام داده‌ایم، از مقدار ماکزیموم $m = j$ و تنها فرمول (۵۵-۶) جهت ساختن پایه‌های زیرفضاهای $\mathcal{E}(j, m)$ مربوط به یک مقدار معین j ، شروع کنیم. ■

در بیشتر موارد، به منظور تعیین یک پایهٔ سنجهای، از مشاهده‌پذیرهای A و B که با سه مؤلفه \mathbf{J} جابه‌جایی‌پذیرند و با J^2 و J_z یک مجموعهٔ کامل مشاهده‌پذیر جابه‌جایی‌پذیر می‌دهند، استفاده می‌کنیم^۱ (از این مورد یک مثال واقعی در بخش ۷-۱ فصل ۷ خواهیم دید)

$$[A, \mathbf{J}] = [B, \mathbf{J}] = \dots = 0 \quad (58-6)$$

برای سهولت فرض خواهیم کرد که فقط یکی از این مشاهده‌پذیرها، A ، جهت ساختن یک مجموعهٔ کامل مشاهده‌پذیر جابه‌جایی‌پذیر با J^2 و J_z کافی است. تحت این شرایط، هرکدام از زیرفضاهای $\mathcal{E}(j, m)$ که در بالا تعریف شده‌اند، تحت عمل A کلاً نادر می‌باشند: اگر $|\psi_{j,m}\rangle$ یک بردار اختیاری $\mathcal{E}(j, m)$ باشد، $A|\psi_{j,m}\rangle$ برطبق (۵۸-۶)، هنوز ویژه‌بردار J^2 و J_z ، با همان ویژه‌مقدارهای متناظر با خود $|\psi_{j,m}\rangle$ است:

$$\begin{aligned} J^2 A |\psi_{j,m}\rangle &= A J^2 |\psi_{j,m}\rangle = j(j+1)\hbar^2 A |\psi_{j,m}\rangle \\ J_z A |\psi_{j,m}\rangle &= A J_z |\psi_{j,m}\rangle = m\hbar A |\psi_{j,m}\rangle \end{aligned} \quad (59-6)$$

بنابراین، $A|\psi_{j,m}\rangle$ نیز به $\mathcal{E}(j, m)$ متعلق است. حال اگر یک مقدار j را انتخاب کنیم، می‌توانیم A را در داخل زیرفضای مربوطه $\mathcal{E}(j, j)$ قطری کنیم. ویژه‌مقدارهای مختلفی که به این طریق پیدا می‌شوند با $\alpha_{k,j}$ نمایش می‌دهیم: شاخص j نشان می‌دهد که در چه فضای $\mathcal{E}(j, j)$ این ویژه‌مقدارها به دست آمده‌اند، و شاخص k (که برای سهولت گسسته فرض می‌شود) تمیز آنها را از یکدیگر ممکن می‌سازد. به هر ویژه‌مقدار $\alpha_{k,j}$ ، تنها (که به صورت $|\hbar k, j, j\rangle$ نوشته می‌شود) یک بردار وابسته است، زیرا A و J^2 و J_z بنا به فرض یک مجموعهٔ کامل مشاهده‌پذیر جابه‌جایی‌پذیر تشکیل می‌دهند

$$A |\hbar k, j, j\rangle = \alpha_{k,j} |\hbar k, j, j\rangle \quad (60-6)$$

۱. عملگری را که با سه مؤلفه تکانه زاویه‌ای کل یک دستگاه فیزیکی جابه‌جایی‌پذیر است، "عملگر برداری" گویند (مکمل ۲ فصل ۶).

مجموعه $\{ |k, j, z\rangle \}$ که در آن z ثابت است و $\{k = 1, 2, \dots, g(j)\}$ پایه راست هنجار در $\mathcal{E}(j, z)$ تشکیل می‌دهد، که از روی آن، با استفاده از روش فوق‌الذکر، پایه‌ای در زیرفضاهای دیگر $\mathcal{E}(j, m)$ وابسته به مقدار انتخاب شده z می‌سازیم. با به‌کار بردن این روش به‌طور یبایی برای تمام مقادیر z ، به یک پایه "سنجه‌ای" $\{ |k, j, m\rangle \}$ از فضای حالتها می‌رسیم، که تمام بردارهای آن، ویژه‌حالتهای نه‌تنها J_z و J_x بلکه A نیز هستند

$$A |k, j, m\rangle = \alpha_{k,j} |k, j, m\rangle \quad (۶۱-۶)$$

این مطلب را می‌توان به روش زیر نشان داد. اگر فرض $(۵۸-۶)$ برقرار باشد، A با J_- جابه‌جا می‌شود و می‌رساند که $\{ |k, j, z\rangle | J_- |k, j, z\rangle = (z-1) |k, j, z\rangle$ ویژه‌بردار A با همان ویژه‌مقدار مربوط به $\{ |k, j, z\rangle \}$ است

$$AJ_- |k, j, z\rangle = J_- A |k, j, z\rangle = a_{k,j} J_- |k, j, z\rangle \quad (۶۲-۶)$$

با تکرار این استدلال، می‌توان به سهولت تساوی $(۶۰-۶)$ را ثابت کرد.

یادداشتها:

۱. یک مشاهده‌پذیر که با J_z و J_x جابه‌جا نمی‌شود، لزوماً با J_x و J_y جابه‌جایی‌پذیر نیست (J_z) خودش یک نمونه است). در نتیجه، برای تشکیل یک مجموعه کامل مشاهده‌پذیر جابه‌جایی‌پذیر با J_z و J_x ، انتخاب مشاهده‌پذیرهایی که با سه مؤلفه J ، نظیر $(۵۸-۶)$ ، جابه‌جایی‌پذیر باشد، الزامی نیست. مع‌ذالک، اگر A با J_+ و J_- (یعنی با J_x و J_y) جابه‌جایی‌پذیر نباشد، $\{ |k, j, m\rangle | J_{\pm} |k, j, m\rangle$ لزوماً ویژه‌بردار A با همان ویژه‌مقدار مربوط به $\{ |k, j, m\rangle \}$ نیست.
۲. طیف A در تمام زیرفضاهای $\mathcal{E}(j, m)$ وابسته به یک مقدار z یکسان است. مع‌ذالک، ویژه‌مقدارهای $a_{k,j}$ عموماً به z بستگی دارند (این نکته توسط یک مثال واقعی در بخشهای ۷-۱ و ۷-۳ از فصل ۷ روشن خواهد شد).

ب) فضاهای $\mathcal{E}(k, j)$

در قسمت قبل، یک "پایه سنجه‌ای" از فضای حالتها را، با شروع از یک پایه انتخابی در زیرفضای $\mathcal{E}(j, m = j)$ و ساختن پایه‌ای از $\mathcal{E}(j, m = j-1)$ ، سپس از $\mathcal{E}(j, m = j-2)$ ، ...، $\mathcal{E}(j, m)$ ، و غیره، وارد کردیم. فضای حالتها می‌تواند به‌عنوان یک حاصل جمع مستقیم از تمام زیرفضاهای راست‌هنجار $\mathcal{E}(j, m)$ تلقی شود، که در آن m با پرشهای درست از $j-$ تا $j+$ تغییر می‌کند و z تمام مقادیر محقق شده در مسئله مورد مطالعه را می‌گیرد. از این مطلب استنباط می‌شود که هر بردار \mathcal{E} می‌تواند به یک و فقط یک طریق به‌صورت جمع بردارهایی که هر کدام از آنها متعلق به یک زیرفضای معین $\mathcal{E}(j, m)$ باشد، نوشته شود.

مع‌ذالك، استفاده از زیرفضاهای $\mathcal{E}(j, m)$ اشکالاتی تولید می‌کند. اول از همه، بعد $g(j)$ آنها لزوماً شناخته شده نیست و بستگی به دستگاه فیزیکی مورد مطالعه دارد. به‌علاوه، زیرفضاهای $\mathcal{E}(j, m)$ تحت عمل J ناوردا نیستند زیرا، حتی با ساختن بردارهای (k, j, m) ، عملگرهای J_+ و J_- بین بردارهای $\mathcal{E}(j, m)$ و بردارهای $\mathcal{E}(j, m \pm 1)$ دارای عناصر ماتریسی غیرصفر هستند.

بنابراین، زیرفضاهای دیگر \mathcal{E} ، فضاهای $\mathcal{E}(k, j)$ ، را وارد خواهیم کرد. برای این‌کار، به‌جای هم‌گروه کردن کیت‌های (k, j, m) با شاخصهای ثابت j و m که $\mathcal{E}(j, m)$ را به‌وجود می‌آورند، مجموعه کیت‌هایی که برای آنها k و j مقادیر معینی دارند را هم‌گروه می‌کنیم، و زیرفضایی را که ایجاد می‌کنند $\mathcal{E}(k, j)$ می‌نامیم. این عمل به‌واسطه کردن $(j+1)$ بردار یک ستونی، در جدول ۶-۱، به یکدیگر منجر می‌شود [به‌جای $g(j)$ بردار یک سطری].

در این صورت \mathcal{E} به‌صورت جمع مستقیم زیرفضاهای متعامد $\mathcal{E}(k, j)$ ، که خواص ساده‌تر زیر را دارند، در می‌آید:

— برای هر مقدار k و هر دستگاه فیزیکی تحت مطالعه، بُعد $\mathcal{E}(k, j)$ برابر $(2j+1)$ است.

— $\mathcal{E}(k, j)$ تحت عمل J کلاً ناورداست: هر مؤلفه J_μ از J [یا یک تابع $F(J)$ از J]، با عمل روی یک کیت $\mathcal{E}(k, j)$ ، تولید کیت دیگری می‌کند که به $\mathcal{E}(k, j)$ متعلق است.^۱ به‌دست آوردن این نتیجه مشکل نیست، زیرا J_μ [یا $F(J)$] همیشه می‌تواند برحسب J_+ ، J_- و J_z بیان شود؛ J_z با عمل روی (k, j, m) یک کیت متناسب با (k, j, m) ؛ J_+ یک کیت متناسب با $(k, j, m+1)$ ؛ و J_- یک کیت متناسب با $(k, j, m-1)$ تولید می‌کنند. بنابراین خاصیت مذکور از ساختن "پایه سنج‌های" $\{(k, j, m)\}$ حاصل می‌شود.

ج) نمایش ماتریسی عملگرهای تکانه زاویه‌ای

استفاده از زیرفضاهای $\mathcal{E}(k, j)$ ، جستجوی ماتریسی را که، در یک "پایه سنج‌های"، مؤلفه J_μ از J [یا یک تابع اختیاری $F(J)$] را نمایش دهد، به‌طور قابل ملاحظه‌ای ساده می‌کند. عناصر این ماتریس بین دو کیت پایه متعلق به دو زیرفضای مختلف $\mathcal{E}(k, j)$ صفرند. بنابراین، این ماتریس

۱. همچنین می‌توان به سهولت نشان داد که $\mathcal{E}(k, j)$ نسبت به J "ساده‌نشده‌نی" است: برای $\mathcal{E}(k, j)$ ، زیرفضایی غیر از خود $\mathcal{E}(k, j)$ که تحت عمل مؤلفه‌های مختلف J کلاً ناوردا باشد وجود ندارد.

دارای شکل زیر است

	$\mathcal{E}(k, j)$	$\mathcal{E}(k', j)$	$\mathcal{E}(k', j')$...
$\mathcal{E}(k, j)$	ماتریس $(2j+1) \times (2j+1)$	•	•	•
$\mathcal{E}(k', j)$	•	ماتریس $(2j+1) \times (2j+1)$	•	•
$\mathcal{E}(k', j')$	•	•	ماتریس $(2j'+1) \times (2j'+1)$	•
⋮	•	•	•	•

(۶۳-۶)

لذا کاری که باید انجام دهیم آن است که ماتریسهای با ابعاد معینی را که نشاندهنده عملگر مورد نظر در داخل هر کدام از زیرفضاهای $\mathcal{E}(k, j)$ است، محاسبه کنیم.

سادگی بسیار مهم دیگر از این حقیقت ناشی می‌شود که هر کدام از این زیرماتریسهای معین مستقل از k و دستگاه فیزیکی تحت مطالعه است؛ این، ماتریسها فقط به j و، البته به عملگری که می‌خواهیم نشان دهیم، بستگی دارد. در واقع، توجه کنید که تعریف $|k, j, m\rangle$ [معادله‌های (۲۷-۶)، (۵۴-۶) و (۵۵-۶)] می‌رساند که

$$\begin{aligned}
 J_z |k, j, m\rangle &= m\hbar |k, j, m\rangle \\
 J_+ |k, j, m\rangle &= \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)} |k, j, m+1\rangle \\
 J_- |k, j, m\rangle &= \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)} |k, j, m-1\rangle
 \end{aligned}
 \tag{۶۴-۶}$$

یعنی

$$\begin{aligned}
 \langle k, j, m | J_z | k', j', m' \rangle &= m\hbar \delta_{kk'} \delta_{jj'} \delta_{mm'} \\
 \langle k, j, m | J_{\pm} | k', j', m' \rangle &= \hbar\sqrt{j(j+1) - m'(m' \pm 1)} \delta_{kk'} \delta_{jj'} \delta_{m, m' \pm 1}
 \end{aligned}
 \tag{۶۵-۶}$$

این روابط نشان می‌دهند که عناصر ماتریسی معرف مؤلفه‌های J فقط به j و m بستگی دارند و نه به k .

پس برای اینکه، در تمام موارد، ماتریسهای وابسته به یک مؤلفه اختیاری J_{μ} در یک پایهٔ سنجهای را بدانیم، تنها کاری که باید بکنیم، آن است که یک بار برای تهیهٔ ماتریسهای "همه جایی" $(J_{\mu})^{(j)}$ را که معرف J_{μ} در داخل زیرفضاهای $\mathcal{E}(k, j)$ برای تمام مقادیر ممکن $j (j = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots)$ هستند محاسبه کنیم. وقتی یک دستگاه فیزیکی بخصوص و تکانهٔ زاویه‌ای J آنرا مطالعه می‌کنیم، مقادیر j پیدا شده در مسئله، و تعداد زیرفضاهای $\mathcal{E}(k, j)$ وابسته به هر کدام از آنها را [یعنی، درجه واگنی $g(j)$] تعیین خواهیم کرد. می‌دانیم که ماتریس معرف J_{μ} در این مورد خاص، دارای شکل "تکه-قطری" (۶۳-۶) است، و بنابراین می‌توانیم آنرا از ماتریسهای "همه جایی" که در فوق تعریف کردیم بسازیم: برای هر مقدار j ، $g(j)$ "تکه" یکسان با $(J_{\mu})^{(j)}$ خواهیم داشت.

اکنون چند مثال از ماتریسهای J_{μ} بیاوریم:

$$j = 0 \quad (1)$$

زیرفضاهای $(k, j = 0)$ یک‌بعدی هستند، زیرا صفر تنها مقدار ممکن برای m است. بنابراین، ماتریسهای $(J_{\mu})^{(0)}$ ، به اعداد تقلیل می‌یابند، که وانگهی بر طبق (۶۵-۶) صفرند.

$$j = 1/2 \quad (2)$$

زیرفضاهای $(k, j = 1/2)$ دوبعدی هستند $(m = 1/2 - 1/2)$. اگر بردارهای پایه را با این ترتیب انتخاب کنیم $(m = 1/2, m = -1/2)$ ، با استفاده از (۶۵-۶) داریم

$$(J_z)^{(1/2)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (66-6)$$

و

$$(J_+)^{1/2} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (J_-)^{(1/2)} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (67-6)$$

یعنی، با استفاده از (۱۵-۶)

$$(J_x)^{(1/2)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (J_y)^{(1/2)} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (68-6)$$

بنابراین، نمایش ماتریسی J^2 عبارت است از

$$(J^2)^{(1/2)} = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (۶۹-۶)$$

بدین ترتیب، ماتریسهای را پیدا می‌کنیم که، بدون توجه، در بخش ۴-۱-۲ وارد شده بودند.
 $j = 1/2$

در این صورت داریم (ترتیب بردارهای پایه: $m = +1, m = 0, m = -1$ است).

$$(J_z)^{(1)} = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (۷۰-۶)$$

$$(J_+)^{(1)} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (J_-)^{(1)} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \quad (۷۱-۶)$$

و بنابراین

$$(J_x)^{(1)} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (J_y)^{(1)} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad (۷۲-۶)$$

و همچنین

$$(J^2)^{(1)} = 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (۷۳-۶)$$

یادداشت:

می‌توان تحقیق کرد که ماتریسهای (۷۱-۶) و (۷۲-۶) در روابط جابه‌جایی (۱۰-۶) صدق می‌کنند.

(۴) i اختیاری.

از روابط (۶۵-۶) استفاده می‌کنیم، که بر طبق (۱۵-۶) می‌توانند به صورت زیر نیز نوشته شوند

$$\langle k, j, m | J_x | k', j', m' \rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \delta_{kk'} \delta_{jj'} \\ \times [\sqrt{j(j+1) - m'(m'+1)} \delta_{m, m'+1} + \sqrt{j(j+1) - m'(m'-1)} \delta_{m, m'-1}] \quad (۷۴-۶)$$

و

$$\langle k, j, m | J_y | k', j', m' \rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}i} \delta_{kk'} \delta_{jj'} \\ \times [\sqrt{j(j+1) - m'(m'+1)} \delta_{m, m'+1} - \sqrt{j(j+1) - m'(m'-1)} \delta_{m, m'-1}] \quad (۷۵-۶)$$

بنابراین ماتریس $(J_x)^{(j)}$ قطری است و عناصر آن $(2j+1)$ مقدار $m\hbar$ هستند. تنها عناصر ماتریسی غیرصفر $(J_x)^{(j)}$ و $(J_y)^{(j)}$ عناصری هستند که بلافاصله در بالا و در زیر قطر اصلی قرار دارند: $(J_x)^{(j)}$ متقارن و حقیقی، و $(J_y)^{(j)}$ پاد متقارن و موهومی محض است. چون از طرف دیگر کتهای (k, j, m) ، ویژه بردارهای \mathbf{J}^2 هستند، داریم

$$\langle k, j, m | \mathbf{J}^2 | k', j', m' \rangle = j(j+1)\hbar^2 \delta_{kk'} \delta_{jj'} \delta_{mm'} \quad (۷۶-۶)$$

بنابراین ماتریس $(\mathbf{J}^2)^{(j)}$ متناسب با ماتریس یککه $(2j+1) \times (2j+1)$ است: عناصر قطری آن همگی برابرند با $j(j+1)\hbar^2$.

یادداشت:

محور Oz را که به عنوان "محور کوانتش" انتخاب کرده‌ایم، کاملاً اختیاری است. تمام جهت‌ها در فضا از نظر فیزیکی معادل‌اند، و می‌توان انتظار داشت که ویژه مقدارهای J_x یا J_y همان ویژه مقادیر J_z باشند (مع‌ذالک، ویژه بردارهای آنها متفاوت‌اند، زیرا J_x و J_y یا J_z جابه‌جایی‌پذیر نیستند). در واقع می‌توان تحقیق کرد که ویژه مقدارهای ماتریسهایی $(J_x)^{(1/2)}$ و $(J_y)^{(1/2)}$ [فرمولهای (۵۹-۶)] برابر $\pm \hbar/2$ ، و ویژه مقدارهای ماتریسهایی $(J_x)^{(1)}$ و $(J_y)^{(1)}$ [فرمولهای (۶۸-۶)] برابر $\pm \hbar$ ، ۰،

\hbar - هستند. این نتیجه، عمومی است: در داخل یک زیرفضای معین $\mathcal{E}(k, j)$ ، ویژه‌مقدارهای J_x و J_y (نظیر ویژه‌مقدارهای $J_u = J \cdot u$ ، مؤلفه J در امتداد یک بردار یکه اختیاری u) برابرند با $\hbar(j-1), \hbar(j-1), \dots, \hbar(-j+1), -j\hbar$. ویژه‌بردارهای متناظر (ویژه‌بردارهای مشترک J^2 و J_x, J_y, J^2 یا J^2 و J_u) ترکیب‌هایی خطی از $|k, j, m\rangle$ با k و j ثابت، هستند. ■

برای نتیجه‌گیری از این فصل که به نمایشهای "سنجهای" اختصاص داده شده است می‌توانیم بگوییم که

یک پایهٔ راست‌هنجار $\{|k, j, m\rangle\}$ از فضای حالتها، که از ویژه‌بردارهای مشترک J_x و J^2 ترکیب یافته است

$$J^2 |k, j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |k, j, m\rangle$$

$$J_x |k, j, m\rangle = m\hbar |k, j, m\rangle$$

در صورتی "پایهٔ سنجهای" نامیده می‌شود که عمل عملگرهای J_+ و J_- روی بردارهای پایه توسط روابط زیر داده شوند

$$J_+ |k, j, m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)} |k, j, m+1\rangle$$

$$J_- |k, j, m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)} |k, j, m-1\rangle$$

۴-۶ کاربرد در تکانه زاویه‌ای مداری

در بخش ۳-۶ پیشین، خواص عمومی تکانه‌های زاویه‌ای را فقط با تکیه بر روابط جابه‌جایی (۴-۶) مطالعه کردیم. حال به تکانه زاویه‌ای مداری L یک ذره بدون اسپین [فرمول (۴-۶)] برمی‌گردیم و می‌بینیم چگونه نظریهٔ عمومی‌ای که در فوق بسط داده شده در این مورد خاص به‌کار می‌رود. با به‌کار بردن نمایش $\{|L\rangle\}$ ، نشان خواهیم داد که ویژه‌مقادیر عملگر L^2 برابر اعداد $l(l+1)\hbar^2$ هستند که متناظر با تمام مقادیر درست مثبت یا صفر l می‌باشند؛ بنابراین بین تمام مقادیر ممکن که برای l در ۰، ۱، ۲، ۳، ... پیدا کردیم، تنها مقادیر درست در این مورد، محقق می‌شوند و سپس ویژه‌تابعهای مشترک L_x و L_z ، و خواص اصلی

آنها را نشان خواهیم داد. بالاخره، این ویژه‌حالتها را از دیدگاه فیزیکی مطالعه خواهیم کرد.

۶-۴-۱ ویژه‌مقدارها و ویژه‌تابعهای L_x و L^2

الف) معادلات ویژه‌مقداری در نمایش $\{|r\rangle\}$

در نمایش $\{|r\rangle\}$ ، مشاهده‌پذیرهای R و P به ترتیب با ضرب r در عملگر دیفرانسیلی $\hbar/i\nabla$ متناظرند. بنابراین، سه مؤلفه تکانه زاویه‌ای L خواهند شد

$$L_x = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad (۶-۷۷الف)$$

$$L_y = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (۶-۷۷ب)$$

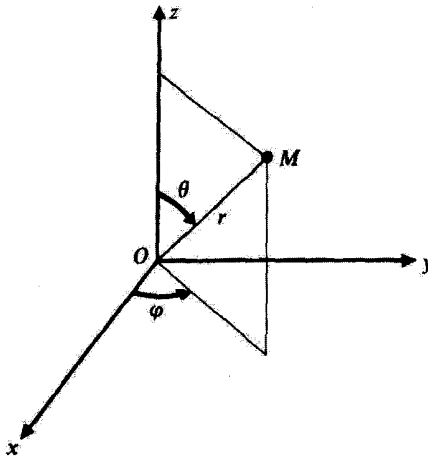
$$L_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (۶-۷۷ج)$$

برای سهولت در مختصات کروی (یا قطبی) کار می‌کنیم؛ زیرا، همان‌طور که خواهیم دید، عملگرهای مختلف تکانه زاویه‌ای، فقط روی متغیرهای زاویه‌ای θ و φ عمل می‌کنند و نه روی r . به‌جای مشخص کردن بردار r توسط مؤلفه‌های دکارتی x, y, z آن، نقطه M متناظر با آن در فضا را ($OM = r$) توسط مختصات کروی r, θ, φ و آن مشخص می‌کنیم (شکل ۱-۶)

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \varphi \\ y = r \sin \theta \sin \varphi \\ z = r \cos \theta \end{cases} \quad (۶-۷۸)$$

که در آن

$$\begin{cases} r \geq 0 \\ 0 \leq \theta \leq \pi \\ 0 \leq \varphi < 2\pi \end{cases}$$



شکل ۱-۶ تعریف مختصات کروی r, θ, φ و از یک نقطه اختیاری در فضا.

عنصر حجمی $d^3r = dx dy dz$ در مختصات کروی به صورت زیر نوشته می‌شود

$$\begin{aligned} d^3r &= r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi \\ &= r^2 dr d\Omega \end{aligned} \quad (۷۹-۶)$$

که در آن

$$d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi \quad (۸۰-۶)$$

عنصر زاویه فضایی حول زوایای قطبی θ و φ است.

با به کار بردن فن کلاسیکی تغییر متغیرها، از فرمولهای (۷۷-۶) و (۷۸-۶) عبارتهای زیر به دست می‌آیند (محاسبات نسبتاً وقت‌گیرند ولی مشکلات بزرگی ایجاد نمی‌کنند)

$$L_x = i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (الف ۸۱-۶)$$

$$L_y = i\hbar \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\sin \varphi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (ب ۸۱-۶)$$

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (ج ۸۱-۶)$$

که از آنها نتیجه می‌شود

$$L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \quad (الف ۸۲-۶)$$

$$L_+ = \hbar e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (ب ۸۲-۶)$$

$$L_- = \hbar e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (ج ۸۲-۶)$$

در نمایش $\{ | \Gamma \rangle \}$ ، ویژه‌تابعهای وابسته به ویژه‌مقدارهای L^2 از $l(l+1)\hbar^2$ و L_z از $m\hbar$ جوابهای معادلات با مشتقات جزئی زیرند

$$\begin{cases} -\left\{ \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} \psi(r, \theta, \varphi) = l(l+1)\psi(r, \theta, \varphi) & (الف ۸۳-۶) \\ -i \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi(r, \theta, \varphi) = m\psi(r, \theta, \varphi) & (ب ۸۳-۶) \end{cases}$$

طبق نتایج عمومی بخش ۳-۶، که به تکانه زاویه‌ای مداری قابل اعمال است، می‌دانیم که l درست یا نیمه‌درست است، و برای یک l ثابت، m می‌تواند فقط مقادیر $l, l-1, \dots, -l+1, -l$ را بگیرد.

در معادلات (۸۳-۶)، r در هیچ عملگر دیفرانسیل وارد نمی‌شود، و از این رو می‌توانیم آن را به‌عنوان پارامتری در نظر بگیریم و "فقط بستگی ψ به θ و φ را به حساب آوریم". حال، ویژه‌تابع مشترک L_z و L^2 متناظر با ویژه‌مقدارهای $l(l+1)\hbar^2$ و $m\hbar$ را با $Y_l^m(\theta, \varphi)$ نمایش می‌دهیم

$$L^2 Y_l^m(\theta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (الف ۸۴-۶)$$

$$L_z Y_l^m(\theta, \varphi) = m\hbar Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (ب ۸۴-۶)$$

برای دقیق بودن، می‌باید جهت تمیز بین جوابهای مختلف (۸۴-۶)، متناظر با یک جفت مقدار l و m ، یک شاخص اضافی وارد کنیم. در واقع، بعداً خواهیم دید که این معادلات برای هر جفت مقادیر مجاز l و m ، فقط یک جواب (با تقریب یک ضریب ثابت) می‌پذیرند؛ و به این علت است که شاخصهای l و m کافی هستند.

یادداشتها:

۱. بنابراین معادلات (۸۴-۶) بستگی ویژه تابعهای L_z و L^2 به θ و φ را به دست می‌دهند. وقتی جواب $Y_l^m(\theta, \varphi)$ این معادلات پیدا شدند، این ویژه تابعها به صورت زیر به دست خواهند آمد

$$\psi_{l,m}(r, \theta, \varphi) = f(r)Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (۸۵-۶)$$

که $f(r)$ تابعی از r است که به صورت یک ثابت انتگرال‌گیری برای معادلات با مشتقات جزئی (۸۳-۶) ظاهر می‌شود. این حقیقت که $f(r)$ اختیاری است نشان می‌دهد که L_z و L^2 تشکیل یک مجموعه کامل مشاهده پذیر جابه جایی پذیر در فضای \mathcal{O}_r توابع r (یا r, θ, φ) نمی‌دهند.

۲. به منظور بهنجار کردن $\psi_{l,m}(r, \theta, \varphi)$ راحت تر است $Y_l^m(\theta, \varphi)$ و $f(r)$ را به طور مجزا بهنجار کنیم (همان طور که در اینجا انجام می‌دهیم)

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2 d\theta = 1 \quad (۸۶-۶)$$

$$\int_0^\infty r^2 |f(r)|^2 dr = 1 \quad (۸۷-۶)$$

ب) مقادیر l و m

۱. l و m فقط اعداد درست را می‌گیرند.

با استفاده از عبارت (۸۱-۶) (ج) برای L_z ، می‌توان (ب) (۸۴-۶) را به صورت زیر نوشت

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_l^m(\theta, \varphi) = m\hbar Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (۸۸-۶)$$

که نشان می‌دهد $Y_l^m(\theta, \varphi)$ برابر است با

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = F_l^m(\theta) e^{im\varphi} \quad (۸۹-۶)$$

۱. $f(r)$ باید طوری باشد که $\psi_{l,m}(r, \theta, \varphi)$ مجذوراً انتگرال پذیر باشد.

با تغییر دادن φ بین 0 و 2π می‌توان تمام فضا را پوشاند. چون یک تابع موج باید در تمام نقاط پیوسته بماند،^۱ به‌ویژه باید داشته باشیم

$$Y_l^m(\theta, \varphi = 0) = Y_l^m(\theta, \varphi = 2\pi) \quad (90-ع)$$

که منجر می‌شود به

$$e^{i m 2\pi} = 1 \quad (91-ع)$$

برطبق نتایج بخش ۳-۶، m یا عدد درست یا نیمه‌درست است. رابطه (۹۱-ع) نشان می‌دهد که، "در مورد یک تکانه زاویه‌ای مدار، m باید یک عدد درست باشد" (اگر m یک عدد نیمه‌درست باشد، $e^{i m 2\pi}$ برابر -1 است). ولی می‌دانیم که m و l هر دو یا عدد درست هستند یا هر دو نیمه‌درست: از اینجا نتیجه می‌شود که " l نیز باید یک عدد درست باشد."

۲. تمام مقادیر درست (مثبت یا صفر) l محقق می‌شوند.

یک مقدار درست l (مثبت یا صفر) انتخاب می‌کنیم. از روی نظریه عمومی بخش ۳-۶ می‌دانیم که $Y_l^m(\theta, \varphi)$ باید در رابطه زیر صدق کند

$$L_+ Y_l^l(\theta, \varphi) = 0 \quad (92-ع)$$

که با در نظر گرفتن (۸۲-ع) و (۸۹-ع)، خواهد شد

$$\left\{ \frac{d}{d\theta} - l \cot \theta \right\} F_l^l(\theta) = 0 \quad (93-ع)$$

این معادله مرتبه اول با توجه به رابطه زیر می‌تواند به راحتی انتگرال‌گیری شود

$$\cot \theta \, d\theta = \frac{d(\sin \theta)}{\sin \theta} \quad (94-ع)$$

و جواب عمومی آن خواهد بود

$$F_l^l(\theta) = c_l (\sin \theta)^l \quad (95-ع)$$

۱. اگر $Y_l^m(\theta, \varphi)$ به‌ازای $\varphi = 0$ پیوسته نبود، مشتق‌پذیر نبوده و نمی‌توانست یک ویژه‌تابع عملگرهای دیفرانسیلی (۸۰-ع) و (۸۲-ع الف) باشد. به‌عنوان مثال، $(\partial/\partial\varphi)Y_l^m(\theta, \varphi)$ می‌توانست تابهی مثل $\delta(\varphi)$ ایجاد کند، که این با (۸۲-ع) ناسازگار است.

که در آن c_l یک ثابت بهنجارش است.^۱

در نتیجه، برای هر مقدار درست مثبت یا صفر l ، یک تابع یکتایی $Y_l^l(\theta, \varphi)$ (با تقریب یک ضریب) وجود دارد

$$Y_l^l(\theta, \varphi) = c_l (\sin \theta)^l e^{il\varphi} \quad (۹۶-۶)$$

با تکرار عمل L_- ، Y_l^{l-1} ، \dots ، Y_l^m ، \dots ، Y_l^{-l} را می‌سازیم. پس ملاحظه می‌شود که به یک جفت ویژه مقدار $l(l+1)\hbar^2$ و $l\hbar$ که l یک عدد اختیاری درست مثبت یا صفر و m یک عدد درست دیگر است به طوری که $-l \leq m \leq l$ ، "تنها و تنها یک ویژه‌تابع وابسته است" و آن عبارت است از: $Y_l^m(\theta, \varphi)$ ، که می‌تواند بدون ابهام از (۹۶-۶) به دست آید. ویژه‌تابعهای $Y_l^m(\theta, \varphi)$ را هماهنگهای کروی گویند.

ج) خواص اساسی هماهنگهای کروی

هماهنگهای کروی $Y_l^m(\theta, \varphi)$ به صورت مفصلتر در مکمل ۱ این فصل مطالعه خواهند شد. در اینجا خود را به خلاصه این مطالعه محدود می‌کنیم و بدون اثبات نتایج اصلی آن را بیان می‌کنیم.

۱. روابط بازگشتی

برطبق نتایج عمومی بخش ۶-۳، داریم

$$L_{\pm} Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} Y_l^{m \pm 1}(\theta, \varphi) \quad (۹۷-۶)$$

با استفاده از روابط (۶-۸۲ب) و (۶-۸۲ج) برای عملگرهای L_+ و L_- و اینکه $Y_l^m(\theta, \varphi)$ عبارت از حاصلضرب تابعی فقط برحسب θ در $e^{im\varphi}$ است، داریم

$$e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - m \cot \theta \right) Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} Y_l^{m+1}(\theta, \varphi) \quad (۹۸-الف)$$

$$e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} - m \cot \theta \right) Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} Y_l^{m-1}(\theta, \varphi) \quad (۹۸-ب)$$

۱. بالعکس، می‌توان به سهولت نشان داد که تابع حاصل از این طریق، در واقع یک ویژه‌تابع از L_z و L^2 با ویژه‌مقادیر $l(l+1)\hbar^2$ و $l\hbar$ است. برطبق (۶-۸۱ج) و (۶-۸۱ب)، به سهولت ملاحظه می‌شود که $l\hbar Y_l^l(\theta, \varphi) = L_z Y_l^l(\theta, \varphi)$. پس با استفاده از این معادله و (۶-۹۲)، نظیر (۶-۲۱ب) می‌توان نشان داد که $Y_l^l(\theta, \varphi)$ نیز یک ویژه‌تابع از L^2 با ویژه‌مقدار انتظاری خواهد بود.

۲. روابط راست‌هنجاری و بستاری

روابط (۸۳-۶) هماهنگهای کروی را فقط با تقریب یک ضریب تعیین می‌کند. حال این ضریب را طوری انتخاب می‌کنیم که $Y_l^m(\theta, \varphi)$ (به‌عنوان توابعی از متغیرهای زاویه‌ای θ و φ) راست‌هنجار شود

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_l^{m'*}(\theta, \varphi) Y_l^m(\theta, \varphi) = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'} \quad (۹۹-۶)$$

به‌علاوه، هر تابعی از θ و φ ، نظیر $f(\theta, \varphi)$ ، می‌تواند برحسب هماهنگهای کروی بسط داده شود

$$f(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} c_{l,m} Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (۱۰۰-۶)$$

که در آن

$$c_{l,m} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_l^{m*}(\theta, \varphi) f(\theta, \varphi) \quad (۱۰۱-۶)$$

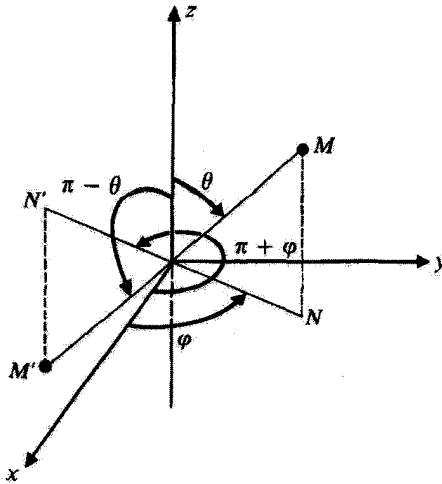
بنابراین، هماهنگهای کروی تشکیل یک پایه راست‌هنجار در فضای \mathcal{H}_Ω توابع θ و φ می‌دهند. این حقیقت توسط رابطه بستاری بیان می‌شود

$$\begin{aligned} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_l^m(\theta, \varphi) Y_l^{m*}(\theta', \varphi') &= \delta(\cos \theta - \cos \theta') \delta(\varphi - \varphi') \\ &= \frac{1}{\sin \theta} \delta(\theta - \theta') \delta(\varphi - \varphi') \end{aligned} \quad (۱۰۲-۶)$$

این $\delta(\cos \theta - \cos \theta')$ است، نه $\delta(\theta - \theta')$ که در طرف راست رابطه بستاری وارد می‌شود، زیرا انتگرال‌گیری روی متغیر θ توسط عنصر دیفرانسیل $\sin \theta d\theta = -d(\cos \theta)$ انجام می‌شود.

۳. پاریته و همیوچ مختلط

در ابتدا، متذکر شویم که تغییر Γ به $-\Gamma$ (تقارن نسبت به مبدأ مختصات) در مختصات کروی به‌صورت زیر بیان می‌شود (شکل ۲-۶)



شکل ۶-۲ تبدیل مختصات کروی یک نقطه در تقارن نسبت به مبدأ مختصات؛ r تغییر نمی‌کند، θ به $\pi - \theta$ و φ به $\pi + \varphi$ تبدیل می‌شود.

$$r \Rightarrow r$$

$$\theta \Rightarrow \pi - \theta$$

$$\varphi \Rightarrow \pi + \varphi \quad (۱۰۳-۶)$$

به‌سهولت می‌توان نشان داد (مکمل ۱ همین فصل را ببینید) که

$$Y_l^m(\pi - \theta, \pi + \varphi) = (-1)^l Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (۱۰۴-۶)$$

بنابراین، هماهنگهای کروی توابعی با پاریته معین و مستقل از m هستند؛ این توابع وقتی l فرد یا زوج باشد، زوج یا فردند.

همچنین، می‌توان به سهولت ملاحظه کرد که

$$[Y_l^m(\theta, \varphi)]^* = (-1)^m Y_l^{-m}(\theta, \varphi) \quad (۱۰۵-۶)$$

د) پایه‌های "سنجه‌ای" فضای تابع موجهای یک ذره بدون اسپین

همان‌طور که در فوق متذکر شدیم [قسمت (۱) بخش ۶-۴-۱ الف]، I_z و I^2 تشکیل یک مجموعه کامل مشاهده‌پذیر جابه‌جایی‌پذیر در فضای تابع موجهای یک ذره بدون اسپین نمی‌دهند. حال با

اتکا به استدلالها و نتایج بخش ۳-۳-۶، شکل پایه‌های "سنجه‌ای" این فضا را نشان خواهیم داد. فرض کنیم که $\mathcal{E}(l, m = l)$ زیرفضای ویژه‌تابعهای مشترک L_z و L^2 وابسته به ویژه‌مقادیر $l\hbar$ و $l(l+1)\hbar^2$ باشد؛ l یک عدد ثابت درست مثبت یا صفر است. اولین قدم در ساختن یک پایه "سنجه‌ای" (به بخش ۳-۳-۶ مراجعه شود) عبارت است از انتخاب یک پایه راست‌هنجار دلخواه در هر کدام از $\mathcal{E}(l, m = l)$. توابعی را که پایه انتخابی در $\mathcal{E}(l, m = l)$ را تشکیل می‌دهند با $\psi_{k,l,l}(\mathbf{r})$ مشخص می‌کنیم. شاخص k (که برای سهولت فرض می‌کنیم گسسته باشد) جهت تمیز بین توابع مختلف این پایه به‌کار می‌رود. حال با تأثیر مکرر عملگر L_- روی $\psi_{k,l,l}(\mathbf{r})$ توابع $\psi_{k,l,m}(\mathbf{r})$ را می‌سازیم که برای $m \neq l$ پایه "سنجه‌ای" را کامل می‌کنند؛ این توابع در روابط (۲۶-۶) و (۶۴-۶) صدق می‌کنند، و در اینجا به صورت زیر در می‌آیند

$$\begin{aligned} L^2 \psi_{k,l,m}(\mathbf{r}) &= l(l+1)\hbar^2 \psi_{k,l,m}(\mathbf{r}) \\ L_z \psi_{k,l,m}(\mathbf{r}) &= m\hbar \psi_{k,l,m}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (106-6)$$

و

$$L_{\pm} \psi_{k,l,m}(\mathbf{r}) = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} \psi_{k,l,m \pm 1}(\mathbf{r}) \quad (107-6)$$

ولی، در بخش (۴-۱-الف) دیدیم که تمام ویژه‌تابعهای مشترک L_z و L^2 که به ویژه‌مقادیر $l(l+1)\hbar^2$ و $m\hbar$ وابسته‌اند، دارای یک نوع بستگی زاویه‌ای، $Y_l^m(\theta, \varphi)$ هستند، و فقط در بستگی شعاعی تفاوت دارند. بنابراین از معادلات (۱۰۶-۶) نتیجه می‌گیریم که $\psi_{k,l,m}(\mathbf{r})$ شکل زیر را دارد

$$\psi_{k,l,m}(\mathbf{r}) = R_{k,l,m}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (108-6)$$

حال نشان می‌دهیم که اگر $\psi_{k,l,m}(\mathbf{r})$ تشکیل یک پایه "سنجه‌ای" بدهد، توابع شعاعی $R_{k,l,m}(r)$ مستقل از m خواهند بود. چون عملگرهای دیفرانسیلی L_{\pm} بر روی قسمت وابسته به شعاع اثری ندارند، بر طبق (۹۷-۶) داریم

$$\begin{aligned} L_{\pm} \psi_{k,l,m}(\mathbf{r}) &= R_{k,l,m}(r) L_{\pm} Y_l^m(\theta, \varphi) \\ &= \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} R_{k,l,m}(r) Y_l^{m \pm 1}(\theta, \varphi) \end{aligned} \quad (109-6)$$

مقایسه با (۶-۱۰۷) نشان می‌دهد که برای تمام مقادیر τ توابع شعاعی باید در روابط زیر صدق کنند.

$$R_{k,l,m\pm 1}(\tau) = R_{k,l,m}(\tau) \quad (۶-۱۱۰)$$

و در نتیجه مستقل از m هستند. بنابراین تابع $\psi_{k,l,m}(\mathbf{r})$ یک پایه استاندارد، فضای تابع موج یک ذره، لزوماً به شکل زیر است

$$\psi_{k,l,m}(\mathbf{r}) = R_{k,l}(\tau) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (۶-۱۱۱)$$

رابطه راست‌هنجاری برای چنین پایه‌ای عبارت است از

$$\int d^3r \psi_{k,l,m}^*(\mathbf{r}) \psi_{k',l',m'}(\mathbf{r}) = \int_0^\infty r^2 dr R_{k,l}^*(r) R_{k',l'}(r) \times \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta Y_l^{m*}(\theta, \varphi) Y_{l'}^{m'}(\theta, \varphi) = \delta_{kk'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (۶-۱۱۲)$$

چون هماهنگی‌های کروی بهنجار هستند [فرمول (۶-۹۹)]، بالاخره داریم

$$\int_0^\infty r^2 dr R_{k,l}^*(r) R_{k',l'}(r) = \delta_{kk'} \quad (۶-۱۱۳)$$

بنابراین، توابع شعاعی $R_{k,l}(r)$ نسبت به متغیر r بهنجار بوده؛ و به علاوه، دو تابع شعاعی مربوط به یک مقدار l ولی به شاخصهای متفاوت k ، متعامند.

یادداشتها:

۱. فرمول (۶-۱۱۲) نتیجه‌ای از این حقیقت است که توابع $\psi_{k,l,l}(\mathbf{r}) = R_{k,l}(\tau) Y_l^l(\theta, \varphi)$ که به عنوان پایه‌ای در زیرفضای $\mathcal{E}(l, m=l)$ انتخاب شده‌اند راست‌هنجارند. بنابراین لازم است که شاخص l برای دو تابع $R_{k,l}$ که در طرف چپ وارد می‌شوند یکی باشد. به ازای $l \neq l'$ ، توابع $\psi_{k,l,m}(\mathbf{r})$ و $\psi_{k',l',m'}(\mathbf{r})$ به هر حال، به علت بستگی زاویه‌ای که دارند، متعامند (اینها ویژه‌تابعهای عملگر هرمیتی L^2 با ویژه‌مقدارهای مختلف‌اند). بنابراین اگر l و l' از قبل متفاوت باشند، انتگرال

$$\int_0^\infty r^2 dr R_{k,l}^*(r) R_{k',l'}(r) \quad (۶-۱۱۴)$$

می‌تواند هر مقداری را داشته باشد.

۲. توابع شعاعی $R_{k,l}(r)$ عموماً به l بستگی دارند. توجه این واقعیت به صورت زیر است: تابعی به صورت $f(r)g(\theta, \varphi)$ در صورتی می‌تواند در مبدأ مختصات $(\theta$ و φ دلخواه و $r = 0$) پیوسته باشد که $g(\theta, \varphi)$ به یک ثابت تنزل کند و یا اینکه به‌ازای $r = 0$ ، $f(r)$ به سمت صفر برود [زیرا اگر $g(\theta, \varphi)$ به θ و φ بستگی داشته و اگر $f(0)$ صفر نباشد، حد $f(r)g(\theta, \varphi)$ وقتی r به سمت صفر میل کند، به جهتی که در امتداد آن به مبدأ نزدیک می‌شویم بستگی دارد]. در نتیجه، اگر بخواهیم توابع پایه‌ای $\psi_{k,l,m}(r)$ پیوسته باشند، تنها توابع شعاعی مربوط به $l = 0$ می‌توانند در $r = 0$ غیرصفر باشند [در واقع $Y_0^0(\theta, \varphi)$ یک ثابت است]. همچنین، اگر بخواهیم $\psi_{k,l,m}(r)$ در مبدأ مشتق‌پذیر (یک یا چندین بار) باشد، شرایطی برای $R_{k,l}(r)$ به دست می‌آید که بستگی به مقدار l دارد. ■

۶-۴-۲ ملاحظات فیزیکی

الف) مطالعه حالت $|k, l, m\rangle$

ذره‌ای (بدون اسپین) را در یک ویژه‌حالت $|k, l, m\rangle$ از L_z و L^2 [که تابع موج وابسته به آن $\psi_{k,l,m}(r)$ است]، یعنی حالتی که در آن مربع تکانه زاویه‌ای آن و تصویر این تکانه زاویه‌ای در طول محور Oz دارای مقادیر کاملاً معینی است [به ترتیب $l(l+1)\hbar^2$ و $m\hbar$] در نظر بگیرید. فرض کنیم می‌خواهیم مؤلفه تکانه زاویه‌ای این ذره را در طول Ox یا Oy اندازه بگیریم. چون L_x و L_y با L_z جابه‌جایی‌پذیر نیستند، $|k, l, m\rangle$ یک ویژه‌حالت L_x و L_y نیست. بنابراین نمی‌توانیم با قطعیت نتیجه چنین اندازه‌گیری را پیش‌بینی کنیم. حال مقادیر متوسط و انحرافات مربعی متوسط L_x و L_y را در فضای $|k, l, m\rangle$ محاسبه می‌کنیم. اگر L_x و L_y را برحسب L_+ و L_- ، با وارد کردن فرمولهای (۶-۱۵)، بیان کنیم

$$L_x = \frac{1}{2}(L_+ + L_-)$$

$$L_y = \frac{1}{2i}(L_+ - L_-) \quad (۶-۱۱۵)$$

این محاسبات به سادگی انجام می‌گیرند. در این صورت می‌بینیم که $L_x |k, l, m\rangle$ و $L_y |k, l, m\rangle$ ترکیب‌هایی خطی از $|k, l, m+1\rangle$ و $|k, l, m-1\rangle$ هستند، لذا نتیجه می‌شود

$$\langle k, l, m | L_x | k, l, m\rangle = \langle k, l, m | L_y | k, l, m\rangle = 0 \quad (۶-۱۱۶)$$

به‌علاوه

$$\langle k, l, m | L_x^y | k, l, m \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle k, l, m | (L_+^y + L_-^y + L_+ L_- + L_- L_+) | k, l, m \rangle \quad (۱۱۷-۶)$$

$$\langle k, l, m | L_y^y | k, l, m \rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} \langle k, l, m | (L_+^y + L_-^y - L_+ L_- - L_- L_+) | k, l, m \rangle$$

عبارتهای L_+^y و L_-^y در نتیجه دخالتی ندارند. زیرا $L_{\pm}^y | k, l, m \rangle$ متناسب با $| k, l, m \pm 2 \rangle$ است. به‌علاوه از فرمول (۲۲-۶) نتیجه می‌شود

$$L_+ L_- + L_- L_+ = 2(L_x^y - L_z^y)$$

بنابراین خواهیم یافت

$$\begin{aligned} \langle k, l, m | L_x^y | k, l, m \rangle &= \langle k, l, m | L_y^y | k, l, m \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle k, l, m | (L_x^y - L_z^y) | k, l, m \rangle \\ &= \frac{\hbar^y}{\sqrt{2}} [l(l+1) - m^y] \end{aligned} \quad (۱۱۸-۶)$$

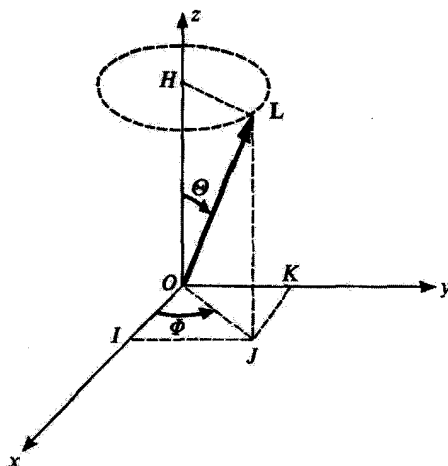
پس در حالت $| k, l, m \rangle$ داریم

$$\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0 \quad (الف ۱۱۹-۶)$$

$$\Delta L_x = \Delta L_y = \hbar \sqrt{\frac{1}{2} [l(l+1) - m^2]} \quad (ب ۱۱۹-۶)$$

این نتایج تصویر زیر را پیشنهاد می‌کند. یک تکانه زاویه‌ای کلاسیکی در نظر بگیریم که قدرمطلق آن برابر با $\hbar \sqrt{l(l+1)}$ و تصویر آن بر روی Oz برابر با $m\hbar$ (شکل ۳-۶) باشد

$$\begin{aligned} | \mathbf{OL} | &= \hbar \sqrt{l(l+1)} \\ \overline{OH} &= m\hbar \end{aligned} \quad (۱۲۰-۶)$$



شکل ۳-۶ مدل کلاسیکی که می‌تواند در مورد تکانه زاویه‌ای مداری ذره‌ای در حالت (l, m) به‌کار رود. فرض می‌کنیم فاصله $|OL|$ و زاویه θ معلوم، ولی Φ یک متغیر کتره‌ای باشد که چگالی احتمال آن در بازه $[0, 2\pi]$ ثابت است. پس مقادیر متوسط کلاسیکی مؤلفه‌های OL ، و نیز مربع این مؤلفه‌ها، برابر مقادیر متوسط مکانیک کوانتومی متناظر هستند.

زوایای قطبی که راستای آن‌را مشخص می‌کنند، با θ و Φ نمایش می‌دهیم. چون مثلث OLJ دارای یک زاویه قائمه در J است و $OH = JL$ داریم

$$OJ = \sqrt{OL^2 - OH^2} = \hbar \sqrt{l(l+1) - m^2} \quad (۱۲۱-۶)$$

در نتیجه، مؤلفه‌های یک چنین تکانه زاویه‌ای کلاسیک خواهند بود

$$\overline{OI} = \hbar \sqrt{l(l+1) - m^2} \cos \Phi$$

$$\overline{OK} = \hbar \sqrt{l(l+1) - m^2} \sin \Phi$$

$$\overline{OH} = \hbar \sqrt{l(l+1)} \cos \theta = m\hbar \quad (۱۲۲-۶)$$

حال فرض کنیم که $|OL|$ و θ معلوم بوده و Φ یک متغیر کتره‌ای باشد که بتواند هر مقداری را در بازه $[0, 2\pi]$ بگیرد، و تمام این مقادیر متساوی‌الاحتمال باشند (متغیر کتره‌ای با توزیع یکسان).

در این صورت با گرفتن متوسط روی Φ داریم

$$\langle \overline{O\hat{I}} \rangle \propto \int_0^{2\pi} \cos \Phi \, d\Phi = 0 \quad (6-122\text{الف})$$

$$\langle \overline{O\hat{K}} \rangle \propto \int_0^{2\pi} \sin \Phi \, d\Phi = 0 \quad (6-122\text{ب})$$

که به خوبی متناظر است با (6-118الف). به علاوه

$$\langle \overline{O\hat{I}^2} \rangle = \frac{1}{2\pi} \hbar^2 [l(l+1) - m^2] \int_0^{2\pi} \cos^2 \Phi \, d\Phi = \frac{\hbar^2}{2} [l(l+1) - m^2] \quad (6-123)$$

و همچنین

$$\langle \overline{O\hat{K}^2} \rangle = \frac{\hbar^2}{2} [l(l+1) - m^2] \quad (6-124)$$

این مقادیر متوسط، نظیر مقادیری است که در (6-118) پیدا کردیم. در نتیجه، تکانه زاویه‌ای یک ذره در حالت $|k, l, m\rangle$ ، تا جایی که به مقادیر متوسط مؤلفه‌ها و مربع آنها مربوط می‌شود، نظیر یک تکانه زاویه‌ای کلاسیکی عمل می‌کند که طول آن $\hbar\sqrt{l(l+1)}$ و تصویر آن در امتداد Oz برابر با $m\hbar$ ، ولی برای آن Φ یک متغیر تصادفی با توزیع یکسان بین 0 و 2π است.

البته، این تصویر باید با احتیاط به‌کار گرفته شود: در خلال این فصل نشان دادیم که چه اندازه خواص مکانیک کوانتومی تکانه‌های زاویه‌ای با خواص کلاسیکی آنها متفاوت است. به‌ویژه، باید این واقعیت را متذکر شد که یک اندازه‌گیری جداگانه از L_x یا L_y روی ذره‌ای به حالت $|k, l, m\rangle$ نمی‌تواند هر مقداری بین $-\hbar\sqrt{l(l+1) - m^2}$ و $\hbar\sqrt{l(l+1) - m^2}$ را (آن‌طور که مدل قبلی به ما می‌فهماند) بدهد. تنها نتایج ممکن عبارت‌اند از ویژه‌مقدارهای L_x ، L_y (در انتهای بخش ۳-۶ ملاحظه شد که اینها همان ویژه‌مقدارهای L_z هستند)، یعنی، چون l ثابت است، یکی از $(2l+1)\hbar, l\hbar, (l-1)\hbar, \dots, (-l+1)\hbar$ ، و $-l\hbar$.

ب) محاسبهٔ پیش‌بینیهای فیزیکی مربوط به اندازه‌گیریهای L_x و L_y ذره‌ای در نظر بگیرید که حالت آن توسط تابع موج (بهنجار) زیر توصیف شود

$$\langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \psi(\mathbf{r}) = \psi(r, \theta, \varphi) \quad (6-125)$$

می‌دانیم که اندازه‌گیری L^2 فقط به نتایج $0, \sqrt{2}\hbar, \sqrt{6}\hbar, \dots, \sqrt{l(l+1)}\hbar$ و اندازه‌گیری L_z فقط به نتایج $0, \pm\hbar, \pm 2\hbar, \dots, \pm l\hbar$ منجر می‌شود. حال چگونه احتمالات این نتایج مختلف را از تابع موج $\psi(r, \theta, \varphi)$ حساب کنیم؟

۱. فرمولهای عمومی

فرض می‌کنیم $\mathcal{P}_{L^2, L_z}(l, m)$ احتمال یافتن نتایج $l(l+1)\hbar^2$ و $m\hbar$ در یک اندازه‌گیری همزمان L^2 و L_z باشد. این احتمال از بسط $\psi(\mathbf{r})$ در پایه‌ای مرکب از ویژه‌توابع L^2 و L_z به دست می‌آید؛ یک پایه "سنجه‌ای" از نوع معرفی شده در بخش (۶-۴-۱-د) انتخاب خواهیم کرد

$$\psi_{k,l,m}(\mathbf{r}) = R_{k,l}(r)Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (۱۲۶-۶)$$

بنابراین $\psi(\mathbf{r})$ می‌تواند به صورت زیر نوشته شود

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_k \sum_l \sum_m c_{k,l,m} R_{k,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (۱۲۷-۶)$$

که در آن ضرایب $c_{k,l,m}$ می‌تواند با استفاده از فرمول عادی زیر محاسبه شود

$$\begin{aligned} c_{k,l,m} &= \int d^3r \psi_{k,l,m}^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \\ &= \int_0^\infty r^2 dr R_{k,l}^*(r) \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta Y_l^{m*}(\theta, \varphi) \psi(r, \theta, \varphi) \end{aligned} \quad (۱۲۸-۶)$$

برطبق اصول موضوع فصل سوم، در این شرایط، احتمال $\mathcal{P}_{L^2, L_z}(l, m)$ توسط رابطه زیر داده می‌شود

$$\mathcal{P}_{L^2, L_z}(l, m) = \sum_k |c_{k,l,m}|^2 \quad (۱۲۹-۶)$$

اگر فقط L^2 را اندازه بگیریم، احتمال یافتن نتیجه $l(l+1)\hbar^2$ برابر است با

$$\mathcal{P}_{L^2}(l) = \sum_{m=-l}^{+l} \mathcal{P}_{L^2, L_z}(l, m) = \sum_k \sum_{m=-l}^{+l} |c_{k,l,m}|^2 \quad (۱۳۰-۶)$$

همچنین، اگر فقط L_z را بخواهیم اندازه بگیریم، احتمال یافتن $m\hbar$ عبارت است از

$$\mathcal{P}_{L_z}(m) = \sum_{l \geq |m|} \mathcal{P}_{L^2, L_z}(l, m) = \sum_k \sum_{l \geq |m|} |c_{k,l,m}|^2 \quad (131-6)$$

(محدودیت $|m| \geq l$ به‌طور اتوماتیک صادق است، زیرا ضرایب $c_{k,l,m}$ که برای آنها $|m|$ بزرگتر از l باشد، وجود ندارند.

در واقع، چون L_z و L^2 فقط روی θ و φ عمل می‌کنند، ملاحظه می‌شود که این بستگی تابع موج $\varphi(\mathbf{r})$ به θ و φ است که در محاسبات احتمالات پیشین اساسی است. برای روشن کردن این نکته، $\psi(r, \theta, \varphi)$ را به‌عنوان تابعی از θ و φ که، به پارامتر r بستگی دارد، در نظر می‌گیریم. نظیر هر تابع θ و ψ دیگر، می‌توان ψ را برحسب هماهنگ‌های کروی بسط داد

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \sum_l \sum_m a_{l,m}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (132-6)$$

ضرایب $a_{l,m}$ این بسط بستگی به "پارامتر" r دارد و توسط رابطه زیر داده می‌شوند

$$a_{l,m}(r) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_l^{m*}(\theta, \varphi) \psi(r, \theta, \varphi) \quad (133-6)$$

اگر عبارتهای (۱۳۱-۶) و (۱۲۶-۶) را مقایسه کنیم، ملاحظه می‌شود که $c_{k,l,m}$ عبارت از ضرایب بسط $a_{l,m}(r)$ روی توابع $R_{(k,l)}(r)$ هستند

$$a_{l,m}(r) = \sum_k c_{k,l,m} R_{k,l}(r) \quad (134-6)$$

با در نظر گرفتن (۱۲۷-۶) و (۱۳۲-۶) داریم

$$c_{k,l,m} = \int_0^\infty r^2 dr R_{k,l}^*(r) a_{l,m}(r) \quad (135-6)$$

با استفاده از (۱۱۲-۶) و (۱۲۳-۶) نیز داریم

$$\int_0^\infty r^2 dr |a_{l,m}(r)|^2 = \sum_k |c_{k,l,m}|^2 \quad (136-6)$$

بنابراین، احتمال $\mathcal{P}_{L^z, L_z}(l, m)$ [فرمول (۱۲۸-۶)] می‌تواند به صورت زیر نوشته شود

$$\mathcal{P}_{L^z, L_z}(l, m) = \int_0^\infty r^2 dr |a_{l,m}(r)|^2 \quad (۱۳۷-۶)$$

از این رابطه می‌توان، همانند (۱۲۹-۶) و (۱۳۰-۶)، نتیجه گرفت

$$\mathcal{P}_{L^z}(l) = \sum_{m=-l}^{+l} \int_0^\infty r^2 dr |a_{l,m}(r)|^2 \quad (۱۳۸-۶)$$

و

$$\mathcal{P}_{L_z}(m) = \sum_{l \geq |m|} \int_0^\infty r^2 dr |a_{l,m}(r)|^2 \quad (۱۳۹-۶)$$

[در اینجا نیز $a_{l,m}(r)$ فقط برای $l \geq m$ وجود دارد]. در نتیجه، جهت به‌دست آوردن پیش‌بینیهای فیزیکی راجع به اندازه‌گیریهای L_z و L^2 ، می‌توان تابع موج را به‌عنوان تابعی فقط از θ و φ در نظر گرفت، و آن را برحسب هماهنگیهای کروی نظیر (۱۳۱-۶) بسط داد؛ سپس فرمولهای (۱۳۶-۶)، (۱۳۷-۶) و (۱۳۸-۶) را به‌کار برد.

به همین طریق، چون فقط روی φ عمل می‌کند، این بستگی تابع موج $\psi(r)$ به φ است که در محاسبه $\mathcal{P}_{L_z}(m)$ اساسی است. جهت درک، از این حقیقت استفاده می‌کنیم که هماهنگیهای کروی حاصلضرب تابعی تنها از θ و تابعی تنها از φ هستند. آنها را به‌صورت زیر می‌نویسیم

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = Z_l^m(\theta) \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \quad (۱۴۰-۶)$$

به‌طوری که هر کدام از توابع حاصلضرب به‌نحار باشد؛ در واقع داریم

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \frac{e^{-im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{im'\varphi}}{\sqrt{2\pi}} = \delta_{mm'} \quad (۱۴۱-۶)$$

با بردن این فرمول در رابطه راست‌هنجار (۹۹-۶) برای هماهنگیهای کروی، داریم

$$\int_0^\pi \sin \theta d\theta Z_l^{m*}(\theta) Z_l^m(\theta) = \delta_{ll'} \quad (۱۴۲-۶)$$

به دلایلی شبیه به دلایل نشان داده شده در قسمت (۱) یادداشت بخش ۶-۴-۱، در هر دو تابع Z_l^m موجود در طرف چپ یک مقدار m شرکت می‌کند.

اگر $\psi(r, \theta, \varphi)$ رابه‌عنوان تابعی از φ در نظر بگیریم که در بازه $[0, 2\pi]$ معین باشد و بستگی به "پارامترهای" r و θ داشته باشد، می‌توان آن‌را به صورت یک سری فوریه بسط داد

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \sum_m b_m(r, \theta) \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \quad (۱۴۳-۶)$$

که در آن ضرایب $b_m(r, \theta)$ می‌تواند از فرمول زیر محاسبه شود

$$b_m(r, \theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} d\varphi e^{-im\varphi} \psi(r, \theta, \varphi) \quad (۱۴۴-۶)$$

اگر فرمولهای (۱۴۲-۶) و (۱۴۳-۶) را با (۱۳۱-۶) و (۱۳۰-۶) مقایسه کنیم، ملاحظه می‌کنیم که $a_{l,m}(r)$ ها برای m ثابت عبارت‌اند از ضرایب بسط $b_m(r, \theta)$ روی توابع Z_l^m مربوط به همان مقدار m

$$b_m(r, \theta) = \sum_l a_{l,m}(r) Z_l^m(\theta) \quad (۱۴۵-۶)$$

با

$$a_{l,m}(r) = \int_0^\pi \sin \theta d\theta Z_l^{m*}(\theta) b_m(r, \theta) \quad (۱۴۶-۶)$$

با توجه به (۱۴۱-۶)، بسط (۱۴۲-۶) می‌دهد

$$\int_0^\pi \sin \theta d\theta |b_m(r, \theta)|^2 = \sum_l |a_{l,m}(r)|^2 \quad (۱۴۷-۶)$$

با جایگذاری این فرمول در (۱۳۸-۶)، $\mathcal{D}_{L_z}(m)$ به شکل زیر به‌دست می‌آید

$$\mathcal{D}_{L_z}(m) = \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \sin \theta d\theta |b_m(r, \theta)|^2 \quad (۱۴۸-۶)$$

بنابراین، تا جایی که به اندازه‌گیری L_z تنها مربوط می‌شود، تنها کاری که باید انجام دهیم، آن است که تابع موج را به‌عنوان تابعی که تنها به φ بستگی دارد در نظر گرفته و آن‌را به صورت سری فوریه نظیر (۱۴۲-۶)، بسط دهیم تا بتوانیم احتمالات نتایج مختلف ممکن را محاسبه کنیم.

می‌توان به این فکر افتاد که با استدلالی شبیه به استدلال قبل می‌توان $\mathcal{D}_{L^2}(l)$ را از روی بسط $\psi(r, \theta, \varphi)$ برحسب تنها متغیر θ به دست آورد. ولی در واقع، چنین نیست پیش‌بینیهای مربوط به یک اندازه‌گیری L^2 ، بستگی تابع موج به هم θ و هم φ را دخالت می‌دهند. این به این حقیقت وابسته است که L^2 هم روی θ عمل می‌کند و هم روی φ . پس باید فرمول (۱۳۷-۶) را به‌کار ببریم.

۲. موارد خاص و مثالها

فرض کنید تابع موج $\psi(r)$ که معرف حالت ذره است به صورت حاصلضرب تابعی از r تنها در تابعی از θ و φ ظاهر شود

$$\psi(r, \theta, \varphi) = f(r)g(\theta, \varphi) \quad (۱۴۹-۶)$$

همیشه می‌توان فرض کرد که $f(r)$ و $g(\theta, \varphi)$ به‌طور جداگانه به‌نجار هستند

$$\int_0^\infty r^2 dr |f(r)|^2 = 1 \quad (۱۵۰-۶ \text{ الف})$$

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta |g(\theta, \varphi)|^2 = 1 \quad (۱۵۰-۶ \text{ ب})$$

جهت به دست آوردن بسط (۱۳۱-۶) از چنین تابع موجی، کافی است که $g(\theta, \varphi)$ را برحسب ماهانگهای کروی بسط دهیم

$$g(\theta, \varphi) = \sum_l \sum_m d_{l,m} Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (۱۵۱-۶)$$

که در آن

$$d_{l,m} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_l^{m*}(\theta, \varphi) g(\theta, \varphi) \quad (۱۵۲-۶)$$

بنابراین، در این مورد، تمام ضرایب $a_{l,m}(r)$ در فرمول (۱۳۱-۶) متناسب با $f(r)$ هستند

$$a_{l,m}(r) = d_{l,m} f(r) \quad (۱۵۳-۶)$$

با توجه به (۱۴۹-الف)، عبارت (۱۳۶-۶) برای احتمال $\mathcal{P}_{L^2, L_z}(l, m)$ در اینجا خواهد شد

$$\mathcal{P}_{L^2, L_z}(l, m) = |d_{l,m}|^2 \quad (154-6)$$

این احتمال به‌طور کلی مستقل از قسمت شعاع $f(r)$ تابع موج است. همچنین، موردی را در نظر بگیرید که تابع موج $\psi(r, \theta, \varphi)$ از حاصلضرب سه تابع یک متغیری تشکیل شده باشد

$$\psi(r, \theta, \varphi) = f(r)h(\theta)k(\varphi) \quad (155-6)$$

که فرض خواهیم کرد به‌طور مجزا به‌نجار باشند

$$\int_0^\infty r^2 dr |f(r)|^2 = \int_0^\pi \sin \theta d\theta |h(\theta)|^2 = \int_0^{2\pi} d\varphi |k(\varphi)|^2 = 1 \quad (156-6)$$

البته (۱۵۵-۶)، مورد خاصی از (۱۴۸-۶) بوده، و نتایجی که در فوق به‌دست آوردیم در اینجا به‌کار می‌روند. ولی، علاوه بر آن، اگر منظور فقط اندازه‌گیری L_z باشد، کافی است $k(\varphi)$ را به شکل زیر بسط دهیم

$$k(\varphi) = \sum_m e_m \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \quad (157-6)$$

که در آن

$$e_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} d\varphi e^{-im\varphi} k(\varphi) \quad (158-6)$$

تا بتوانیم معادل فرمول (۱۴۲-۶) را با

$$b_m(r, \theta) = e_m f(r)h(\theta) \quad (159-6)$$

به‌دست آوریم. برطبق (۱۵۵-۶)، $\mathcal{P}_{L_z}(m)$ به کمک (۱۴۷-۶) توسط رابطه زیر داده می‌شود

$$\mathcal{P}_{L_z}(m) = |e_m|^2 \quad (160-6)$$

می‌توان ملاحظات قبلی را با چند مثال بسیار ساده متجلی کرد. ابتدا، فرض کنیم که تابع موج $\psi(r)$ در واقع مستقل از θ و φ باشد، به طوری که

$$\begin{cases} h(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2}} \\ k(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \end{cases} \quad (161-6)$$

پس داریم

$$g(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} = Y_0^0(\theta, \varphi) \quad (162-6)$$

بنابراین یک اندازه‌گیری از L_z یا از L^2 باید نتیجه صفر بدهد. حال بستگی به θ را به صورت زیر تغییر می‌دهیم

$$\begin{cases} h(\theta) = \sqrt{\frac{3}{2}} \cos \theta \\ k(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \end{cases} \quad (163-6)$$

در این مورد

$$g(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta = Y_1^0(\theta, \varphi) \quad (164-6)$$

در این حال نیز از نتایج اندازه‌گیری L_z و L^2 مطمئن هستیم. برای L^2 فقط می‌توان $2\hbar^2$ و برای L_z ، مقدار ۰ را به دست آورد. می‌توان تحقیق کرد که این تغییر در بستگی به θ ، و در پیش‌بینیهای فیزیکی مربوط به اندازه‌گیری L_z تغییراتی ایجاد نمی‌کند. برعکس، اگر بستگی به φ را، با قرار دادن، به عنوان مثال

$$\begin{cases} h(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2}} \\ g(\varphi) = \frac{e^{i\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \end{cases} \quad (165-6)$$

تغییر دهیم، $g(\theta, \varphi)$ دیگر برابر یک هماهنگ‌گروی تنها نیست. برطبق (۶-۱۵۹)، تمام احتمالات $\mathcal{P}_{L_z}(m)$ برابر صفرند، بجز

$$\mathcal{P}_{L_z}(m = 1) = 1 \quad (۶-۱۶۶)$$

ولی پیش‌بینیهای مربوط به یک اندازه‌گیری از L_z نیز نسبت به مورد (۶-۱۶۰) عوض می‌شوند. برای محاسبه این پیش‌بینیها، باید تابع

$$g(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} e^{i\varphi} \quad (۶-۱۶۷)$$

را برحسب هماهنگهای گروی بسط دهیم. می‌توان تحقیق کرد که تمام $Y_l^m(\theta, \varphi)$ ها با l فرد و $m = 1$ ، در بسط تابع (۶-۱۶۶) ظاهر می‌شوند. بنابراین، دیگر از نتیجه اندازه‌گیری L_z مطمئن نیستیم (احتمالات نتایج مختلف ممکن می‌توانند از عبارت مربوط به هماهنگهای گروی محاسبه شوند). بنابراین از این مثال نتیجه می‌گیریم که، مطابق آنچه که در قسمت ۱ در بالا متذکر شدیم، بستگی تابع موج به φ نیز در محاسبه پیش‌بینیهای مربوط به اندازه‌گیری L_z دخالت می‌کند.

مراجع برای مطالعه بیشتر:

Dirac (1.13), §§35 and 36;

Messiah (1.17), chap. XIII;

Rose (2.19);

Edmonds (2.21).

۱. مطالعه فنی هماهنگهای کروی $Y_l^m(\theta, \varphi)$ ؛
 بعضی از خواص به کار رفته در فصل ۶ و همچنین
 بعضی مکملهای بعدی را به دست می دهد.

۱. هماهنگهای کروی

۲. رابطه نزدیکی را که بین تکانه زاویه‌ای J یک
 دستگاه و دورانهای فضایی، که می توان به آن
 داد، وجود دارد، آشکار می کند. نشان می دهد
 که روابط جابه جایی بین مؤلفه های J ، خواصی
 کاملاً هندسی از این دورانها را بیان می کند.
 مفهوم یک مشاهده پذیر نرده ای یا برداری را، که در
 مکملهای دیگر (به ویژه مکمل ۴ فصل ۱۰) نیز
 ظاهر می شوند وارد می کند. مهم در زمینه نظری؛
 معذالک گاهی مشکل؛ و می توان آن را بعداً مطالعه
 کرد.

۲. تکانه زاویه‌ای و دورانها

۳. یک کاربرد ساده و مستقیم از خواص کوانتوم
 مکانیکی تکانه زاویه‌ای؛ طیفهای دورانی خالص
 مولکولهای چندقطبی دو اتمی و طیف دورانی
 رامان. در یک سطح مقدماتی باقی می ماند.
 به علت اهمیت پدیده های مورد مطالعه در
 فیزیک و شیمی، مطالعه آن در دور اول توصیه
 می شود.

۳. دوران مولکولهای دو اتمی

۴. می تواند به عنوان یک تمرین حل شده تلقی
 شود. حالتهای مانای نوسانگر هماهنگ دوبعدی را
 مطالعه می کند. برای دسته بندی این حالتها بر حسب
 تکانه زاویه ای، مفهوم "کوانتومهای دایره ای" را وارد
 می کند. اشکال اصولی وجود ندارد. بعضی نتایج
 در مکمل ۵ به کار خواهند رفت.

۴. تکانه زاویه ای حالت‌های مانای نوسانگر
 هماهنگ دوبعدی

۵. ذرهٔ باردار در یک میدان مغناطیسی:
ترازهای لاندائو

۵. مطالعهٔ عمومی خواص یک ذرهٔ باردار در یک میدان مغناطیسی، و متعاقب آن مطالعهٔ یک مورد ویژه مهم که در آن میدان مغناطیسی یکنواخت است (ترازهای لاندائو). بدون اشکال اصولی. مطالعهٔ آن در دور اول توصیه می‌شود، ولی می‌توان مطالعه را به بخشهای ۱-الف، ۱-ب، ۲-الف، ۲-ب، و ۳-الف محدود کرد.

۶. تمرینات

مکمل ۱

هماهنگهای کروی

۱. محاسبه هماهنگهای کروی

الف) تعیین $Y_l^m(\theta, \varphi)$

ب) عبارت عمومی برای $Y_l^m(\theta, \varphi)$

ج) عبارت صریح هماهنگهای کروی برای $l = 0, 1, 2$

۲. خواص هماهنگهای کروی

الف) روابط بازگشتی

ب) روابط راست‌هنجاری و بستاری

ج) پاریتته

د) همیوغ مختلط

ه) رابطه بین هماهنگهای کروی و چندجمله‌ایهای لژاندر و توابع وابسته

این مکمل به مطالعه شکل و خواص اصلی هماهنگهای کروی اختصاص داده شده است. در اینجا بعضی از نتایجی را که بدون اثبات در بخش ۶-۴-۱ ج بیان شدند، اثبات خواهیم کرد.

۱. محاسبه هماهنگهای کروی

برای محاسبه هماهنگهای کروی $Y_l^m(\theta, \varphi)$ از روش نشان داده شده (بخش ۶-۴-۱ ج) استفاده خواهیم کرد: با شروع از عبارت $Y_l^1(\theta, \varphi)$ عملگر L_- را متوالیاً روی آن تأثیر می‌دهیم تا هماهنگهای کروی مربوط به یک مقدار l و $(2l + 1)$ مقدار m وابسته به آن را به دست آوریم. متذکر می‌شویم که عملگرهای L_+ و L_- فقط روی بستگی زاویه‌ای تابع موج عمل کرده و به صورت زیر نوشته می‌شود

$$L_{\pm} = \hbar e^{\pm i\varphi} \left[\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \quad (1)$$

الف) تعیین $Y_l^l(\theta, \varphi)$

دیدیم که (بخش ۶-۴-۱ ج) $Y_l^l(\theta, \varphi)$ می‌تواند از معادله

$$L_+ Y_l^l(\theta, \varphi) = 0 \quad (2)$$

و این واقعیت که

$$Y_l^l(\theta, \varphi) = F_l^l(\theta) e^{il\varphi} \quad (3)$$

به دست آید. پس خواهیم داشت

$$Y_l^l(\theta, \varphi) = c_l (\sin \theta)^l e^{il\varphi} \quad (4)$$

که در آن c_l یک ثابت اختیاری است.

ابتدا، با الزام اینکه $Y_l^l(\theta, \varphi)$ به عنوان تابعی از متغیرهای زاویه‌ای θ و φ بهنجار بماند، قدرمطلق c_l را تعیین می‌کنیم

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta |Y_l^l(\theta, \varphi)|^2 = |c_l|^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta (\sin \theta)^{2l} = 1 \quad (5)$$

بدین ترتیب خواهیم یافت

$$|c_l|^2 = 1/2\pi I_l \quad (6)$$

که I_l توسط انتگرال زیر داده می‌شود (با قرار دادن $u = \cos \theta$)

$$I_l = \int_0^\pi \sin \theta d\theta (\sin \theta)^{2l} = \int_{-1}^{+1} du (1 - u^2)^l \quad (7)$$

I_l به آسانی از رابطه بازگشتی محاسبه می‌شود

$$I_l = \int_{-1}^{+1} du (1 - u^2)(1 - u^2)^{l-1} = I_{l-1} - \int_{-1}^{+1} du u^2 (1 - u^2)^{l-1} \quad (8)$$

با انتگرال‌گیری جزء به جزء از آخرین انتگرال داریم

$$I_l = I_{l-1} - \frac{1}{\sqrt{l}} I_l \quad (9)$$

پس داریم

$$I_l = \frac{\sqrt{l}}{\sqrt{l} + 1} I_{l-1} \quad (10)$$

که در آن مسلماً

$$I_0 = \int_{-1}^{+1} du = 2 \quad (11)$$

از رابطه فوق می‌توان به سهولت مقدار I_l را نتیجه گرفت

$$I_l = \frac{(\sqrt{l})!!}{(\sqrt{l} + 1)!!} I_0 = \frac{2^{\sqrt{l}+1} (l!)^2}{(\sqrt{l} + 1)!} \quad (12)$$

پس $Y_l^i(\theta, \varphi)$ در صورتی بهنجار است که

$$|c_l| = \frac{1}{\sqrt{l}!!} \sqrt{\frac{(\sqrt{l} + 1)!}{4\pi}} \quad (13)$$

برای تعریف کامل c_l ، باید فاز آن را انتخاب کنیم. مرسوم است که آن را به صورت زیر انتخاب می‌کنند

$$c_l = \frac{(-1)^l}{\sqrt{l}!!} \sqrt{\frac{(\sqrt{l} + 1)!}{4\pi}} \quad (14)$$

بعداً خواهیم دید که، با این قرارداد، $Y_l^i(\theta, \varphi)$ (که مستقل از φ است)، دارای یک مقدار مثبت حقیقی برای $\theta = 0$ است.

با عبارت عمومی برای $Y_l^m(\theta, \varphi)$

هماهنگهای کروی دیگر $Y_l^m(\theta, \varphi)$ را با کاربرد متوالی عملگر L_- روی $Y_l^l(\theta, \varphi)$ که در بالا تعیین گردید، به دست خواهیم آورد. در ابتدا، یک فرمول آسان، که محاسبات را ساده می‌کند، اثبات می‌کنیم.

۱. عمل $(L_{\pm})^p$ روی تابعی به شکل $e^{in\varphi} F(\theta)$

عمل عملگر L_+ و L_- روی تابعی به شکل $e^{in\varphi} F(\theta)$ (که n یک عدد صحیح است) توسط رابطه زیر داده می‌شود

$$L_{\pm}[e^{in\varphi} F(\theta)] = \mp \hbar e^{i(n\pm 1)\varphi} (\sin \theta)^{\pm n} \frac{d}{d(\cos \theta)} [(\sin \theta)^{\mp n} F(\theta)] \quad (15)$$

به طور عمومیتر

$$(L_{\pm})^p [e^{in\varphi} F(\theta)] = (\mp \hbar)^p e^{i(n\pm p)\varphi} (\sin \theta)^{p\pm n} \frac{d^p}{d(\cos \theta)^p} [(\sin \theta)^{\mp n} F(\theta)] \quad (16)$$

ابتدا فرمول (۱۵) را محاسبه می‌کنیم. می‌دانیم که

$$\frac{d}{d(\cos \theta)} = \frac{d\theta}{d(\cos \theta)} \frac{d}{d\theta} = -\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \quad (17)$$

بنابراین

$$\begin{aligned} (\sin \theta)^{\pm n} \frac{d}{d(\cos \theta)} [(\sin \theta)^{\mp n} F(\theta)] &= \\ &= (\sin \theta)^{\pm n} \left(-\frac{1}{\sin \theta} \right) \left[\mp n (\sin \theta)^{\mp n-1} \cos \theta F(\theta) + (\sin \theta)^{\mp n} \frac{dF(\theta)}{d\theta} \right] \\ &= - \left[\mp n \cot \theta F(\theta) + \frac{dF(\theta)}{d\theta} \right] \end{aligned} \quad (18)$$

در نتیجه

$$\begin{aligned} \mp e^{i(n\pm 1)\varphi} (\sin \theta)^{\pm n} \frac{d}{d(\cos \theta)} [(\sin \theta)^{\mp n} F(\theta)] &= \left[-n \cot \theta \pm \frac{\partial}{\partial \theta} \right] e^{i(n\pm 1)\varphi} F(\theta) \\ &= e^{\pm i\varphi} \left[\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] e^{in\varphi} F(\theta) \end{aligned} \quad (19)$$

عبارت (۱) برای عملگرهای L_+ و L_- در اینجا ظاهر می‌شود: از این رو رابطه (۱۹) با (۱۵) یکسان است.

حال برای به دست آوردن فرمول (۱۶)، می‌توان به روش بازگشتی استدلال کرد، زیرا برای $p = 1$ رابطه (۱۶) به (۱۵) تقلیل می‌یابد که در فوق اثبات کردیم. بنابراین، فرض کنیم رابطه (۱۶) برای $(p - 1)$ صحت داشته باشد

$$(L_{\pm})^{p-1} [e^{in\varphi} F(\theta)] = (\mp \hbar)^{p-1} e^{i(n \pm p \mp 1)\varphi} (\sin \theta)^{p-1 \pm n} \times \frac{d^{p-1}}{d(\cos \theta)^{p-1}} [(\sin \theta)^{\mp n} F(\theta)] \quad (20)$$

و حالا نشان می‌دهیم که برای p نیز معتبر است. برای این منظور، L_{\pm} را بر هر دو طرف (۲۰) اثر می‌دهیم؛ برای طرف راست، می‌توان از فرمول (۱۵)، با جایگذاری زیر استفاده کرد

$$n \implies n \pm p \mp 1$$

$$F(\theta) \implies (\sin \theta)^{p-1 \pm n} \frac{d^{p-1}}{d(\cos \theta)^{p-1}} [(\sin \theta)^{\mp n} F(\theta)] \quad (21)$$

پس داریم

$$\begin{aligned} (L_{\pm})^p [e^{in\varphi} F(\theta)] &= (\mp \hbar)^p e^{i(n \pm p)\varphi} (\sin \theta)^{\pm n + p} \\ &\times \frac{d}{d(\cos \theta)} \left\{ (\sin \theta)^{\mp n - p + 1} (\sin \theta)^{p-1 \pm n} \frac{d^{p-1}}{d(\cos \theta)^{p-1}} [(\sin \theta)^{\mp n} F(\theta)] \right\} \\ &= (\mp \hbar)^p e^{i(n \pm p)\varphi} (\sin \theta)^{p \pm n} \frac{d^p}{d(\cos \theta)^p} [(\sin \theta)^{\mp n} F(\theta)] \quad (22) \end{aligned}$$

بنابراین، فرمول (۱۶) به روش بازگشتی ثابت شد.

۲. محاسبه $Y_l^m(\theta, \varphi)$ از $Y_l^m(\theta, \varphi)$ همان طور که قبلاً در بخش ۶-۱-۴ ج نشان دادیم، هماهنگیهای کروی $Y_l^m(\theta, \varphi)$ باید در رابطه زیر صدق کنند

$$\begin{aligned} L_{\pm} Y_l^m(\theta, \varphi) &= \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} Y_l^{m \pm 1}(\theta, \varphi) \\ &= \hbar \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)} Y_l^{m \pm 1}(\theta, \varphi) \quad (23) \end{aligned}$$

این روابط به طور خودکار مطمئن می‌سازد که اگر Y_l^m بهنجار باشد $Y_l^{m\pm 1}$ نیز بهنجار است، و فازهای نسبی هماهنگهای کروی متناظر با یک مقدار l و مقادیر مختلف m را تثبیت می‌کنند.

به‌ویژه می‌توان با استفاده از عملگر L_- داده شده توسط (۱) و فرمول (۲۳)، $Y_l^m(\theta, \varphi)$ را از $Y_l^l(\theta, \varphi)$ محاسبه کرد. بدین ترتیب، مستقیماً یک تابع بهنجار $Y_l^m(\theta, \varphi)$ به دست خواهیم آورد که فاز آن بر طبق قراردادی که برای $Y_l^l(\theta, \varphi)$ به کار رفته است [فرمول (۱۴)] تعیین خواهد شد. برای رفتن از $Y_l^l(\theta, \varphi)$ به $Y_l^m(\theta, \varphi)$ باید $(l - m)$ مرتبه عملگر L_- را به کار برد؛ بدین ترتیب، بر طبق (۲۳)، داریم

$$(L_-)^{l-m} Y_l^l(\theta, \varphi) = (\hbar)^{l-m} \sqrt{(2l)(1) \times (2l-1)(2) \times \dots \times (l+m+1)(l-m)} Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (24)$$

یعنی

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!(l-m)!}} \left(\frac{L_-}{\hbar}\right)^{l-m} Y_l^l(\theta, \varphi) \quad (25)$$

بالاخره، با استفاده از رابطه (۴) برای $Y_l^l(\theta, \varphi)$ [که ضریب c_l توسط (۱۴) داده می‌شود] و فرمول (۱۶) (با $n = 1$ و $p = l - m$)، می‌توانیم (۲۵) را به طور صریح به صورت زیر بنویسیم

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}} e^{im\varphi} (\sin \theta)^{-m} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l} \quad (26)$$

۳. محاسبه $Y_l^m(\theta, \varphi)$ از $Y_l^{-l}(\theta, \varphi)$

برای به دست آوردن رابطه (۲۶)، از نتیجه بخش الفدا شروع کردیم. البته همچنین می‌توان ابتدا $Y_l^{-l}(\theta, \varphi)$ را محاسبه کرد و سپس عملگر L_+ را به کار برد. عبارتی که به این طریق برای Y_l^m حاصل می‌شود، متفاوت از (۲۶) است، اگر چه کاملاً معادل آن است.

بنابراین، $Y_l^{-1}(\theta, \varphi)$ را از (۲۶) محاسبه کنیم.^۱ چون

$$(\sin \theta)^{2l} = (1 - \cos^2 \theta)^l \quad (27)$$

یک چندجمله‌ای از درجه $2l$ برحسب $\cos \theta$ است، فقط جمله با بالاترین مرتبه آن در $Y_l^{-1}(\theta, \varphi)$ شرکت می‌کند

$$\frac{d^{2l}}{d(\cos \theta)^{2l}} (\sin \theta)^{2l} = (-1)^l (2l)! \quad (28)$$

بنابراین، به‌سهولت خواهیم یافت

$$Y_l^{-1}(\theta, \varphi) = \frac{1}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} e^{-il\varphi} (\sin \theta)^l \quad (29)$$

لذا، $Y_l^m(\theta, \varphi)$ می‌تواند از $(l+m)$ مرتبه اعمال عملگر L_+ بر $Y_l^{-1}(\theta, \varphi)$ به‌دست آید. با استفاده از (۲۳) و (۱۶)، سرانجام به نتیجه زیر می‌رسیم

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \frac{(-1)^{l+m}}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} e^{im\varphi} (\sin \theta)^m \frac{d^{l+m}}{d(\cos \theta)^{l+m}} (\sin \theta)^{2l} \quad (30)$$

ج) عبارت صریح هماهنگهای کروی برای $l = 0, 1, 2$

فرمولهای عمومی (۲۶) و (۳۰) به‌آسانی هماهنگهای کروی برای اولین مقادیر l را به‌دست می‌دهند

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad (31)$$

۱. به‌وضوح می‌توانستیم Y_l^{-l} را از رابطه زیر به‌دست آوریم

$$L_- Y_l^{-l}(\theta, \varphi) = 0$$

معذالک فاز آن در این صورت اختیاری می‌ماند. با استفاده از (۲۶) به‌طورکامل $Y_l^{-l}(\theta, \varphi)$ را تعیین خواهیم کرد، و فاز آن نتیجه‌ای از قرارداد انتخاب شده در بخش الف-۱ خواهد بود.

$$\begin{cases} Y_l^{\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} \\ Y_l^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \end{cases} \quad (۳۲)$$

$$\begin{cases} Y_l^{\pm 2}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi} \\ Y_l^{\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi} \\ Y_l^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) \end{cases} \quad (۳۳)$$

۲. خواص ماهنگهای کروی

الف) روابط بازگشتی

با توجه به روش ساختن آنها، ماهنگهای کروی در روابط (۲۳) صدق می‌کنند؛ یعنی با توجه به (۱) داریم

$$e^{\pm i\varphi} \left[\pm \frac{\partial}{\partial \theta} - m \cot \theta \right] Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} Y_l^{m \pm 1}(\theta, \varphi) \quad (۳۴)$$

همچنین به فرمول زیر، که اغلب اوقات مفید واقع می‌شود، توجه کنید

$$\begin{aligned} \cos \theta Y_l^m(\theta, \varphi) &= \sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}} Y_{l+1}^m(\theta, \varphi) \\ &+ \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}} Y_{l-1}^m(\theta, \varphi) \end{aligned} \quad (۳۵)$$

می‌توان برای این فرمول یک اثبات مقدماتی ارائه داد، که خطوط عمده آن به صورت زیرند: برطبق (۲۵) داریم

$$\cos \theta Y_l^m = \sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!(l-m)!}} \cos \theta \left(\frac{L_{-}}{\hbar} \right)^{l-m} Y_l^l(\theta, \varphi) \quad (۳۶)$$

حال با استفاده از رابطه (۱) برای L_- ، به سهولت می‌توان تحقیق کرد که

$$[L_-, \cos \theta] = \hbar e^{-i\varphi} \sin \theta \quad (۳۷)$$

و

$$[L_-, e^{-i\varphi} \sin \theta] = 0 \quad (۳۸)$$

سپس با یک استدلال به روش بازگشتی، می‌توان جابه‌جاگر $\left(\frac{L_-}{\hbar}\right)^k$ با $\cos \theta$ را محاسبه کرد؛ اگر فرض کنیم که

$$\left[\left(\frac{L_-}{\hbar}\right)^{k-1}, \cos \theta\right] = (k-1)e^{-i\varphi} \sin \theta \left(\frac{L_-}{\hbar}\right)^{k-2} \quad (۳۹)$$

خواهیم یافت

$$\begin{aligned} \left[\left(\frac{L_-}{\hbar}\right)^k, \cos \theta\right] &= \left(\frac{L_-}{\hbar}\right)^{k-1} \left[\frac{L_-}{\hbar}, \cos \theta\right] + \left[\left(\frac{L_-}{\hbar}\right)^{k-1}, \cos \theta\right] \frac{L_-}{\hbar} \\ &= \left(\frac{L_-}{\hbar}\right)^{k-1} e^{-i\varphi} \sin \theta + (k-1)e^{-i\varphi} \sin \theta \left(\frac{L_-}{\hbar}\right)^{k-1} \end{aligned} \quad (۴۰)$$

یعنی

$$\left[\left(\frac{L_-}{\hbar}\right)^k, \cos \theta\right] = k e^{-i\varphi} \sin \theta \left(\frac{L_-}{\hbar}\right)^{k-1} = k \left(\frac{L_-}{\hbar}\right)^{k-1} e^{-i\varphi} \sin \theta \quad (۴۱)$$

بنابراین، این رابطه به روش بازگشتی برقرار شده است. می‌توان از آن جهت نوشتن (۳۶) به صورت زیر استفاده کرد

$$\cos \theta Y_l^m = \sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!(l-m)!}} \left[\left(\frac{L_-}{\hbar}\right)^{l-m} \cos \theta Y_l^l - (l-m) \left(\frac{L_-}{\hbar}\right)^{l-m-1} e^{-i\varphi} \sin \theta Y_l^l \right] \quad (۴۲)$$

با استفاده از (۴) و (۱۴) می‌توان به سهولت نشان داد که

$$e^{-i\varphi} \sin \theta Y_l^l = -\sqrt{\frac{2l+1}{2l}} (1 - \cos^2 \theta) Y_{l-1}^{l-1} \quad (۴۳)$$

اگر عبارتهای صریح Y_{l+1}^l و Y_{l+1}^{l-1} را از عبارت عمومی (۲۶) محاسبه کنیم، خواهیم یافت

$$\cos \theta Y_l^l = \frac{1}{\sqrt{2l+3}} Y_{l+1}^l \quad (\text{الف-۴۴})$$

$$\cos^2 \theta Y_{l-1}^{l-1} = \frac{2}{2l+1} \sqrt{\frac{l}{2l+3}} Y_{l+1}^{l-1} + \frac{1}{2l+1} Y_{l-1}^{l-1} \quad (\text{ب-۴۴})$$

برای رسیدن به فرمول (۳۵) کافی است که روابط (۴۳) و (۴۴) را در (۴۲) ببریم و از (۲۳) استفاده کنیم.

(ب) روابط راست‌هنجاری و بستاری

هماهنگهای کروی، با توجه به روشی که برای ساختن آنها به‌کار رفته است، مجموعه‌ای از توابع بهنجار تشکیل می‌دهند؛ این توابع متعامد نیز هستند، زیرا ویژه‌تابعهای عملگرهای L_z و L^2 با ویژه‌مقادیر متفاوت هستند. رابطهٔ راست‌هنجاری متناظر عبارت است از

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_l^{m*}(\theta, \varphi) Y_l^{m'}(\theta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (45)$$

می‌توان نشان داد (در اینجا، آن را می‌پذیریم) که هر تابع مجذوراً انتگرال‌پذیر از θ و φ می‌تواند تنها و به یک طریق به هماهنگهای کروی گسترش یابد

$$f(\theta, \varphi) = \sum_l \sum_m c_{l,m} Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (46)$$

که در آن

$$c_{l,m} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_l^{m*}(\theta, \varphi) f(\theta, \varphi) \quad (47)$$

بنابراین مجموعه هماهنگهای کروی یک پایهٔ راست‌هنجار در فضای توابع مجذوراً انتگرال‌پذیر از θ و φ تشکیل می‌دهند. این مطلب را می‌توان توسط رابطهٔ بستاری زیر بیان کرد

$$\sum_l \sum_m Y_l^m(\theta, \varphi) Y_l^{m*}(\theta', \varphi') = \delta(\cos \theta - \cos \theta') \delta(\varphi - \varphi') \quad (48)$$

(ج) پارایته

عمل پارایته روی یک تابع معین در فضای معمولی (فصل دوم مکمل F_{II}) عبارت است از جانشین کردن مختصات هر نقطهٔ فضا در این تابع، توسط مختصات نقطهٔ متقارن با آن نسبت به مبدأ دستگاه مختصات

$$\mathbf{r} \Rightarrow -\mathbf{r} \quad (49)$$

در مختصات کروی، این عمل با جانشینی زیر صورت می‌گیرد (شکل ۶-۲)

$$\begin{aligned} r &\Rightarrow r \\ \theta &\Rightarrow \pi - \theta \\ \varphi &\Rightarrow \pi + \varphi \end{aligned} \quad (50)$$

در نتیجه، اگر از یک پایهٔ سنجهای برای فضای تابع موجهای یک ذره بدون اسپین استفاده کنیم (بخش ۶-۴-۱ د)، قسمت شعاعی توابع پایه $\psi_{k,l,m}(r)$ تحت عمل پاریته بدون تغییر می‌ماند، و تبدیل آنها تنها تبدیل در هماهنگهای کروی است که اکنون می‌خواهیم توضیح دهیم. ابتدا، در جانشینی (50) توجه کنید که

$$\begin{aligned} \sin \theta &\Rightarrow \sin \theta \\ \cos \theta &\Rightarrow -\cos \theta \\ e^{im\varphi} &\Rightarrow (-1)^m e^{im\varphi} \end{aligned} \quad (51)$$

تحت این شرایط، تابع $Y_l^m(\theta, \varphi)$ که در بخش ۱-الف محاسبه کردیم به

$$Y_l^m(\pi - \theta, \pi + \varphi) = (-1)^l Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (52)$$

تبدیل می‌شود. به علاوه

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \theta} &\Rightarrow -\frac{\partial}{\partial \theta} \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} &\Rightarrow \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{aligned} \quad (53)$$

روابط (51) و (53) نشان می‌دهند که عملگرهای L_+ و L_- [فرمولهای (۱)] بدون تغییر می‌مانند [که می‌رساند که L_+ و L_- عملگرهای زوج، به مفهوم تعریف شده در مکمل F_{II} (بخش ۲-الف) هستند]. در نتیجه، بر طبق نتیجه (52) و فرمول (25) که $Y_l^m(\theta, \varphi)$ را محاسبه می‌کند، داریم

$$Y_l^m(\pi - \theta, \pi + \varphi) = (-1)^l Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (54)$$

پس هماهنگهای کروی توابعی هستند با پاریتهٔ معین و مستقل از m . برای l زوج، زوج و برای l فرد، فردند.

دا همیوگ مختلط

به علت بستگی به φ آنها، هماهنگهای کروی توابعی با مقادیر مختلط هستند. با مقایسه عبارتهای (۲۶) و (۳۰) مستقیماً می‌توان دید که

$$[Y_l^m(\theta, \varphi)]^* = (-1)^m Y_l^{-m}(\theta, \varphi) \quad (55)$$

ه) رابطه بین هماهنگهای کروی و چندجمله‌ایهای لژاندر و توابع وابسته بستگی به θ در هماهنگهای کروی در توابعی مستقر است که به عنوان چندجمله‌ایهای لژاندر و توابع لژاندر وابسته شناخته شده‌اند. ما در اینجا نه این توابع را ثابت می‌کنیم و نه حتی تمام خواص آنها را ذکر می‌کنیم، بلکه فقط رابطه آنها را با هماهنگهای کروی نشان می‌دهیم.

۱. $Y_l^*(\theta)$ متناسب است با یک چندجمله‌ای لژاندر به‌ازای $m = 0$ ، فرمول (۲۶) و (۳۰) می‌دهند

$$Y_l^*(\theta) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \frac{d^l}{d(\cos\theta)^l} (\sin\theta)^{2l} \quad (56)$$

که می‌توان آن را به صورت زیر نوشت

$$Y_l^*(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos\theta) \quad (57)$$

که در آن

$$P_l(u) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \frac{d^l}{du^l} (1-u^2)^l \quad (58)$$

برطبق تعریف (۵۸)، دیده می‌شود که $P_l(u)$ یک چندجمله‌ای از درجه l برحسب u با پارامتر $(-1)^l$ است^۱

$$P_l(-u) = (-1)^l P_l(u) \quad (59)$$

۱. پارامتر نسبت به متغیر u . معذالک توجه کنید که عمل پارامتر در فضا [فرمول (۵۰)]، به تغییر $\cos\theta$ به $-\cos\theta$

$P_l(u)$ چندجمله‌ای لژاندر از درجه l است. به سهولت می‌توان نشان داد که در بازه $[-1, +1]$ ، این چندجمله‌ای دارای l صفر می‌باشد، و ضرایب عددی، در (ΔA) ، به گونه‌ای هستند که

$$P_l(1) = 1 \quad (60)$$

همچنین می‌توان ثابت کرد که چندجمله‌ایهای لژاندر یک مجموعه از توابع متعامد تشکیل می‌دهند

$$\int_{-1}^{+1} du P_l(u) P_{l'}(u) = \int_0^\pi \sin \theta d\theta P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'} \quad (61)$$

که می‌توان تابعی را که تنها تابع θ هستند برحسب آنها بسط داد

$$f(\theta) = \sum_l c_l P_l(\cos \theta) \quad (62)$$

با

$$c_l = \frac{2l+1}{2} \int_0^\pi \sin \theta d\theta P_l(\cos \theta) f(\theta) \quad (63)$$

یادداشت:

بر طبق (۵۷) و (۶۰) داریم

$$Y_l^*(0) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \quad (64)$$

همان‌طور که در بخش ۱-الف متذکر شدیم، قرارداد فازی که برای $Y_l^l(\theta, \varphi)$ انتخاب کردیم، به $Y_l^*(0)$ یک مقدار حقیقی و مثبت می‌دهد. ■

۲. $Y_l^m(\theta, \varphi)$ متناسب است با یک تابع لژاندر وابسته

به‌ازای m مثبت، $Y_l^m(\theta, \varphi)$ می‌تواند از اعمال L_+ بر $Y_l^*(\theta)$ به‌دست آید؛ با استفاده از (۲۳)

سجری می‌شود. در این صورت خاصیت (۵۹) توسط رابطه زیر بیان می‌شود

$$Y_l^*(\pi - \theta) = (-1)^l Y_l^*(\theta)$$

که یک مورد ویژه از (۵۴) است.

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \left(\frac{L_+}{\hbar}\right)^m Y_l^*(\theta) \quad (m \geq 0) \quad (65)$$

با استفاده از فرمولهای (۱) و (۱۶) بالاخره خواهیم یافت

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi} \quad (m \geq 0) \quad (66)$$

که در آن P_l^m یک تابع لژاندر وابسته است که توسط رابطه زیر تعریف می شود

$$P_l^m(u) = \sqrt{(1-u^2)} \frac{d^m}{du^m} P_l(u) \quad (-1 \leq u \leq +1) \quad (67)$$

$P_l^m(u)$ عبارت است از حاصلضرب $\sqrt{(1-u^2)}^m$ در یک چندجمله‌ای از درجه $(l-m)$ و پاریمته $(-1)^{l-m}$ ؛ $P_l^*(u)$ همان چندجمله‌ای لژاندر $P_l(u)$ است. مجموعه P_l^m برای یک مقدار ثابت m یک دستگاه توابع متعامد تشکیل می دهد

$$\int_{-1}^{+1} du P_l^m(u) P_l^m(u) = \int_0^\pi \sin\theta d\theta P_l^m(\cos\theta) P_l^m(\cos\theta) = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{ll} \quad (68)$$

که می توان توابعی را که تنها تابع θ هستند برحسب آنها بسط داد.

فرمول (۶۶) برای m مثبت (یا صفر) معتبر است؛ برای m منفی، کافی است از فرمول (۵۵) استفاده کنیم، داریم

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}} P_l^{-m}(\cos\theta) e^{im\varphi} \quad (m < 0) \quad (69)$$

۳. قضیه جمع بندی هماهنگهای کروی

در جهت اختیاری Ou' و Ou'' در فضا در نظر بگیریم، که به ترتیب توسط زوایای قطبی (θ', φ') و (θ'', φ'') تعریف شده و زاویه بین آنها برابر α باشد. می توان رابطه زیر را اثبات کرد

$$\frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos\alpha) = \sum_{m=-l}^{+l} (-1)^m Y_l^m(\theta', \varphi') Y_l^{-m}(\theta'', \varphi'') \quad (70)$$

(که در آن P_l چندجمله‌ای لژاندر از درجه l است). این رابطه به "قضیه جمع‌بندی هماهنگیهای کروی" موسوم است.

مراحل اصلی یک اثبات اولیه از رابطه (۷۰) را نشان خواهیم داد. اول از همه، توجه کنید که، اگر $\cos \alpha$ برحسب زوایای قطبی (θ', φ') و (θ'', φ'') بیان شود، طرف چپ (۷۰) می‌تواند به صورت تابعی از θ' و φ' تلقی شود؛ بنابراین می‌تواند برحسب هماهنگیهای کروی $Y_l^{m'}(\theta', \varphi')$ بسط داده شود. ضرایب این بسط، که البته تابعی از دو متغیر دیگر θ'' و φ'' هستند، نیز می‌توانند برحسب هماهنگیهای کروی $Y_l^{m''}(\theta'', \varphi'')$ بسط داده شوند. پس باید داشته باشیم

$$\frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos \alpha) = \sum_{l', m'} \sum_{l'', m''} c_{l', m'; l'', m''} Y_l^{m'}(\theta', \varphi') Y_l^{m''}(\theta'', \varphi'') \quad (71)$$

که در آن مسئله محاسبه ضرایب $c_{l', m'; l'', m''}$ پیش می‌آید. این ضرایب می‌توانند با استدلال زیر به دست آیند:

۱. در وحله اول، این ضرایب فقط برای

$$l' = l'' = l \quad (72)$$

متفاوت از صفرند. برای نشان دادن این مطلب، ابتدا جهت Ou'' را تثبیت کنیم؛ در این صورت $P_l(\cos \alpha)$ فقط بستگی به θ' و φ' دارد. اگر محور Oz در امتداد Ou'' انتخاب شود، $\cos \alpha = \cos \theta'$ و $P_l(\cos \alpha)$ متناسب با $Y_l^0(\theta')$ می‌شود [رابطه (۵۷)]. برای رسیدن به موردی که جهت Ou'' اختیاری است، دورانی انجام می‌دهیم که Oz را به این جهت بیاورد؛ در این صورت $\cos \alpha$ در نتیجه همچنین $P_l(\cos \alpha)$ تغییر نمی‌کنند. چون عملگر دوران (مکمل ۲ همین فصل بخش ۳-ج قسمت ۳) با L^2 جابه‌جایی‌پذیر است، تبدیل $Y_l^0(\theta')$ به صورت یک ویژه‌تابع L^2 با ویژه‌مقدار $l(l+1)\hbar^2$ ، یعنی به صورت یک ترکیب خطی از هماهنگیهای کروی $Y_l^{m'}(\theta', \varphi')$ ، باقی می‌ماند؛ از این رو داریم $l' = l$. به همین طریق ثابت می‌شود $l'' = l$.

۲. در یک دوران هر دو جهت Ou' و Ou'' به اندازه β حول Oz ، زاویه α و همچنین θ' و θ'' تغییر نمی‌کنند ولی φ' و φ'' به صورت $\varphi' + \beta$ و $\varphi'' + \beta$ در می‌آیند. بنابراین طرف چپ (۷۱) از لحاظ مقدار تغییری نمی‌کند، و هر کدام از عبارتهای طرف راست در $e^{i(m'+m'')\beta}$ ضرب می‌شود. در نتیجه، تنها ضرایب غیرصفر در مجموع طرف راست ضرایبی هستند که در رابطه زیر صدق می‌کنند

$$m' + m'' = 0 \quad (73)$$

۳. با ترکیب نتایج (۷۲) و (۷۳)، می‌بینیم که فرمول (۷۱) می‌تواند به صورت زیر نوشته شود

$$\frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos \alpha) = \sum_{m=-l}^{+l} (-1)^m c_m Y_l^m(\theta', \varphi') Y_l^{-m}(\theta'', \varphi'') \quad (74)$$

اگر قرار دهیم $\theta' = \theta''$ و $\varphi' = \varphi''$ بر طبق (۶۰) داریم

$$\frac{2l+1}{4\pi} = \sum_{m=-l}^{+l} (-1)^m c_m Y_l^m(\theta', \varphi') Y_l^{-m}(\theta', \varphi') \quad (75)$$

چون $(-1)^m Y_l^{-m}$ همان Y_l^{m*} است، انتگرال‌گیری دوطرف (۷۵) نسبت به $d\Omega' = \sin \theta' d\theta' d\varphi'$ با توجه به معادلهٔ راست‌هنجاری (۴۵)، می‌دهد

$$2l+1 = \sum_{m=-l}^{+l} c_m \quad (76)$$

حال مربع قدرمطلق دو طرف (۷۴) را به‌دست آورده و روی $d\Omega'$ و $d\Omega''$ انتگرال می‌گیریم. با استفاده از (۴۵) به‌سادگی ملاحظه می‌شود که طرف راست می‌دهد $|\sum_{m=-l}^{+l} c_m|^2$ و اما آنچه به طرف چپ مربوط است، می‌توان مجدداً از ناوردایی زاویهٔ α نسبت به دوران استفاده کرد و نشان داد که $\int d\Omega' |P_l(\cos \alpha)|^2$ مستقل از (θ'', φ'') است. اگر، برای محاسبهٔ این انتگرال، Ow'' را در امتداد طول Oz انتخاب کنیم، بر طبق رابطهٔ (۶۱) داریم

$$\int d\Omega' |P_l(\cos \alpha)|^2 = \int d\Omega |P_l(\cos \theta)|^2 = 2\pi \times \frac{2}{2l+1} \quad (77)$$

با انتگرال‌گیری روی $d\Omega''$ رابطهٔ دومی بین ضرایب c_m به‌صورت زیر پیدا می‌کنیم

$$2l+1 = \sum_{m=-l}^{+l} |c_m|^2 \quad (78)$$

۴. معادلات (۷۶) و (۷۸) برای تعیین $(2l+1)$ ضریب c_m کافی هستند: تمام آنها برابر ۱ هستند. برای نشان دادن این مطلب، در یک فضای برداری $(2l+1)$ بعدی به‌نحیج شده، بردار \mathbf{X} را با مؤلفه‌های $x_m = c_m/\sqrt{2l+1}$ و بردار \mathbf{Y} را با مؤلفه‌های $y_m = 1/\sqrt{2l+1}$ در نظر بگیریم. نامساوی شوارتز نشان می‌دهد که

$$(\mathbf{X}^* \cdot \mathbf{X})(\mathbf{Y}^* \cdot \mathbf{Y}) \geq |\mathbf{Y}^* \cdot \mathbf{X}|^2 \quad (79)$$

علامت تساوی وقتی برقرار خواهد بود که فقط و فقط \mathbf{X} و \mathbf{Y} متناسب باشند. (۷۶) و (۷۸) نشان می‌دهند که این همان مورد است: بنابراین x_m و c_m و همین‌طور y_m مستقل از m هستند، و الزاماً داریم $c_m = 1$. این مطلب، اثبات فرمول (۷۰) را به اتمام می‌رساند.

مراجع

Messiah (1.17), App. B, §IV; Arfken (10.4), chap. 12; Edmonds (2.21), Table 1; Butkov (10.8), chap. 9, §§5 and 8; Whittaker and Watson (10.12), chap. XV; Bateman (10.39), chap. III; Bass, vol. I, §17-7.

مکمل ۲

تکانه زاویه‌ای و دورانها

۱. مقدمه

۲. مطالعه اجمالی دورانهای هندسی \mathcal{R}

الف) تعریف. پارامتری کردن

ب) دورانهای بینهایت کوچک

۳. عملگرهای دوران در فضای حالتها. مثالی از یک ذره بدون اسپین

الف) وجود و تعریف عملگرهای دوران

ب) خواص عملگرهای دوران R

ج) عبارت عملگرهای دوران برحسب مشاهده‌پذیرهای تکانه زاویه‌ای

۴. عملگرهای دوران در فضای حالتها یک دستگاه اختیاری

الف) دستگاههای چندذره‌ای بدون اسپین

ب) دستگاه اختیاری

۵. دوران مشاهده‌پذیرها

الف) قانون تبدیل عمومی

ب) مشاهده‌پذیرهای نرده‌ای

ج) مشاهده‌پذیرهای برداری

۶. ناوردایی در اثر دوران

الف) ناوردایی قوانین فیزیکی

ب) نتیجه: پایستگی تکانه زاویه‌ای

ج) کاربردها

۱. مقدمه

در این فصل (بخش ۲-۲-۶) نشان دادیم که روابط جابه‌جایی بین مؤلفه‌های یک تکانه زاویه‌ای، در واقع، خواص هندسی دورانها در فضای سه‌بعدی معمولی را بیان می‌کنند. این مطلبی است که می‌خواهیم در این مکمل، با روشن کردن رابطه‌ای که بین دورانها و عملگرهای تکانه زاویه‌ای برقرار است، توضیح دهیم.

یک دستگاه فیزیکی (S) را که حالت کوانتومی آن، در یک زمان معینی، توسط کیت $|\psi\rangle$ از فضای حالت‌های \mathcal{H} مشخص می‌شود در نظر می‌گیریم. روی این دستگاه یک دوران \mathcal{R} انجام می‌دهیم؛ در این موقعیت جدید، حالت دستگاه توسط کیت $|\psi'\rangle$ که متفاوت از $|\psi\rangle$ است توصیف می‌شود. با معلوم بودن تبدیل هندسی \mathcal{R} ، مسئله به تعیین $|\psi'\rangle$ از روی $|\psi\rangle$ منجر می‌شود. خواهیم دید که این مسئله دارای جواب زیر است: به دوران هندسی \mathcal{R} می‌توان یک عملگر خطی R در فضای حالت‌های \mathcal{H} وابسته کرد به طوری که

$$|\psi'\rangle = R |\psi\rangle \quad (1)$$

بر لزوم تمیز بین دوران هندسی \mathcal{R} ، که در فضای معمولی عمل می‌کند، و "تصویر" آن R ، که در فضای حالت‌ها عمل می‌کند، تأکید می‌کنیم

$$\mathcal{R} \implies R \quad (2)$$

با مرور خواص اصلی دوران‌های هندسی \mathcal{R} شروع می‌کنیم (بخش ۲). منظور ما، در اینجا، مطالعه مفصل آنها نیست، بلکه تذکر بعضی نتایجی است که بعداً مورد استفاده قرار خواهد گرفت. سپس، در بخش ۳، از مثالی در مورد ذره بدون اسپین جهت تعیین دقیق عملگرهای دوران، مطالعه مهمترین خواص آنها، و نشان دادن رابطه آنها با عملگرهای تکانه زاویه‌ای \mathbf{L} استفاده می‌کنیم. در این حال می‌توانیم روابط جابه‌جایی بین مؤلفه‌های تکانه زاویه‌ای \mathbf{L} را به عنوان تصویری، در فضای \mathcal{H} ، از مشخصه‌های کاملاً هندسی دوران‌های \mathcal{R} تعبیر کنیم. سپس (در بخش ۴) این مفاهیم را به دستگاه‌های کوانتومی اختیاری تعمیم خواهیم داد. در بخش ۵، رفتار مشاهده‌پذیرهایی را که کمیت فیزیکی قابل اندازه‌گیری را توصیف می‌کنند، در اثر دوران دستگاه مورد نظر بررسی خواهیم کرد. این عمل ما را به طبقه‌بندی مشاهده‌پذیرها برحسب چگونگی تبدیل آنها تحت یک دوران (مشاهده‌پذیرهای زده‌ای، برداری، تانسوری) هدایت خواهد کرد. بالاخره، در بخش ۶، مسئله ناوردایی در اثر دوران را به صورت مختصر مطالعه خواهیم کرد و بعضی از نتایج مهم این ناوردایی را نشان خواهیم داد.

۲. مطالعه اجمالی دوران‌های هندسی \mathcal{R}

الف) تعریف. پارامتری کردن

دوران \mathcal{R} عبارت از یک تبدیل یک به یک از فضای سه‌بعدی است که یک نقطه از این فضا، زویا، فاصله‌ها، و همچنین جهت چارچوب‌های مرجع را پایسته نگاه می‌دارد.^۱ در اینجا، مجموعه‌ای

۱. این آخرین ویژگی به این منظور ضرورت دارد که انعکاس‌های نسبت به یک نقطه یا یک سطح را مستثنی می‌کند.

از دورانها مورد نظر ماست که یک نقطه معین O را، که به عنوان مبدأ چارچوب مرجع انتخاب می‌کنیم، پایسته نگه دارد. بنابراین یک دوران می‌تواند توسط محور دوران (که توسط بردار یکه u یا زوایای قطبی θ و φ آن داده می‌شود) و زاویه دوران α ($0 \leq \alpha < 2\pi$) مشخص شود. بنابراین برای تعیین یک دوران، احتیاج به سه پارامتر است، که می‌توانند مؤلفه‌های یک بردار

$$\alpha = \alpha u \quad (۳)$$

باشند که قدرمطلق آن برابر زاویه دوران است و جهت آن محور دوران را تعیین می‌کند (توجه کنید که یک دوران می‌تواند توسط سه زاویه، به نام زوایای اولر، نیز مشخص شود). دوران هندسی به اندازه زاویه α را حول محوری که توسط بردار یکه u تعریف می‌شود، به $\mathcal{R}_u(\alpha)$ نمایش خواهیم داد. مجموعه دورانهای \mathcal{R} تشکیل یک گروه می‌دهند: حاصلضرب دو دوران (یعنی، تبدیل حاصل از کاربرد پی‌درپی این دو دوران) نیز یک دوران است، یک دوران همانندی (دوران به اندازه زاویه صفر حول یک محور اختیاری) وجود دارد؛ به هر دوران $\mathcal{R}_u(\alpha)$ می‌توان یک دوران وارون $\mathcal{R}_{-u}(\alpha)$ وابسته کرد. گروه دورانها جابه‌جایی‌پذیر نیست: به‌طور کلی، حاصلضرب دو دوران بستگی به ترتیب اعمال آنها دارد^۱

$$\mathcal{R}_u(\alpha)\mathcal{R}_{u'}(\alpha') \neq \mathcal{R}_{u'}(\alpha')\mathcal{R}_u(\alpha) \quad (۴)$$

معذالک، متذکر می‌شویم که دو دوران انجام شده حول یک محور جابه‌جایی‌پذیرند

$$\mathcal{R}_u(\alpha)\mathcal{R}_u(\alpha') = \mathcal{R}_u(\alpha')\mathcal{R}_u(\alpha) = \mathcal{R}_u(\alpha + \alpha') \quad (۵)$$

ب) دورانهای بینهایت کوچک

یک دوران بینهایت نزدیک به دوران همانندی، یعنی، یک دوران $\mathcal{R}_u(d\alpha)$ به اندازه زاویه بینهایت کوچک $d\alpha$ حول یک محور اختیاری u ، یک دوران بینهایت کوچک نامیده می‌شود. به‌سهولت ملاحظه می‌شود که تبدیل یک بردار OM تحت یک دوران بینهایت کوچک $\mathcal{R}_u(d\alpha)$ ، با تقریب مرتبه اول برحسب $d\alpha$ به‌صورت زیر نوشته می‌شود

$$\mathcal{R}_u(d\alpha)OM = OM + d\alpha u \times OM \quad (۶)$$

۱. وقتی می‌نویسیم $\mathcal{R}_1\mathcal{R}_2$ ، منظور این است که نخست باید \mathcal{R}_1 را انجام داد و سپس دوران \mathcal{R}_2 را به نتیجه به‌دست آمده اعمال کرد.

هر دوران معینی می‌تواند به یک تعداد نامحدود از دورانهای بینهایت کوچک تجزیه شود، زیرا زاویه دوران می‌تواند به‌طور پیوسته تغییر کند و اینکه برطبق (۵) داریم

$$\mathcal{R}_u(\alpha + d\alpha) = \mathcal{R}_u(\alpha)\mathcal{R}_u(d\alpha) = \mathcal{R}_u(d\alpha)\mathcal{R}_u(\alpha) \quad (7)$$

که در آن $\mathcal{R}_u(d\alpha)$ یک دوران بینهایت کوچک است. بنابراین، مطالعه گروه دوران می‌تواند به یک بررسی از دورانهای بینهایت کوچک تقلیل یابد.^۱

قبل از ختم این مطالعه اجمالی از خواص دورانهای هندسی، رابطه زیر را که بعداً مفید خواهد بود یادآوری کنیم

$$\mathcal{R}_{e_y}(-d\alpha')\mathcal{R}_{e_x}(d\alpha)\mathcal{R}_{e_y}(d\alpha')\mathcal{R}_{e_x}(-d\alpha) = \mathcal{R}_{e_x}(d\alpha d\alpha') \quad (8)$$

اگر e_x ، e_y و e_z به ترتیب معرف بردارهای یکه سه محور مختصات Ox ، Oy ، و Oz هستند. اگر $d\alpha$ و $d\alpha'$ زوایای بینهایت کوچک مرتبه اول باشند، این رابطه تا تقریب مرتبه دوم صحیح است. در یک مورد خاص، ساختار جابه‌جایی‌ناپذیری گروه دوران را توضیح می‌دهد.

برای اثبات رابطه (۸)، طرف چپ آن را بریک بردار اختیاری OM اثر دهیم، و برای یافتن بردار OM' ، که از تبدیل OM تحت اثر چهار دوران بینهایت کوچک متوالی حاصل می‌شود از فرمول (۶) استفاده کنیم. بی‌درنگ ملاحظه می‌شود که اگر $d\alpha$ صفر باشد، طرف چپ (۸) به حاصلضرب $\mathcal{R}_{e_y}(-d\alpha')\mathcal{R}_{e_y}(d\alpha')$ که برابر دوران همانندی است [فرمول (۵) را ببینید] تقلیل می‌یابد؛ پس باید $OM' - OM$ متناسب با $d\alpha$ باشد. به دلیل مشابه، باید متناسب با $d\alpha'$ نیز باشد. در نتیجه، تفاضل $OM' - OM$ متناسب با $d\alpha d\alpha'$ خواهد بود. بنابراین، برای محاسبه OM' ، باید خود را به مرتبه اول هر کدام از دو زاویه بینهایت کوچک $d\alpha$ و $d\alpha'$ محدود کنیم. در ابتدا، برطبق (۶) داریم

$$\mathcal{R}_{e_x}(-d\alpha)OM = OM - d\alpha e_x \times OM \quad (9)$$

۱. معذالک، با محدود کردن خود به دورانهای بینهایت کوچک، دید خود را از یک خاصیت "کلی" گروه دوران معینی از دست می‌دهیم؛ در واقع یک دوران 2π یک تبدیل همانندی است. عملگرهای دوران (بخش ۳ را ببینید) که از عملگرهای بینهایت کوچک ساخته می‌شوند، اغلب دارای این خاصیت کلی نیستند. در بعضی موارد (مکمل ۱ فصل ۹)، عملگر وابسته به دوران 2π یک عملگر واحد نبوده بلکه متقابل آن است.

سپس باید $\mathcal{R}_{e_y}(d\alpha')$ را بر این بردار اثر دهیم؛ این هم می‌تواند توسط فرمول (۶) انجام شود

$$\begin{aligned} & \mathcal{R}_{e_y}(d\alpha')\mathcal{R}_{e_x}(-d\alpha)OM \\ &= (OM - d\alpha e_x \times OM) + d\alpha' e_y \times (OM - d\alpha e_x \times OM) \\ &= OM - d\alpha e_x \times OM + d\alpha' e_y \times OM - d\alpha d\alpha' e_y \times (e_x \times OM) \end{aligned} \quad (10)$$

اثر $\mathcal{R}_{e_x}(d\alpha)$ روی بردار ظاهرشونده در طرف راست (۱۰) معادل با این است که به این بردار، جملات بینهایت کوچک زیر را اضافه کنیم

$$d\alpha e_x \times OM + d\alpha d\alpha' e_x \times (e_y \times OM) \quad (11)$$

که از ضرب برداری طرف راست (۱۰) در $d\alpha e_x$ و حفظ فقط جملات از مرتبه اول $d\alpha$ به دست می‌آید.
پس

$$\begin{aligned} & \mathcal{R}_{e_x}(d\alpha)\mathcal{R}_{e_y}(d\alpha')\mathcal{R}_{e_x}(-d\alpha)OM \\ &= OM + d\alpha' e_y \times OM + d\alpha d\alpha' [e_x \times (e_y \times OM) - e_y \times (e_x \times OM)] \end{aligned} \quad (12)$$

بالاخره، OM' برابر با حاصل جمع بردار به دست آمده در فوق، و حاصلضرب برداری آن در $-d\alpha' e_y$ است. در تقریب مرتبه اول $d\alpha'$ ، این حاصلضرب برداری می‌تواند به سهولت به صورت زیر نوشته شود

$$-d\alpha' e_y \times OM \quad (13)$$

که می‌رساند که

$$\begin{aligned} & \mathcal{R}_{e_y}(-d\alpha')\mathcal{R}_{e_x}(d\alpha)\mathcal{R}_{e_y}(d\alpha')\mathcal{R}_{e_x}(-d\alpha)OM \\ &= OM + d\alpha d\alpha' [e_x \times (e_y \times OM) - e_y \times (e_x \times OM)] \end{aligned} \quad (14)$$

آنگاه تبدیل حاصلضربهای برداری دوگانه آسان است، پس به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{e_y}(-d\alpha')\mathcal{R}_{e_x}(d\alpha)\mathcal{R}_{e_y}(d\alpha')\mathcal{R}_{e_x}(-d\alpha)OM &= OM + d\alpha d\alpha' e_z \times OM \\ &= \mathcal{R}_{e_z}(d\alpha d\alpha')OM \end{aligned} \quad (15)$$

چون این رابطه برای هر بردار OM برقرار است، رابطه (۸) ثابت می‌شود.

۳. عملگرهای دوران در فضای حالتها. مثالی از یک ذره بدون اسپین

در این قسمت، یک دستگاه فیزیکی را در نظر می‌گیریم که از یک ذره (بدون اسپین) منفرد در فضای سه‌بعدی تشکیل شده باشد.

الف) وجود و تعریف عملگرهای دوران

در یک زمان معین، حالت کوانتومی ذره، در فضای حالت‌های \mathcal{E}_r را توسط کیت $\langle \psi |$ ، که به آن تابع موج $\langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \psi(\mathbf{r})$ وابسته است، مشخص می‌کنیم. حال یک دوران \mathcal{R} روی این دستگاه انجام می‌دهیم که به نقطه $\mathbf{r}_0(x_0, y_0, z_0)$ از فضا نقطه $\mathbf{r}'_0(x'_0, y'_0, z'_0)$ را وابسته کند، به طوری که

$$\mathbf{r}'_0 = \mathcal{R}\mathbf{r}_0 \quad (۱۶)$$

فرض می‌کنیم $\langle \psi' |$ بردار حالت دستگاه بعد از دوران، و $\langle \mathbf{r} | \psi' \rangle = \psi'(\mathbf{r})$ تابع موج متناظر با آن باشد. طبیعتاً می‌توان فرض کرد که مقدار تابع موج اولیه $\psi(\mathbf{r})$ در نقطه \mathbf{r}_0 ، بعد از دوران، همان مقدار تابع موج نهایی $\psi'(\mathbf{r})$ در نقطه \mathbf{r}'_0 است که توسط (۱۶) داده می‌شود

$$\psi'(\mathbf{r}'_0) = \psi(\mathbf{r}_0) \quad (۱۷)$$

یعنی

$$\psi'(\mathbf{r}'_0) = \psi(\mathcal{R}^{-1}\mathbf{r}'_0) \quad (۱۸)$$

چون این رابطه برای هر نقطه \mathbf{r}'_0 از فضا معتبر است، می‌تواند به صورت زیر نوشته شود

$$\psi'(\mathbf{r}) = \psi(\mathcal{R}^{-1}\mathbf{r}) \quad (۱۹)$$

بنابه تعریف، عملگر R در فضای حالت‌های \mathcal{E}_r وابسته به دوران هندسی مورد نظر \mathcal{R} ، عملگری است که، با اثر روی $\langle \psi |$ قبل از دوران، حالت $\langle \psi' |$ بعد از دوران \mathcal{R} را بدهد

$$\langle \psi' | = \langle \psi | R \quad (۲۰)$$

R را "عملگر دوران" نامند. رابطه (۱۹) اثر آن را در نمایش $\{ | \mathbf{r} \rangle \}$ مشخص می‌کند

$$\langle \mathbf{r} | R | \psi \rangle = \langle \mathcal{R}^{-1}\mathbf{r} | \psi \rangle \quad (۲۱)$$

که $\langle \mathcal{R}^{-1}\mathbf{r} |$ بردار پایه این نمایش بوده که توسط مؤلفه‌های بردار $\mathbf{R}^{-1}\mathbf{r}$ تعیین می‌شود.

یادداشت:

حالت ذره بعد از دوران می‌توانست به جای ψ' به صورت $\langle \psi' | e^{i\theta}$ باشد θ یک عدد حقیقی اختیاری است، بدون اینکه خواص فیزیکی آن تغییر کند. به عبارت دیگر، رابطه (۱۷) می‌تواند توسط فرمول زیر جانشین شود

$$\psi'(\mathbf{r}'_0) = e^{i\theta} \psi(\mathbf{r}_0) \quad (22)$$

θ به وضوح مستقل از \mathbf{r}_0 است ولی می‌تواند به دوران \mathcal{R} بستگی داشته باشد. این اشکال را در اینجا مطرح نخواهیم کرد.

ب) خواص عملگرهای دوران R

۱. R یک عملگر خطی است

این خاصیت اساسی عملگرهای دوران در اینجا از خود تعریفشان ناشی می‌شود. به عنوان مثال، اگر حالت $|\psi\rangle$ قبل از دوران یک برهم‌نهی خطی از حالتها باشد

$$|\psi\rangle = \lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle \quad (23)$$

فرمول (۲۱) نشان می‌دهد که

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | R | \psi \rangle &= \lambda_1 \langle \mathcal{R}^{-1} \mathbf{r} | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \mathcal{R}^{-1} \mathbf{r} | \psi_2 \rangle \\ &= \lambda_1 \langle \mathbf{r} | R | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \mathbf{r} | R | \psi_2 \rangle \end{aligned} \quad (24)$$

چون این رابطه برای هر کیت از پایه $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ صادق است، نتیجه می‌گیریم که R یک عملگر خطی است

$$R | \psi \rangle = R[\lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle] = \lambda_1 R | \psi_1 \rangle + \lambda_2 R | \psi_2 \rangle \quad (25)$$

۲. R یکانی است

در فرمول (۲۱)، کیت $|\psi\rangle$ می‌تواند اختیاری باشد. پس اثر عملگر R روی برای $\langle \mathbf{r} |$ توسط رابطه زیر داده می‌شود

$$\langle \mathbf{r} | R = \langle \mathcal{R}^{-1} \mathbf{r} | \quad (26)$$

با گرفتن همیوگ هرمیتی از دو طرف رابطه (۲۶)، خواهیم یافت

$$R^\dagger | \mathbf{r} \rangle = | \mathcal{R}^{-1} \mathbf{r} \rangle \quad (27)$$

از طرف دیگر، اگر به یاد آوریم که کیت $| \mathbf{r} \rangle$ حالتی را مشخص می‌کند که در آن ذره در نقطه \mathbf{r} کاملاً جایگزیده است می‌بینیم که

$$R | \mathbf{r} \rangle = | \mathcal{R} \mathbf{r} \rangle \quad (28)$$

این رابطه به سادگی این حقیقت را بیان می‌کند که اگر ذره قبل از دوران در نقطه \mathbf{r} جایگزیده باشد، بعد از دوران در نقطه $\mathbf{r}' = \mathcal{R} \mathbf{r}$ جایگزیده خواهد بود. برای به دست آوردن (۲۸) از روی (۲۱)، برای ψ یک حالت پایه $\langle \mathbf{r}_0 |$ انتخاب می‌کنیم

$$\langle \mathbf{r} | R | \mathbf{r}_0 \rangle = \langle \mathcal{R}^{-1} \mathbf{r} | \mathbf{r}_0 \rangle = \delta[(\mathcal{R}^{-1} \mathbf{r}) - \mathbf{r}_0] \quad (29)$$

که در آن از رابطه راست‌هنجاری پایه $\{ | \mathbf{r} \rangle \}$ استفاده کرده‌ایم. اما از طرف دیگر

$$\delta[(\mathcal{R}^{-1} \mathbf{r}) - \mathbf{r}_0] = \delta[\mathbf{r} - (\mathcal{R} \mathbf{r}_0)] \quad (30)$$

با جایگذاری (۳۰) در (۲۹)، در واقع خواهیم یافت

$$\langle \mathbf{r} | R | \mathbf{r}_0 \rangle = \delta[\mathbf{r} - (\mathcal{R} \mathbf{r}_0)] = \langle \mathbf{r} | \mathcal{R} \mathbf{r}_0 \rangle \quad (31)$$

یعنی، چون $\{ | \mathbf{r} \rangle \}$ پایه‌ای از \mathcal{E}_r است

$$R | \mathbf{r}_0 \rangle = | \mathcal{R} \mathbf{r}_0 \rangle \quad (32)$$

با شروع از فرمولهای (۲۷) و (۲۸) به آسانی می‌توان نشان داد که

$$RR^\dagger = R^\dagger R = \mathbf{1} \quad (33)$$

۱. رابطه (۳۰) می‌تواند به سهولت با استفاده از تعریف "توابع" دلنا و این حقیقت که یک دوران عنصر حجمی بیتهايت کوچک را پایسته نگاه می‌دارد، برقرار شود.

اثر RR^\dagger یا $R^\dagger R$ روی هر بردار از پایه $\{|r\rangle\}$ همان بردار را می‌دهد. به عنوان مثال

$$RR^\dagger |r\rangle = R |R^{-1}r\rangle = |RR^{-1}r\rangle = |r\rangle \quad (۳۴)$$

بنابراین عملگر R یکانی است.

یادداشت:

بنابراین عملگر R حاصلضرب نرده‌ای و هنجار بردارهایی را که تبدیل می‌کند پایسته نگاه می‌دارد

$$\left. \begin{aligned} |\psi'\rangle &= R |\psi\rangle \\ |\varphi'\rangle &= R |\varphi\rangle \end{aligned} \right\} \Rightarrow \langle \varphi' | \psi' \rangle = \langle \varphi | \psi \rangle \quad (۳۵)$$

این خاصیت از دیدگاه فیزیکی بسیار مهم است زیرا دامنه‌های احتمالی که پیش‌بینیهای فیزیکی را می‌دهند به شکل حاصلضرب دوکت ظاهر می‌شوند. ■

۳. مجموعه عملگرهای R نمایشی از گروه دوران تشکیل می‌دهند نشان دادیم (بخش ۲) که دورانهای هندسی تشکیل یک گروه می‌دهند؛ به ویژه، حاصلضرب دو دوران \mathcal{R}_1 و \mathcal{R}_2 همیشه یک دوران است

$$\mathcal{R}_2 \mathcal{R}_1 = \mathcal{R}_3 \quad (۳۶)$$

با سه دوران هندسی \mathcal{R}_1 ، \mathcal{R}_2 و \mathcal{R}_3 ، در فضای حالتی \mathcal{E}_3 ، به ترتیب سه عملگر دورانی R_1 ، R_2 و R_3 وابسته‌اند. اگر این سه دوران هندسی در رابطه (۳۶) صدق کنند، نشان خواهیم داد که عملگرهای دوران متناظر طوری هستند که

$$R_2 R_1 = R_3 \quad (۳۷)$$

(همان‌طور که در فصل دوم، بخش ۳-۱، تعریف شد، $R_2 R_1$ حاصلضرب عملگرهایی از \mathcal{E}_3 هستند).

ذره‌ای در نظر بگیرید که حالت آن توسط یک یت اختیاری $|r\rangle$ ، از پایه‌ای که نمایش $\{|r\rangle\}$ را مشخص می‌کند توصیف شود. اگر روی این ذره دوران \mathcal{R}_1 را انجام دهیم، حالت آن، بنابه تعریف R_1 ، می‌شود

$$R_1 |r\rangle = |\mathcal{R}_1 r\rangle \quad (۳۸)$$

حال دوران \mathcal{R}_2 را روی حالت جدید که هم‌اکنون به دست آوردیم، اثر دهیم؛ حالت ذره بعد از این دوران دوم، بر طبق (۳۸) و تعریف R_2 عبارت است از

$$R_2 R_1 |r\rangle = R_2 | \mathcal{R}_1 r \rangle = | \mathcal{R}_2 \mathcal{R}_1 r \rangle \quad (39)$$

اگر (۳۶) را به حساب آوریم، ملاحظه می‌کنیم که (۳۹) معادل است با

$$R_2 R_1 |r\rangle = | \mathcal{R}_2 r \rangle \quad (40)$$

عملگر R_2 وابسته به دوران \mathcal{R}_2 طوری است که

$$R_2 |r\rangle = | \mathcal{R}_2 r \rangle \quad (41)$$

بنابراین رابطه (۳۷) ثابت می‌شود، زیرا یک مورد نظر $|r\rangle$ می‌تواند به یک طریق اختیاری از پایه $\{|r\rangle\}$ انتخاب شود.

برای بیان نتیجه مهمی که هم‌اکنون به دست آوردیم، می‌گوییم که متناظر $R \Rightarrow \mathcal{R}$ بین دورانهای هندسی و عملگرهای دوران قانون گروه را پایسته می‌دارد، یا اینکه مجموعه عملگرهای R تشکیل یک "نمایش" از گروه دورانها می‌دهند. البته، با دوران همانندی عملگر همانندی در \mathcal{E}_3 وابسته است، و با دوران \mathcal{R}^{-1} (وارون دوران \mathcal{R})، عملگر R^{-1} ، وارون عملگری که متناظر با \mathcal{R} است، وابسته است (به علاوه، در بخش ۳-ب، قسمت ۲ نشان دادیم که $R^{-1} = R^\dagger$).

ج) عبارت عملگرهای دوران برحسب مشاهده‌پذیرهای تکانه زاویه‌ای

۱. عملگرهای دوران بینهایت کوچک

در ابتدا، یک دوران بینهایت کوچک حول محور Oz در نظر می‌گیریم و آنرا به $\mathcal{R}_{e_z}(d\alpha)$ نمایش می‌دهیم. اگر این عملگر را بر ذره‌ای که حالت آن توسط تابع موج $\psi(r)$ توصیف می‌شود اثر دهیم، بر طبق (۱۹) می‌دانیم که تابع موج $\psi'(r)$ وابسته به حالت ذره بعد از دوران در رابطه زیر صادق است

$$\psi'(r) = \psi[\mathcal{R}_{e_z}^{-1}(d\alpha)r] \quad (42)$$

اما اگر (x, y, z) مؤلفه‌های \mathbf{r} باشند، مؤلفه‌های $\mathcal{R}_{\mathbf{e}_z}^{-1}(\mathbf{d}\cdot\mathbf{r})\mathbf{r}$ می‌توانند به آسانی از (۶) محاسبه شوند

$$\mathcal{R}_{\mathbf{e}_z}^{-1}(\mathbf{d}\alpha)\mathbf{r} = \mathcal{R}_{-\mathbf{e}_z}(\mathbf{d}\alpha)\mathbf{r} = (\mathbf{r} - \mathbf{d}\alpha \mathbf{e}_z \times \mathbf{r}) \begin{cases} x + y \mathbf{d}\alpha \\ y - x \mathbf{d}\alpha \\ z \end{cases} \quad (۴۳)$$

بنابراین معادله (۴۳) می‌تواند به صورت زیر نوشته شود

$$\psi'(x, y, z) = \psi(x + y \mathbf{d}\alpha, y - x \mathbf{d}\alpha, z) \quad (۴۴)$$

که با تقریب مرتبه اول $\mathbf{d}\alpha$ می‌دهد

$$\begin{aligned} \psi'(x, y, z) &= \psi(x, y, z) + \mathbf{d}\alpha \left[y \frac{\partial \psi}{\partial x} - x \frac{\partial \psi}{\partial y} \right] \\ &= \psi(x, y, z) - \mathbf{d}\alpha \left[x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right] \psi(x, y, z) \end{aligned} \quad (۴۵)$$

عبارت داخل کروشه، با تقریب ضریب \hbar/i ، عبارت عملگر $L_z = XP_y - YP_x$ در نمایش $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ است. بنابراین به نتیجه زیر می‌رسیم

$$\psi'(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi' \rangle = \langle \mathbf{r} | \left(1 - \frac{i}{\hbar} \mathbf{d}\alpha L_z \right) | \psi \rangle \quad (۴۶)$$

بنابراین تعریف عملگر $R_{\mathbf{e}_z}$ وابسته به دوران $R_{\mathbf{e}_z}$ داریم

$$|\psi'\rangle = R_{\mathbf{e}_z}(\mathbf{d}\alpha) |\psi\rangle \quad (۴۷)$$

بنابراین، چون حالت اصلی $|\psi\rangle$ اختیاری است، سرانجام خواهیم یافت

$$\boxed{R_{\mathbf{e}_z}(\mathbf{d}\alpha) = 1 - \frac{i}{\hbar} \mathbf{d}\alpha L_z} \quad (۴۸)$$

استدلال قبلی می‌تواند به آسانی به یک دوران بینهایت کوچک حول یک محور اختیاری تعمیم داده شود. بنابراین در حالت کلی داریم

$$R_u(d\alpha) = 1 - \frac{i}{\hbar} d\alpha \mathbf{L} \cdot \mathbf{u} \quad (49)$$

یادداشت:

(۴۶) نیز می‌تواند بی‌درنگ با استفاده از مختصات کروی (r, θ, φ) به دست آید، زیرا در این صورت L_z به عملگر دیفرانسیلی $(\hbar/i)\partial/\partial\varphi$ دالت می‌کند. ■

۲. تعبیر روابط جابه‌جایی بین مؤلفه‌های تکانه زاویه‌ای \mathbf{L} پس منظور از "تصویر" رابطه (۸) در فضای حالت‌های \mathcal{E}_r چیست؟ برطبق نتایج بخش ۳-ب، قسمت ۳ و عبارتهایی که هم‌اکنون به دست آوردیم، این رابطه می‌رساند که، با تقریب مرتبه اول نسبت به هر کدام از زوایای $d\alpha$ و $d\alpha'$ ، خواهیم داشت

$$\left[1 + \frac{i}{\hbar} d\alpha' L_y \right] \left[1 - \frac{i}{\hbar} d\alpha L_x \right] \left[1 - \frac{i}{\hbar} d\alpha' L_y \right] \left[1 + \frac{i}{\hbar} d\alpha L_x \right] = 1 - \frac{i}{\hbar} d\alpha d\alpha' L_z \quad (50)$$

با بسط طرف چپ و برابر قرار دادن ضرایب $d\alpha d\alpha'$ ، به سهولت رابطه (۵۰) به صورت زیر تقلیل می‌یابد

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z \quad (51)$$

البته، با استدلال مشابه، دو رابطه دیگر جابه‌جایی بین مؤلفه‌های \mathbf{L} می‌توانند از فرمولهای به دست آمده از (۸) توسط تبدیل دوره‌ای بردارهای e_x ، e_y ، و e_z به دست آیند. بدین ترتیب، روابط جابه‌جایی تکانه زاویه‌ای مداری یک ذره می‌تواند به صورت نتایجی از ساختار جابه‌جایی‌ناپذیری گروه دوران هندسی ظاهر شود.

۳. عملگرهای دوران محدود

حال یک دوران $\mathcal{R}_{e_z}(\alpha)$ به اندازه یک زاویه اختیاری α حول محور Oz در نظر می‌گیریم. برطبق فرمول (۷)، عملگر R_{e_z} وابسته به چنین دورانی باید در رابطه زیر صدق کند (مجدداً از نتایج

بخش ۳-ب، قسمت ۳ استفاده می‌کنیم)

$$R_{e_z}(\alpha + d\alpha) = R_{e_z}(\alpha)R_{e_z}(d\alpha) \quad (52)$$

که در آن دو عملگر طرف راست جابه‌جایی پذیرند. اما عبارت $R_{e_z}(d\alpha)$ را می‌شناسیم، به طوری که داریم

$$R_{e_z}(\alpha + d\alpha) = R_{e_z}(\alpha) \left[1 - \frac{i}{\hbar} d\alpha L_z \right] \quad (53)$$

یعنی

$$R_{e_z}(\alpha + d\alpha) - R_{e_z}(\alpha) = -\frac{i}{\hbar} d\alpha R_{e_z}(\alpha) L_z \quad (54)$$

در اینجا نیز $R_{e_z}(\alpha)$ و L_z باید جابه‌جایی پذیر باشند. اگرچه منظور ما عملگرها هستند، جواب معادله (۵۴) قطعاً همان جوابی است که اگر یک تابع معمولی از متغیر α در نظر می‌گرفتیم

$$\boxed{R_{e_z}(\alpha) = e^{-i/\hbar \alpha L_z}} \quad (55)$$

در واقع، اگر متذکر شویم (مکمل ۲ فصل ۴) که تابع نمایی یک عملگر توسط آن به سری تام متناظر تعریف می‌شود، به سهولت ثابت می‌شود که عبارت (۵۵) جواب معادله (۵۴) است. به علاوه، "ثابت انتگرال‌گیری" برابر ۱ است، زیرا می‌دانیم که

$$R_{e_z}(0) = 1 \quad (56)$$

نظیر بخش ۳-ج، قسمت ۱، این نتیجه به سهولت قابل تعمیم به یک دوران یعنی حول یک محور اختیاری است

$$\boxed{R_u(\alpha) = e^{-i/\hbar \alpha L \cdot u}} \quad (57)$$

یادداشتها:

۱. فرمول (۵۷) می‌تواند به صورت زیر تصریح شود

$$R_u(\alpha) = e^{-(i/\hbar)\alpha(L_x u_x + L_y u_y + L_z u_z)} \quad (58)$$

که در آن u_x, u_y, u_z مؤلفه‌های بردار یکه u هستند. مع‌ذالک، متذکر می‌شویم که چون L_x ، L_y و L_z جابه‌جایی‌پذیر نیستند، داریم

$$R_u(\alpha) \neq e^{-i/\hbar\alpha L_x u_x} e^{-i/\hbar\alpha L_y u_y} e^{-i/\hbar\alpha L_z u_z} \quad (59)$$

۲. از عبارت (۵۷) می‌توان دید که عملگر $R_u(\alpha)$ یکانی است. چون مؤلفه‌های L هرمیتی هستند، داریم

$$[R_u(\alpha)]^\dagger = e^{i/\hbar\alpha L \cdot u} \quad (60)$$

که از آن نتیجه می‌شود

$$[R_u(\alpha)]^\dagger R_u(\alpha) = R_u(\alpha)[R_u(\alpha)]^\dagger = 1 \quad (61)$$

(زیرا $L \cdot u$ مسلماً با خودش جابه‌جایی‌پذیر است).

۳. در مورد خاصی که در این قسمت بررسی می‌کنیم، در می‌یابیم که

$$R_u(2\pi) = 1 \quad (62)$$

به اثبات این نتیجه برای دوران 2π حول محور Oz بسنده خواهیم کرد (تعمیم این اثبات هیچ مشکلی ایجاد نمی‌کند). برای این منظور، یک کیت اختیاری $|\psi\rangle$ در نظر بگیریم، و آن را در پایه‌ای مرکب از ویژه‌بردارهای مشاهده‌پذیر L_z بسط دهیم

$$|\psi\rangle = \sum_{m,\tau} c_{m,\tau} |m,\tau\rangle \quad (63)$$

با

$$L_z |m,\tau\rangle = m\hbar |m,\tau\rangle \quad (64)$$

τ شاخصهایی غیر از m را می‌نمایند که برای مشخص کردن بردارهای پایه به‌کار رفته لازم‌اند؛ این پایه ممکن است، به‌عنوان مثال، "پایه‌ای" سنج‌های $\{|k, l, m\rangle\}$ نظیر آنچه در بخش ۳-۳-۶ معرفی کردیم باشند). در این صورت عمل $R_{e_z}(\alpha)$ روی $|\psi\rangle$ به آسانی به‌دست می‌آید.

$$\begin{aligned} R_{e_z}(\alpha) |\psi\rangle &= \sum_{m,\tau} c_{m,\tau} e^{-i/\hbar \alpha L_z} |m,\tau\rangle \\ &= \sum_{m,\tau} c_{m,\tau} e^{-i\alpha m} |m,\tau\rangle \end{aligned} \quad (65)$$

اما می‌دانیم که، برای تکانه زاویه‌ای مداری یک ذره، m همیشه عدد صحیح است. در نتیجه، وقتی α به مقدار 2π می‌رسد، تمام ضرایب $e^{-i\alpha m}$ برابر ۱ می‌شوند، و

$$R_{e_z}(2\pi) |\psi\rangle = \sum_{m,\tau} c_{m,\tau} |m,\tau\rangle = |\psi\rangle \quad (66)$$

چون این رابطه برای هر $|\psi\rangle$ صادق است، نتیجه می‌گیریم که $R_{e_z}(2\pi)$ یک عملگر همانندی است.

استدلال قبلی به‌وضوح می‌رساند که اگر مقادیر نیمه‌صحیح m کنار گذاشته نشوند فرمول (۶۲) معتبر نخواهد بود. در واقع، درمکمل ۱ فصل ۹ خواهیم دید که، برای یک اسپین $1/2$ ، عملگر وابسته به یک دوران 2π برابر -1 است نه 1 ؛ این نتیجه با این واقعیت در ارتباط است که ما دورانه‌های محدود را از دورانه‌های بینهایت کوچک ساخته‌ایم (با نوشتن صفحه ۳۹۶). ■

۴. عملگرهای دوران در فضای حالت‌های یک دستگاه اختیاری

حال مفاهیمی را که در بخش ۳ برای یک مورد بخصوص معرفی کردیم و نتایجی را که به‌دست آوردیم تعمیم می‌دهیم.

الف) دستگاه‌های چندذره‌ای بدون اسپین

اول از همه، می‌توان دلایل بخش ۳ را بدون اشکال به دستگاه‌های مرکب از چند ذره بدون اسپین بسط داد. این مطلب را سریعاً با انتخاب دستگاهی متشکل از دو ذره بدون اسپین (۱) و (۲) نشان خواهیم داد.

فضای حالت‌های \mathcal{E} برای یک چنین دستگاهی حاصلضرب تانسوری فضاهای حالت‌های \mathcal{E}_1

و \mathcal{E}_{R_2} از دو ذره است

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_{R_1} \otimes \mathcal{E}_{R_2} \quad (۶۷)$$

از همان نمادهای بخش F-۴-b از فصل دوم استفاده خواهیم کرد. با شروع از مشاهده‌پذیرهای مکان و تکانه (R_1 و P_1 از یک طرف و R_2 و P_2 از طرف دیگر) می‌توان یک تکانه زاویه‌ای مداری برای هر کدام از ذرات تعریف کرد

$$\begin{aligned} L_1 &= R_1 \times P_1 \\ L_2 &= R_2 \times P_2 \end{aligned} \quad (۶۸)$$

مؤلفه‌های L_1 ، همچنین مؤلفه‌های L_2 ، در روابط جابه‌جایی ویژه تکانه زاویه‌ای صدق می‌کنند. برداری را در نظر بگیرید که برابر حاصلضرب تانسوری یک بردار \mathcal{E}_{R_1} و یک بردار \mathcal{E}_{R_2} باشد

$$|\psi\rangle = |\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle \quad (۶۹)$$

$|\psi\rangle$ معرف حالت دستگاه متشکل از ذره (۱) در حالت $|\varphi(1)\rangle$ و ذره (۲) در حالت $|\chi(2)\rangle$ است. اگر دورانی به اندازه زاویه α حول u روی دستگاه دو ذره‌ای انجام دهیم، حالت دستگاه بعد از دوران متناظر با اجتماع دو ذره در "حالت‌های دوران یافته" $|\varphi'(1)\rangle$ و $|\chi'(2)\rangle$ است

$$|\psi'\rangle = |\varphi'(1)\rangle \otimes |\chi'(2)\rangle = [R_u^\lambda(\alpha) |\varphi(1)\rangle] \otimes [R_u^\nu(\alpha) |\chi(2)\rangle] \quad (۷۰)$$

که در آن $R_u^\lambda(\alpha)$ و $R_u^\nu(\alpha)$ عملگرهای دوران در \mathcal{E}_{R_1} و \mathcal{E}_{R_2} هستند

$$R_u^\lambda(\alpha) = e^{-(i/\hbar)\alpha L_{1,u}} \quad (\text{الف-۷۱})$$

$$R_u^\nu(\alpha) = e^{-(i/\hbar)\alpha L_{2,u}} \quad (\text{ب-۷۱})$$

بنابر تعریف ضرب تانسوری دو عملگر (فصل دوم، بخش F-۲-b)، می‌توان رابطه (۷۰) را به صورت زیر نوشت

$$|\psi'\rangle = [R_u^\lambda(\alpha) \otimes R_u^\nu(\alpha)] |\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle \quad (۷۲)$$

چون هر برداری از \mathcal{E} یک ترکیب خطی از بردارهایی شبیه به (۶۹) است، تبدیل هر بردار اختیاری $|\psi\rangle$ از \mathcal{E} در اثر دوران عبارت است از

$$|\psi'\rangle = [R_u^1(\alpha) \otimes R_u^2(\alpha)] |\psi\rangle \quad (۷۳)$$

با استفاده از فرمول (F-۱۴) از فصل دوم و این حقیقت که L_1 و L_2 جابه‌جایی پذیرند (این عملگرها به ذرات متفاوت مربوطاند)، برای عملگرهای دوران در \mathcal{E} خواهیم داشت

$$R_u^1(\alpha) \otimes R_u^2(\alpha) = e^{-(i/\hbar)\alpha L_{1,u}} e^{-(i/\hbar)\alpha L_{2,u}} = e^{-(i/\hbar)\alpha L_u} \quad (۷۴)$$

که در آن

$$L = L_1 + L_2 \quad (۷۵)$$

تکانه زاویه‌ای کل دستگاه دو ذره‌ای است. بنابراین تمام فرمولهای قسمت قبل، تا وقتی L معرف تکانه زاویه‌ای کل باشد، معتبر می‌ماند.

یادداشتها:

۱. L عملگری است که در \mathcal{E} عمل می‌کند. در (۷۵)، L_1 ، دقیقاً، گسترش عملگر L_1 عمل‌کننده در \mathcal{E}_1 است به \mathcal{E} . (استدلال مشابهی می‌تواند در مورد L_2 به‌کار رود). جهت ساده کردن نمادگذارها، از نمادهای متفاوت برای L_1 و گسترش آن در \mathcal{E} استفاده نخواهیم کرد (فصل دوم، بخش F-۲c).

۲. ممکن است دورانی را در نظر بگیریم که فقط روی یکی از دو ذره، مثلاً (۱)، صورت گیرد. در جریان یک چنین "دوران جزئی" برداری نظیر (۶۹) به بردار

$$[R_u^1(\alpha) |\varphi(1)\rangle] \otimes |\chi(2)\rangle \quad (۷۶)$$

تبدیل می‌شود که در آن فقط حالت ذره (۱) تغییر یافته است. مانند بالا، می‌توان نشان داد که اثر یک دوران اجرا شده فقط روی ذره (۱) روی یک حالت اختیاری $|\psi\rangle$ از \mathcal{E} ، توسط عملگر زیر توصیف می‌شود

$$R_u^1(\alpha) \otimes \mathbb{1} \quad (۲) = e^{-i/\hbar\alpha L_{1,u}} \quad (۷۷)$$

که $\mathbb{1}$ یک عملگر یکه در \mathcal{E}_2 است [در (۷۷)، L_1 در \mathcal{E} عمل می‌کند].

ب) دستگاه اختیاری

نقطهٔ عزیمت استدلالهایی که تا اینجا ارائه داده‌ایم فرمول (۱۹) است که قانون تبدیل بردار حالت دستگاه را از قانون تابع موج آن به دست می‌دهد. در مورد یک دستگاه کوانتومی اختیاری (که لزوماً مشابه کلاسیکی ندارد)، نمی‌توان همان روش را به کار برد. به عنوان مثال، برای یک ذره اسپین دار، عملگرهای X ، Y ، و Z دیگر تشکیل یک مجموعهٔ کامل مشاهده پذیر جابه‌جایی پذیر نمی‌دهند، و حالت ذره دیگر نمی‌تواند توسط تابع موج $\psi(x, y, z)$ تعریف شود (فصل ۹ را ببینید). می‌بایستی مستقیماً در فضای حالت‌های \mathcal{E} دستگاه استدلال کرد. بدون ورود به جزئیات، در اینجا می‌پذیریم که به هر دوران هندسی \mathcal{R} می‌توان یک عملگر R در \mathcal{E} وابسته کرد؛ اگر دستگاه در ابتدا در حالت ψ باشد، دوران \mathcal{R} آن را به حالت

$$|\psi'\rangle = R|\psi\rangle \quad (۷۸)$$

می‌برد که در آن عملگر R خطی و یکانی است (یادداشت بخش ۳-ب-۲).

اما راجع به قانون گروه دورانهای \mathcal{R} ، این قانون توسط عملگرهای R ، فقط به صورت موضعی پایسته است: حاصلضرب دو دوران هندسی، که لااقل یکی از آنها بینهایت کوچک است، در فضای حالت \mathcal{E} توسط حاصلضرب عملگرهای متناظر R نمایش داده می‌شوند (که به ویژه می‌رساند که "تصویر" یک دوران به اندازهٔ زاویهٔ θ یک عملگر همانندی است). معذالک، عملگر وابسته به یک دوران هندسی به اندازهٔ زاویهٔ 2π لزوماً یک عملگر همانندی نیست [یادداشت ۳ از بخش ۳-ج-۳ و مکمل ۱ فصل ۹ را ببینید].

حال یک دوران بینهایت کوچک $\mathcal{R}_{e_z}(d\alpha)$ حول محور Oz را در نظر می‌گیریم. چون قانون گروه برای دورانهای بینهایت کوچک پایسته است، عملگر $\mathcal{R}_{e_z}(d\alpha)$ لزوماً به شکل زیر است

$$\mathcal{R}_{e_z}(d\alpha) = 1 - \frac{i}{\hbar} d\alpha J_z \quad (۷۹)$$

که در آن J_z یک عملگر هرمیتی است زیرا $\mathcal{R}_{e_z}(d\alpha)$ یکانی است (مکمل C_{II} فصل دوم و بخش ۳ همین مکمل). این رابطه تعریفی است برای J_z . به همین طریق می‌توان، عملگرهای هرمیتی J_x و J_y را با شروع از دورانهای بینهایت کوچک حول محورهای Ox و Oy وارد کرد. بنابراین تکانهٔ زاویه‌ای کل J دستگاه برحسب سه مؤلفهٔ J_x ، J_y ، و J_z آن تعریف می‌شود.

حال می‌توانیم از استدلال بخش ۳-ج-۲ استفاده کنیم: رابطهٔ هندسی (۸) می‌رساند که مؤلفه‌های J در روابط جابه‌جایی نظیر روابط جابه‌جایی تکانه‌های زاویه‌ای مداری صدق می‌کنند و

بدین ترتیب، تکانه زاویه‌ای کل هر دستگاه کوانتومی به عملگرهای دوران متناظر وابسته است؛ روابط جابه‌جایی بین مؤلفه‌ها مستقیماً از آن نتیجه می‌شوند؛ این امر اجازه می‌دهد که از آنها، همان‌طور که در این فصل (بخش ۶-۲-۲) انجام دادیم، جهت مشخص کردن هر تکانه زاویه‌ای، استفاده کنیم.

بالاخره نشان دهیم که، با توجه به تعریفی که در بالا برای J_x ، J_y ، و J_z کردیم، عملگر $R_u(d\alpha)$ وابسته به هر دوران بینهایت کوچک اختیاری، به صورت زیر نوشته می‌شود u_x ، u_y ، و u_z مؤلفه‌های بردار یکه u هستند)

$$R_u(d\alpha) = 1 - \frac{i}{\hbar} d\alpha (J_x u_x + J_y u_y + J_z u_z) \quad (A^0)$$

که می‌تواند به صورت فشرده زیر نوشته شود

$$R_u(d\alpha) = 1 - \frac{i}{\hbar} d\alpha \mathbf{J} \cdot \mathbf{u} \quad (A1)$$

فرمول (A⁰) نتیجه رابطه هندسی

$$\mathcal{R}_u(d\alpha) = \mathcal{R}_{e_x}(u_x d\alpha) \mathcal{R}_{e_y}(u_y d\alpha) \mathcal{R}_{e_z}(u_z d\alpha) \quad (A2)$$

با تقریب مرتبه اول $d\alpha$ است، و می‌تواند فوراً از فرمول (۶) به دست آید.

بنابراین عبارتهای (۴۸) و (۴۹) را برای عملگرهای دوران بینهایت کوچک تعمیم داده‌ایم. چون قانون گروه به طور موضعی پایسته است (که در بالا اشاره شد)، رابطه (۵۲) و استدلال متعاقب آن معتبر می‌ماند. در نتیجه، عملگرهای دوران معینی عبارتهایی مشابه با (۵۵) و (۵۷) دارند

$$R_u(\alpha) = e^{(i/\hbar)\alpha \mathbf{J} \cdot \mathbf{u}} \quad (A3)$$

۵. دوران مشاهده‌پذیرها

حال می‌دانیم که بردار معرف حالت یک دستگاه کوانتومی چگونه در اثر دوران تغییر می‌یابد. اما در مکانیک کوانتومی، حالت یک دستگاه و کمیات فیزیکی به طور مستقل توصیف می‌شوند. بنابراین نشان خواهیم داد که یک دوران چه تأثیری در مشاهده‌پذیرها ایجاد می‌کند.

الف) قانون تبدیل عمومی

یک مشاهده‌پذیر A وابسته به یک دستگاه فیزیکی معین را در نظر بگیریم. جهت سادگی نمادگذاری، فرض خواهیم کرد که طیف A گسسته و ناواکن باشد

$$A | u_n \rangle = a_n | u_n \rangle \quad (۸۴)$$

برای اینکه بینیم دوران چگونه روی این مشاهده‌پذیر تأثیر می‌کند، تصور خواهیم کرد که دارای وسیله‌ای هستیم که بتواند A را در دستگاه فیزیکی تحت مطالعه اندازه‌گیری کند. بنا به تعریف مشاهده‌پذیر A' که از تبدیل A در اثر دوران هندسی \mathcal{R} به وجود می‌آید، مشاهده‌پذیری است که توسط آن وسیله هنگامی که تحت دوران \mathcal{R} واقع شده است اندازه‌گیری می‌شود.

فرض کنیم دستگاه در ویژه‌حالت $| u_n \rangle$ از A باشد؛ وسیله اندازه‌گیری A در این دستگاه حتماً نتیجه a_n را خواهد داد. اما درست قبل از اندازه‌گیری، یک دوران \mathcal{R} به‌طور همزمان روی دستگاه فیزیکی و وسیله اندازه‌گیری اعمال می‌کنیم. وضعیت نسبی آنها بدون تغییر می‌ماند. در نتیجه، اگر مشاهده‌پذیر A که فرض می‌کنیم یک کمیت فیزیکی را توصیف می‌کند فقط به دستگاهی که دوران داده‌ایم وابسته باشد (یعنی، مستقل از دستگاه‌های یا وسایل دیگر که دوران نکرده‌اند، باشد)، پس، در وضعیت جدید، وسیله اندازه‌گیری هنوز همان نتیجه a_n را خواهد داد. بعد از دوران، بنا به تعریف، وسیله اندازه‌گیری A' را اندازه می‌گیرد و دستگاه در حالت زیر خواهد بود

$$| u'_n \rangle = R | u_n \rangle \quad (۸۵)$$

بنابراین، باید داشته باشیم

$$A | u_n \rangle = a_n | u_n \rangle \implies A' | u'_n \rangle = a_n | u'_n \rangle \quad (۸۶)$$

با ترکیب (۸۵) و (۸۶)، خواهیم یافت

$$A' R | u_n \rangle = a_n R | u_n \rangle \quad (۸۷)$$

یعنی

$$R^\dagger A' R | u_n \rangle = a_n | u_n \rangle \quad (۸۸)$$

زیرا وارون R برابر R^\dagger است. مجموعه بردارهای $(u_n |$ تشکیل یک پایه در فضای حالتها می‌دهد (A یک مشاهده‌پذیر است)، بنابراین داریم

$$R^\dagger A' R = A \quad (۸۹)$$

یعنی

$$\boxed{A' = R A R^\dagger} \quad (۹۰)$$

در مورد خاص یک دوران بینهایت کوچک $\mathcal{R}_u(d\alpha)$ ، وقتی عبارت عمومی (۸۱) را در (۹۰) جایگزین می‌کنیم، تا مرتبه اول $d\alpha$ می‌دهد

$$\begin{aligned} A' &= \left(1 - \frac{i}{\hbar} d\alpha \mathbf{J} \cdot \mathbf{u} \right) A \left(1 + \frac{i}{\hbar} d\alpha \mathbf{J} \cdot \mathbf{u} \right) \\ &= A - \frac{i}{\hbar} d\alpha [\mathbf{J} \cdot \mathbf{u}, A] \end{aligned} \quad (۹۱)$$

یادداشتها:

۱. در مورد یک ذره بدون اسپین، از رابطه (۹۰) نتیجه می‌شود

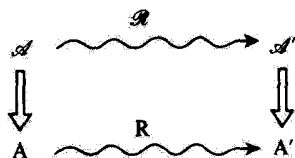
$$\langle \mathbf{r} | A' | \mathbf{r}' \rangle = \langle \mathbf{r} | R A R^\dagger | \mathbf{r}' \rangle \quad (۹۲)$$

با استفاده از (۲۶) و (۲۷) خواهیم داشت

$$\langle \mathbf{r} | A' | \mathbf{r}' \rangle = \langle \mathcal{R}^{-1} \mathbf{r} | A | \mathcal{R}^{-1} \mathbf{r}' \rangle \quad (۹۳)$$

پس تبدیلی که ما را قادر می‌سازد A' را از A به دست آوریم کاملاً مشابه با تبدیلی است که $\langle \psi' |$ را از $\langle \psi |$ به دست می‌دهد [فرمول (۱۹)].

۲. موردی را در نظر بگیریم که مشاهده‌پذیر A وابسته به یک کمیت کلاسیکی \mathcal{A} باشد. در این صورت \mathcal{A} تابعی از مکانهای \mathbf{r} و تکانه‌های \mathbf{p} ذرات تشکیل‌دهنده دستگاه است. عملگر A از این تابع با به‌کار بردن قواعد کوانتش داده شده فصل سوم، به دست می‌آید. با طریقه یافتن کمیت \mathcal{A}' وابسته به \mathcal{A} به هنگام دوران \mathcal{R} در مکانیک کلاسیک آشنا هستیم: به‌عنوان مثال، اگر \mathcal{A} یک کمیت زنده‌ای باشد، \mathcal{A}' بر خود \mathcal{A} منطبق خواهد شد. اگر \mathcal{A} مؤلفه یک کمیت برداری



شکل ۱ رفتار یک کمیت فیزیکی کلاسیکی R و مشاهده‌پذیر A وابسته به آن، در اثر یک دوران R .

در امتداد محور Ox باشد، A' نیز مؤلفه این کمیت برداری در امتداد محوری خواهد بود که از تبدیل Ox در اثر دوران R به دست می‌آید. همچنین می‌توانیم عملگر کوانتومی متناظر با A' را با اعمال همان قواعد کوانتسشن فوق به دست آوریم. می‌توان نشان داد که این عملگر نظیر عملگر A' داده شده در (۹۰) است؛ این تشابه در شکل ۱ نشان داده شده است. ■

ب) مشاهده‌پذیرهای نرده‌ای

مشاهده‌پذیری را نرده‌ای گویند که برای تمام R ها داشته باشیم

$$A' = A \quad (۹۴)$$

برطبق (۹۱)، نتیجه می‌گیریم که

$$[A, J] = 0 \quad (۹۵)$$

یک مشاهده‌پذیر نرده‌ای با سه مؤلفه تکانه زاویه‌ای کل چاب‌جایی‌پذیر است.

مثالهای متعددی برای مشاهده‌پذیرهای نرده‌ای موجود است: J^2 همیشه نرده‌ای است. (این نتیجه، همان‌طور که در بخش ۶-۲-۲ این فصل دیدیم از روابط چاب‌جایی مشخص‌کننده یک تکانه زاویه‌ای حاصل می‌شود.) برای یک ذره بدون اسپین R^z ، P^z و $R.P$ که متناظر با کمیت‌های نرده‌ای کلاسیکی‌اند، مشاهده‌پذیرهایی نرده‌ای هستند. علاوه بر این به سهولت، می‌توان نشان داد که (بخش ۵-ج زیر را ببینید) R^z ، P^z و $R.P$ در (۹۵) صدق می‌کنند. همچنین بعداً خواهیم دید (بخش ۶) که هامیلتونی یک دستگاه فیزیکی مجرد نیز نرده‌ای است.

ج) مشاهده‌پذیرهای برداری

یک مشاهده‌پذیر برداری V مجموعه‌ای از سه مشاهده‌پذیر V_x ، V_y و V_z (مؤلفه‌های دکارتی) است که توسط دوران برطبق قانون مشخصه بردارها تبدیل می‌شود، تبدیل یافته مؤلفه بردار V در

امتداد یک محور معین Ou (با بردار یکه \mathbf{u})، یعنی $V_u = \mathbf{V} \cdot \mathbf{u}$ ، در اثر دوران \mathcal{R} ، می‌بایست مؤلفه \mathbf{V} در امتداد محور Ou' که از Ou توسط دوران \mathcal{R} منتج می‌شود، یعنی $V_{u'} = \mathbf{V} \cdot \mathbf{u}'$ باشد.

به‌عنوان مثال مؤلفه V_x از چنین مشاهده‌پذیری را در نظر بگیریم و رفتار آن را تحت دورانهای بینهایت کوچک حول هر کدام از محورهای مختصات بررسی کنیم. به‌وضوح V_x در دوران حول Ox تغییری نمی‌کند؛ برطبق (۹۱) این مطلب می‌تواند به‌صورت زیر بیان شود

$$[J_x, V_x] = 0 \quad (96)$$

اگر دورانی $\mathcal{R}_{e_y}(d\alpha)$ حول محور Oy انجام دهیم، تبدیل یافته V_x مشاهده‌پذیر $(V_x)'$ است که توسط (۹۱) به‌صورت زیر داده شده است

$$(V_x)' = V_x - \frac{i}{\hbar} d\alpha [J_y, V_x] \quad (97)$$

اما V_x مؤلفه \mathbf{V} در امتداد محور Ox ، با بردار یکه \mathbf{e}_x است. دوران $\mathcal{R}_{e_y}(d\alpha)$ ، \mathbf{e}_x را روی \mathbf{e}'_x می‌برد به‌طوری که [فرمول (۶)]

$$\begin{aligned} \mathbf{e}'_x &= \mathbf{e}_x + d\alpha \mathbf{e}_y \times \mathbf{e}_x \\ &= \mathbf{e}_x - d\alpha \mathbf{e}_z \end{aligned} \quad (98)$$

در نتیجه، اگر \mathbf{V} یک مشاهده‌پذیر برداری باشد، باید $(V_x)'$ بر $\mathbf{V} \cdot \mathbf{e}'_x$ منطبق باشد

$$\begin{aligned} (V_x)' &= \mathbf{V} \cdot \mathbf{e}_x - d\alpha \mathbf{V} \cdot \mathbf{e}_z \\ &= V_x - d\alpha V_z \end{aligned} \quad (99)$$

با مقایسه (۹۷) و (۹۹) می‌بینیم که

$$[V_x, J_y] = i\hbar V_z \quad (100)$$

برای یک دوران بینهایت کوچک $\mathcal{R}_{e_z}(d\alpha)$ حول محور Oz ، استدلالی نظیر استدلال فوق به رابطه زیر منجر می‌شود

$$[J_z, V_x] = i\hbar V_y \quad (101)$$

با مطالعه رفتار V_y و V_z تحت دورانهای بینهایت کوچک، می‌توان فرمولهایی را اثبات کرد که توسط جایگشت دورانی اندیسه‌های x ، y ، و z از فرمولهای (۹۶)، (۱۰۰)، و (۱۰۱) نتیجه شوند. مجموعه روابطی که به این طریق به دست می‌آیند مشخصه یک مشاهده‌پذیر برداری است: این روابط می‌رسانند که یک دوران بینهایت کوچک اختیاری، $\mathbf{V} \cdot \mathbf{u}$ را به $\mathbf{V} \cdot \mathbf{u}'$ تبدیل می‌کند، که \mathbf{u}' تبدیل \mathbf{u} نسبت به دوران مورد مطالعه است.

واضح است که خود تکانه زاویه‌ای \mathbf{J} ، یک مشاهده‌پذیر برداری است. در این مورد روابط (۹۶)، (۱۰۰)، و (۱۰۱) از روابط جابه‌جایی مشخصه تکانه زاویه‌ای تبعیت می‌کنند. برای دستگامی متشکل از یک ذره تنهای بدون اسپین، \mathbf{P} و \mathbf{R} مشاهده‌پذیرهایی برداری هستند، که می‌توان آنها را به سهولت از روی روابط جابه‌جایی بنیادی تحقیق کرد. بدین ترتیب نماد برداری که برای \mathbf{P} ، \mathbf{R} ، \mathbf{L} ، و \mathbf{J} به کار می‌بریم توجیه می‌شود.

یادداشتها:

۱. حاصلضرب نرده‌ای $\mathbf{V} \cdot \mathbf{W}$ دو مشاهده‌پذیر برداری، که توسط فرمول عادی

$$\mathbf{V} \cdot \mathbf{W} = V_x W_x + V_y W_y + V_z W_z \quad (102)$$

تعریف می‌شود یک عملگر نرده‌ای است. جهت بررسی این مورد، می‌توانیم به عنوان مثال جابه‌جاگر $\mathbf{V} \cdot \mathbf{W}$ را با J_z محاسبه کنیم

$$\begin{aligned} [\mathbf{V} \cdot \mathbf{W}, J_x] &= [V_y W_y, J_x] + [V_z W_z, J_x] \\ &= V_y [W_y, J_x] + [V_y, J_x] W_y + V_z [W_z, J_x] + [V_z, J_x] W_z \\ &= -i\hbar V_y W_z - i\hbar V_z W_y + i\hbar V_z W_y + i\hbar V_y W_z \\ &= 0 \end{aligned} \quad (103)$$

همان‌طور که قبلاً متذکر شدیم \mathbf{J}^2 ، \mathbf{R}^2 ، \mathbf{P}^2 و $\mathbf{R} \cdot \mathbf{P}$ مشاهده‌پذیرهایی نرده‌ای هستند.

۲. این تکانه زاویه‌ای کل دستگاه تحت مطالعه است که در روابط (۹۶) و (۱۰۰)، و (۱۰۱) ظاهر می‌شود. مثال زیر اهمیت این واقعیت را روشن می‌کند: اگر، برای دستگاه دو ذره‌ای، از \mathbf{L}_1 به جای $\mathbf{L} = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2$ استفاده می‌شد، به صورت مجموعه‌ای از سه مشاهده‌پذیر نرده‌ای، نه به صورت یک مشاهده‌پذیر برداری، ظاهر می‌شد.

۶. ناوردایی در اثر دوران

فایده بحث ارائه شده در قسمتهای قبل، به توجیه تعریف تکانه زاویه‌ای توسط روابط جابه‌جایی آنها منحصر نمی‌شود. اهمیت دورانها در فیزیک اساساً به این حقیقت وابسته است که قوانین فیزیکی در دوران ناوردا هستند. در این قسمت، توضیح می‌دهیم که دقیقاً منظور چیست، و بعضی از نتایج این خاصیت اساسی را نشان خواهیم داد.

الف) ناوردایی قوانین فیزیکی

یک دستگاه فیزیکی (S) ، کلاسیکی یا کوانتومی، در نظر بگیریم، و در یک زمان معین یک دوران R به آن بدهیم. اگر در همان زمان که دستگاه (S) تحت دوران قرار می‌گیرد، تمام دستگاهها یا وسایلی را که می‌توانند روی آن تأثیر داشته باشند، به دوران در آوریم، خواص فیزیکی و رفتار S تغییر نمی‌کنند. این می‌رساند که قوانین فیزیکی حاکم بر دستگاه یکسان باقی می‌مانند: گوییم که قوانین فیزیکی نسبت به دوران ناوردایند. توجه کنید که این ویژگی از پیش مسلم نیست: تبدیلاتی — به‌عنوان مثال تشابهات — وجود دارند^۱ که قوانین فیزیکی نسبت به آنها ناوردا نیستند.^۲ بنابراین ساده‌تر است که ناوردایی نسبت به دوران را به‌صورت یک اصل موضوع در نظر بگیریم که با تحقیق تجربی نتایج آن توجیه می‌شود.

وقتی می‌گوییم خواص فیزیکی و رفتار یک دستگاه تحت دورانی که در زمان t صورت گرفته است بدون تغییر می‌ماند، این بیان دو مشاهده را در بر می‌گیرد:

۱. خواص دستگاه در این زمان تغییر نمی‌کنند (اگرچه توصیف حالت دستگاه و کمیت فیزیکی تغییر می‌کنند؛ قسمت قبل را ببینید). در مکانیک کوانتومی، این می‌رساند که تبدیل یافته A' از یک مشاهده‌پذیر غیر مشخص A دارای همان طیف است، و احتمال یافتن یکی از ویژه‌مقدارهای این طیف در یک اندازه‌گیری A' روی دستگاه بعد از دوران، برابر همان احتمالی خواهد بود که در اندازه‌گیری A روی دستگاه قبل از دوران داشتیم. از اینجا می‌توان نتیجه گرفت که عملگرهای R که دورانها در فضای حالتها را توصیف می‌کنند، به‌صورت خطی و یکانی یا پاد خطی و یکانی (یعنی پادیکانی^۳) هستند.

۱. به‌عنوان مثال، یک اتم هیدروژن را در نظر بگیریم. اگر فاصله بین پروتون و الکترون را در یک ثابت $\lambda \neq 1$ ضرب کنیم (بدون آنکه تغییری در بارها و جرمهای ذرات داده شود)، دستگاهی به‌دست می‌آوریم که دیگر تحولش از قوانین فیزیکی (کلاسیکی یا کوانتومی) تبعیت نمی‌کند.

۲. متذکر شدیم که آزمایش نشان داده است که قوانین حاکم بر واپاشی — β — هسته‌ها در انعکاسی نسبت به یک سطح ناوردا نیستند (عدم پایستگی پاریته).

۳. تمام تبدیلاتی که تحت آنها قوانین فیزیکی ناوردا می‌مانند توسط عملگرهای یکانی توصیف می‌شوند، به استثنای عملگر معکوس زمان که به آن یک عملگر پادیکانی وابسته است.

۲. تحول زمانی دستگاه تحت تأثیر واقع نمی‌شود. جهت بیان دقیقتر این نکته، حالت دستگاه در زمان t_0 را با $|\psi(t_0)\rangle$ نشان می‌دهیم؛ این حالت تحت دورانی در زمان t_0 می‌شود

$$|\psi'(t_0)\rangle = R |\psi(t_0)\rangle \quad (104)$$

حال دستگاه را رها کنیم تا به‌طور آزاد تحول یابد، و حالت $|\psi'(t)\rangle$ آن را در یک لحظه بعدی t با حالت $|\psi(t)\rangle$ که دستگاه می‌توانست با تحول آزاد از $|\psi(t_0)\rangle$ به آن برسد، مقایسه کنیم. اگر رفتار دستگاه تغییر نکند، باید داشته باشیم

$$|\psi'(t)\rangle = R |\psi(t)\rangle \quad (105)$$

یعنی، در هر زمان t ، حالت $|\psi'(t)\rangle$ باید از $|\psi(t)\rangle$ با همان دوران در (۱۰۴) به‌دست آید. بنابراین، اگر $|\psi(t)\rangle$ جواب معادله شرودینگر باشد $R |\psi(t)\rangle$ نیز یک جواب این معادله است؛ تبدیل‌یافته یک حرکت ممکن دستگاه یک حرکت ممکن دیگر است. در قسمت ب خواهیم دید که این مطلب می‌رساند که هامیلتونی H دستگاه یک مشاهده‌پذیر نرده‌ای است.

ناوردایی قوانین فیزیکی در اثر دوران توسط خواص تقارنی معادلاتی که این قوانین را به زبان ریاضی بیان می‌کنند، توصیف می‌شوند. جهت درک منشأ این تقارنها، به‌عنوان مثال، دستگاهی را در نظر بگیریم که از یک ذره تنها (بدون اسپین) تشکیل شده باشد. عبارتهای قوانین فیزیکی حاکم بر چنین دستگاهی به‌طور واضح حاوی پارامترهای $\mathbf{r}(x, y, z)$ و $\mathbf{p}(p_x, p_y, p_z)$ که مکان ذره و تکانه آن را مشخص می‌کنند است؛ در مکانیک کلاسیک، \mathbf{p} و \mathbf{r} در هر لحظه حالت ذره را تعریف می‌کنند؛ در مکانیک کوانتومی، این پارامترها، با اینکه مفهوم آنها به همان سادگی نیست، در تابع موج $\psi(\mathbf{r})$ و تبدیل فوریه آن $\bar{\psi}(\mathbf{p})$ ظاهر می‌شوند. وقتی ذره تحت یک دوران ناگهانی \mathcal{R} قرار می‌گیرد \mathbf{r} و \mathbf{p} به \mathbf{r}' و \mathbf{p}' تبدیل می‌شوند، به‌طوری که

$$\begin{aligned} \mathbf{r}' &= \mathcal{R}\mathbf{r} \\ \mathbf{p}' &= \mathcal{R}\mathbf{p} \end{aligned} \quad (106)$$

اگر در معادلاتی که قوانین فیزیکی را بیان می‌کنند $\mathcal{R}^{-1}\mathbf{r}'$ را به جای \mathbf{r} و $\mathcal{R}^{-1}\mathbf{p}'$ را به جای \mathbf{p} قرار دهیم، روابطی به‌دست می‌آوریم که اکنون حاوی \mathbf{r}' و \mathbf{p}' هستند. بنابراین ناوردایی قوانین فیزیکی تحت دوران \mathcal{R} می‌رساند که شکل معادلات برحسب \mathbf{r}' و \mathbf{p}' همان شکل معادلات برحسب \mathbf{r} و \mathbf{p} است؛ با حذف ساده بریم از پارامترهای جدید باید معادلات اولیه را بازیافت. واضح است که این امر به‌طور قابل ملاحظه‌ای شکل‌های ممکن این معادلات را محدود می‌کند.

یادداشتها:

۱. اگر دورانی روی یک دستگاه که منزوی نباشد بدهیم چه رخ می‌دهد؟ به‌عنوان مثال ذره‌ای در نظر بگیریم که تحت یک پتانسیل خارجی قرار داشته باشد. اگر دستگاه را، بدون دوران همزمان منابع پتانسیل خارجی، دوران دهیم، تحول بعدی دستگاه، به‌طور عمومی، تغییر می‌یابد.^۱ در مکانیک کلاسیک، نیروهای وارد بر ذره در مکان جدیدش دیگر یکی نیست. در مکانیک کوانتومی $\psi(\mathcal{R}^{-1}\mathbf{r}, t) = \psi'(\mathbf{r}, t)$ جواب معادله شرودینگر است که در آن پتانسیل $V(\mathbf{r})$ با $V(\mathcal{R}^{-1}\mathbf{r})$ ، که عموماً متفاوت از $V(\mathbf{r})$ است، تعویض شده باشد. بنابراین، تبدیل‌یافته یک حرکت ممکن، دیگر یک حرکت ممکن نیست. حضور پتانسیل خارجی، یکنواختی فضایی را که در آن دستگاه مورد مطالعه تحول می‌یابد، به نوعی، خراب می‌کند.

معدالک، پتانسیل خارجی ممکن است تقارنهایی ظاهر کند که اجازه دهد بعضی دورانها را روی دستگاه فیزیکی انجام دهیم بدون آنکه رفتارشان را عوض کند. اگر دورانهایی مانند \mathcal{R}_0 وجود داشته باشند به‌طوری که $V(\mathcal{R}_0^{-1}\mathbf{r})$ منطبق بر $V(\mathbf{r})$ شود. خواص دستگاه در یکی از این دورانهای \mathcal{R}_0 بدون تغییر می‌ماند. به‌عنوان مثال، برای پتانسیلهای مرکزی، یعنی پتانسیلهایی که فقط به فاصله تا یک نقطه ثابت O بستگی دارند، این مورد وجود دارد: در این صورت دورانهای \mathcal{R}_0 ، دورانهایی هستند که نقطه (O) را حفظ می‌کنند (فصل ۷ را ببینید).

۲. حال به مورد دستگاههای فیزیکی منزوی برگردیم. تا به حال، یک دیدگاه "فعال" را پذیرفته‌ایم: ناظر ساکن می‌ماند، و دستگاه فیزیکی می‌چرخد. می‌توانیم همچنین یک دیدگاه "غیرفعال" تعریف کنیم: ناظر دوران می‌کند، و بدون دست زدن به دستگاه تحت مطالعه، یک دستگاه مختصات جدید بکار می‌برد که با دوران معینی از دستگاه محورهای مختصات اولیه حاصل شده است. در این صورت ناوردایی دوران به‌طریق زیر بیان می‌شود: ناظر در موقعیت جدید خود (یعنی با استفاده از محورهای مختصات جدید)، پدیده‌های فیزیکی را توسط قوانینی به همان شکل قوانین دستگاه قبل، توصیف می‌کند. هیچ چیزی به ناظر اجازه نمی‌دهد که یکی از موقعیتها را اساسیتر از دیگری بداند: غیر ممکن است با مطالعه هر پدیده فیزیکی بتوان جهت در فضا تعریف کرد. به‌سادگی می‌توان دید که، برای یک دستگاه منزوی، یک دوران "غیرفعال" معادل دوران "فعالی" به‌اندازه یک زاویه مساوی حول محور متقابل است. ■

۱. اگر ذره تحت یک پتانسیل برداری قرار گیرد، خواص آن بلافاصله بعد از دوران عمیقاً تغییر می‌کند. به‌عنوان مثال یک ذره بدون اسپین را در یک میدان مغناطیسی خارجی در نظر بگیریم. برطبق قانون تبدیل (۱۹)، احتمال جریان داده شده توسط فرمول (D-۲۰) از فصل سوم عموماً از دوران جریان اولیه حاصل نمی‌شود، زیرا بستگی به پتانسیل برداری توصیف‌کننده میدان مغناطیسی دارد.

تعبیر فیزیکی این پدیده به‌صورت زیر است. می‌توان، به‌جای دوران ذره، میدان مغناطیسی را سریعاً در جهت مخالف دوران داد. تابع موج فرصت تغییر ندارد: این چیزی است که فرمول (۱۹) بیان می‌کند. اگر خواص فیزیکی تغییر کنند، به‌علت ظهور میدان محرکه الکتریکی القایی و عمل آن روی ذره است. این عمل بستگی به طریق دقیقی که میدان مغناطیسی را می‌چرخانیم ندارد، به شرط اینکه این عمل را به سرعت کافی انجام دهیم.

(ب) نتیجه: پایستگی تکانه زاویه‌ای

در بخش (عالف) نشان دادیم که نوردایی دورانی توسط خواص تقارنی معادلاتی که قوانین فیزیکی را توصیف می‌کنند بیان می‌شود. در اینجا، مورد معادله شرودینگر را مطالعه خواهیم کرد و نشان خواهیم داد که هامیلتونی یک دستگاه فیزیکی منزوی یک مشاهده‌پذیر نرده‌ای است. یک دستگاه منزوی را در حالت $|\psi(t_0)\rangle$ در نظر بگیریم و یک دوران اختیاری \mathcal{R} در لحظه t_0 به آن بدهیم؛ حالت دستگاه می‌شود

$$|\psi'(t_0)\rangle = R |\psi(t_0)\rangle \quad (107)$$

که در آن R "تصویر" دوران \mathcal{R} است. حال اگر بگذاریم دستگاه به‌طور آزاد از $|\psi'(t_0)\rangle$ تحول یابد، حالت آن در لحظه $t_0 + dt$ ، برطبق معادله شرودینگر، خواهد شد

$$|\psi'(t_0 + dt)\rangle = |\psi'(t_0)\rangle + \frac{dt}{i\hbar} H |\psi'(t_0)\rangle \quad (108)$$

اگر دوران انجام نداده بودیم، حالت دستگاه در زمان $t_0 + dt$ به‌صورت زیر می‌بود

$$|\psi(t_0 + dt)\rangle = |\psi(t_0)\rangle + \frac{dt}{i\hbar} H |\psi(t_0)\rangle \quad (109)$$

نوردایی دورانی می‌رساند (قسمت عالف) که

$$|\psi'(t_0 + dt)\rangle = R |\psi(t_0 + dt)\rangle \quad (110)$$

که R همان است که در (107) بود. برطبق دو معادله قبلی، از این معادله نتیجه می‌شود

$$RH |\psi(t_0)\rangle = H |\psi'(t_0)\rangle \quad (111)$$

یعنی

$$RH |\psi(t_0)\rangle = HR |\psi(t_0)\rangle \quad (112)$$

چون $|\psi(t_0)\rangle$ اختیاری است، نتیجه می‌شود که H با تمام عملگرهای دورانی جابه‌جایی‌پذیر است. برای اینکه چنین باشد، لازم و کافی است که H با عملگرهای دوران بی‌نهایت کوچک، یعنی

با سه مؤلفهٔ تکانهٔ زاویه‌ای J دستگاه جابه‌جایی‌پذیر باشد

$$[H, J] = 0 \quad (113)$$

بنابراین H یک مشاهده‌پذیر نرده‌ای است.

بنابراین ناوردایی دورانی توسط این واقعیت بیان می‌شود که تکانهٔ زاویه‌ای کل یک دستگاه منزوی یک ثابت حرکت است: پایستگی تکانهٔ زاویه‌ای می‌تواند به صورت نتیجه‌ای از ناوردایی دورانی ظاهر شود.

یادداشتها:

۱. هامیلتونی یک دستگاه غیر منزوی عموماً نرده‌ای نیست. مع‌ذالك، اگر دورانهای خاصی وجود داشته باشند که دستگاه را ناوردا بگذارند [یادداشت ۱ بخش ۶-الف]، هامیلتونی با عملگرهای متناظر جابه‌جایی‌پذیر است. بنابراین، هامیلتونی یک ذره در یک پتانسیل مرکزی با عملگر L وابسته به تکانهٔ زاویه‌ای ذره نسبت به مرکز نیروها جابه‌جایی‌پذیر است.

۲. برای یک دستگاه منزوی مرکب از چندین ذره برهم‌کنش‌کننده، هامیلتونی با تکانهٔ زاویه‌ای کل جابه‌جایی‌پذیر است. برعکس، به‌طور عمومی با تکانهٔ زاویه‌ای انفرادی هر ذره جابه‌جایی‌پذیر نیست. برای اینکه تبدیل‌یافتهٔ یک حرکت ممکن یک حرکت ممکن بماند. باید دوران روی کل دستگاه، نه فقط روی بعضی از ذرات، صورت گیرد.

ج) کاربردها

نشان دادیم که ناوردایی دورانی می‌رساند که تکانهٔ زاویه‌ای کل یک دستگاه منزوی از جنبهٔ مکانیک کوانتومی، یک ثابت حرکت است. بنابراین تعیین حالت‌های مانای چنین دستگاهی (ویژه‌حالت‌های هامیلتونی) که همچنین ویژه‌حالت‌های J^2 و J_z باشند، ساده خواهد بود. بنابراین، برای فضای حالت‌ها یک پایهٔ سنج‌های، $\{|k, j, m\rangle\}$ مرکب از ویژه‌حالت‌های مشترک H ، J^2 ، و J_z انتخاب می‌کنیم:

$$\begin{aligned} H |k, j, m\rangle &= E |k, j, m\rangle \\ J^2 |k, j, m\rangle &= j(j+1)\hbar^2 |k, j, m\rangle \\ J_z |k, j, m\rangle &= m\hbar |k, j, m\rangle \end{aligned} \quad (114)$$

۱. واگنی اساسی دوران

چون هامیلتونی H یک مشاهده‌پذیر نرده‌ای است، با J_+ و J_- جابه‌جایی‌پذیر است. لذا نتیجه

می‌گیریم که $|k, j, m + 1\rangle$ و $|k, j, m - 1\rangle$ که به ترتیب متناسب با $J_+ |k, j, m\rangle$ و $J_- |k, j, m\rangle$ هستند، ویژه حالت‌های H با همان ویژه مقدار متناظر با $|k, j, m\rangle$ هستند [استدلال نظیر استدلالی است که برای فرمول (۶-۶) انجام گرفت]. بنابراین به روش تکرار می‌توان نشان داد که $(2j + 1)$ بردار پایه سنجه‌ای که توسط مقادیر معین k و j مشخص می‌شوند، دارای یک انرژی هستند. واگنی متناظر ویژه مقدارهای H را "اساسی" گویند، زیرا از ناوردایی دورانی ناشی می‌شود و برای هر شکلی از هامیلتونی H رخ می‌دهد. البته، در بعضی موارد، ترازهای انرژی می‌توانند واگنیهای اضافی، به نام "تصادفی" بروز دهند. نمونه‌ای از این نوع واگنی را در بخش ۷-۳، فصل ۷، خواهیم دید.

۲. عناصر ماتریسی مشاهده‌پذیرها در پایه سنجه‌ای

وقتی یک کمیت فیزیکی معین در یک دستگاه منزوی را مطالعه می‌کنیم، تنها اطلاع از رفتار مشاهده‌پذیر وابسته به هنگام دوران، بدون آنکه اجباری در استفاده از شکل دقیق آن داشته باشیم، می‌تواند در تعیین بعضی از خواص آن به ما کمک کند. می‌توانیم پیش‌بینی کنیم که فقط بعضی از عناصر ماتریسی آن در پایه‌ای سنجه‌ای نظیر $\{|k, j, m\rangle\}$ متفاوت از صفر خواهند بود و می‌توانیم روابط بین آنها را تعیین کنیم. بدین ترتیب، یک مشاهده‌پذیر نرده‌ای فقط بین دو بردار پایه که مقادیر j و m آنها برابرند دارای عناصر ماتریسی است [این مطلب از این واقعیت نتیجه می‌شود که این مشاهده‌پذیر با J^2 و J_z جابه‌جایی‌پذیر است، قضیه‌های روی مشاهده‌پذیرهای جابه‌جایی‌پذیر، بخش ۳-۵ D از فصل دوم]. به علاوه، این عناصر غیرصفر مستقل از m هستند (زیرا مشاهده‌پذیر نرده‌ای با J_+ و J_- نیز جابه‌جایی‌پذیر است). برای مشاهده‌پذیرهای برداری یا تانسوری، این خواص در قضیه ویگنر-اکارت، که بعداً در یک مورد خاص ثابت خواهیم کرد (مکمل ۵ فصل ۱۰ را ببینید) و همیشه در گستره‌ای از فیزیک که در آن پدیده‌ها توسط مکانیک کوانتومی بررسی می‌شوند (فیزیک اتمی، مولکولی، هسته‌ای، فیزیک ذرات بنیادی، و غیره) به‌کار برده می‌شود، نهفته است.

مراجع برای مطالعه بیشتر

تقارن و قوانین پایستگی

Feynman III (1.2), chap. 17; Schiff (1.18), chap. 7; Messiah (1.17), chap. XV; Morrisson (2.28), Feinberg and Goldhaber (2.29), Wigner (2.30).

ارتباط با نظریه گروه

Messiah (1.17), appendix D; Meijer and Bauer (2.18), chaps. 5 and 6; Bacry (10.31), chap. 6; Wigner (2.23), chaps. 14 and 15.

مکمل ۳

دوران مولکولهای دو اتمی

۱. مقدمه

۲. چرخنده صلب. مطالعه کلاسیک

الف) نمادگذاری

ب) حرکت چرخنده. تکانه زاویه‌ای و انرژی

ج) ذره فرضی وابسته به چرخنده

۳. کوانتس چرخنده صلب

الف) حالت کوانتومی و مشاهده پذیرهای چرخنده

ب) ویژه حالتها و ویژه مقدارهای هامیلتونی

ج) مطالعه مشاهده پذیر Z

۴. شواهد تجربی برای دوران مولکولها

الف) مولکولهای ناهمقطب. طیف دورانی محض

ب) مولکولهای همقطب. طیف دورانی رامان

۱. مقدمه

در بخش ۱ از مکمل ۱ فصل ۵، ارتعاشات دو هسته از یک مولکول دو اتمی را حول مکان تعادلش، با صرف نظر کردن از دوران این دو هسته حول مرکز جرمشان، مطالعه کردیم. بدین ترتیب، حالت‌های ارتعاشی مانای انرژیهای E_0 را که توابع موجشان $\varphi_0(r)$ فقط بستگی به فاصله r بین هسته‌ها دارند به دست آوردیم.

در اینجا یک دیدگاه تکمیلی را انتخاب می‌کنیم: دوران دو هسته را حول مرکز جرمشان یا صرف نظر کردن از ارتعاشاتشان مطالعه خواهیم کرد. یعنی، فرض خواهیم کرد که فاصله r بین آنها ثابت و برابر r_e می‌ماند (که r_e معرف فاصله بین دو هسته در موقعیت تعادل پایدار مولکول است، شکل ۱ از مکمل ۱ فصل ۵). پس تابع موجهای حالت‌های دورانی مانا می‌توانند فقط به زاویه‌های قطبی θ و φ که جهت محور مولکول را تعیین می‌کنند، بستگی داشته باشند. خواهیم دید که این تابع موجها هماهنگ‌های کروی $Y_l^m(\theta, \varphi)$ هستند [که در (بخش ۶-۴-۱) و در مکمل ۱ همین فصل مطالعه شدند]، و متناظر با انرژی دورانی E_l که فقط به l بستگی دارد.

عملاً در چارچوب مرکز جرم، مولکول هم دوران می‌کند و هم ارتعاش می‌کند، و تابع موجهای حالت‌های مانای آن باید توابعی از سه متغیر r ، θ ، φ باشند. در مکمل ۶ فصل ۷ نشان خواهیم داد که، در تقریب اول، این توابع به شکل $1/r \varphi_v(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$ هستند و به انرژی $E_v + E_l$ مربوط می‌شوند. این نتیجه رهیافتی را که در اینجا انتخاب کرده‌ایم، یعنی اینکه هر بار تنها یک درجه آزادی سارتعاشی یا دورانی— برای دستگاه در نظر بگیریم، توجیه می‌کند. ^۱ بخش ۲ را با مطالعه کلاسیک دستگاهی از دو جرم که به فاصله ثابت r از هم مجزا شده‌اند (چرخنده صلب) شروع خواهیم کرد. سپس بررسی مکانیک کوانتومی این مسئله را در بخش ۳، که در آن از نتایج فصل ۶ مربوط به تکانه زاویه‌ای استفاده خواهیم کرد، انجام خواهیم داد. بالاخره در بخش ۴ بعضی از نمودهای تجربی دوران مولکولهای دو اتمی (طیف دورانی خالص و رامان) را توضیح خواهیم داد.

۲. چرخنده صلب. مطالعه کلاسیک

الف) نمادگذاری

دو ذره به جرم m_1 و m_2 به فاصله ثابت r_e از هم قرار دارند. مرکز جرم آنها به‌عنوان مبدأ دستگاه مختصات $Oxyz$ انتخاب می‌شود که نسبت به آن، راستای خط واصل آنها با زاویه‌های قطبی θ و φ تعریف می‌شود (شکل ۱). فواصل OM_1 و OM_2 را به ترتیب با r_1 و r_2 نمایش می‌دهیم؛ بنا به تعریف مرکز جرم

$$m_1 r_1 = m_2 r_2 \quad (1)$$

یا

$$\frac{r_1}{m_2} = \frac{r_2}{m_1} = \frac{r_e}{m_1 + m_2} \quad (2)$$

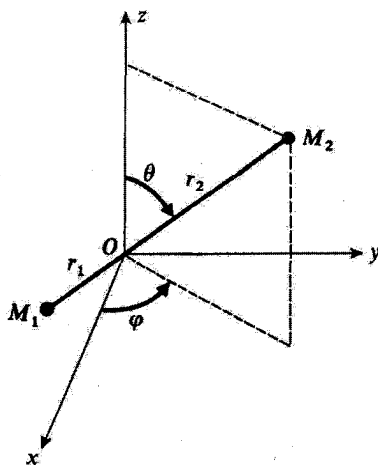
گشتاور لختی I دستگاه نسبت به O برابر است با

$$I = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2 \quad (3)$$

با معرفی جرم کاهیده

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (4)$$

۱. در مکمل ۶ فصل ۷ همچنین تصحیحات مربوط به پیوند بین درجات آزادی ارتعاشی و دورانی را مطالعه خواهیم کرد.



شکل ۱ پارامترهای تعیین‌کننده مکان چرخندهٔ صلب M_1M_2 که مرکز جرم آن مبدأ O چارچوب مرجع است؛ فاصله‌های r_1 و r_2 ثابت هستند؛ فقط زوایای قطبی θ و φ می‌تواند تغییر کنند.

و استفاده از (۲)، می‌توان I را به صورت زیر نوشت

$$I = \mu r_e^2 \quad (5)$$

ب) حرکت چرخنده. تکانهٔ زاویه‌ای و انرژی

اگر هیچ نیروی خارجی روی چرخنده تأثیر نکند، تکانهٔ زاویه‌ای کل \mathcal{L} دستگاه نسبت به نقطهٔ O یک ثابت حرکت است. بنابراین، چرخندهٔ حول O در صفحهٔ عمود بر بردار ثابت \mathcal{L} با سرعت زاویه‌ای ω_R دوران می‌کند. قدرمطلق \mathcal{L} توسط رابطه زیر به ω_R مربوط می‌شود

$$|\mathcal{L}| = m_1 r_1^2 \omega_R + m_2 r_2^2 \omega_R = I \omega_R \quad (6)$$

یعنی، با استفاده از (۵)، داریم

$$|\mathcal{L}| = \mu r_e^2 \omega_R \quad (7)$$

بسامد دورانی دستگاه $\nu_R = \omega_R / 2\pi$ متناسب با تکانهٔ زاویه‌ای $|\mathcal{L}|$ و معکوساً متناسب با گشتاور لختی I است.

در چارچوب مرکز جرم، انرژی کل \mathcal{H} دستگاه، انرژی جنبشی دورانی است

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} I \omega_R^2 \quad (۸)$$

که می‌توان آن را با استفاده از (۶) و (۵) به صورت زیر نوشت

$$\mathcal{H} = \frac{\mathcal{L}^2}{2I} = \frac{\mathcal{L}^2}{2\mu r_e^2} \quad (۹)$$

ج) ذره فرضی وابسته به چرخنده

فرمولهای (۵)، (۷)، و (۹) نشان می‌دهند که مسئله‌ای که در اینجا مطالعه می‌کنیم از لحاظ صوری معادل است با مسئله ذره‌ای فرضی به جرم μ که در فاصله ثابت r_e از نقطه O ، که حول آن با سرعت زاویه‌ای ω_R دوران می‌کند نگه داشته شده است. \mathcal{L} تکانه زاویه‌ای این ذره فرضی نسبت به O است.

۳. کوانتس چرخنده صلب

الف) حالت کوانتومی و مشاهده‌پذیرهای چرخنده

چون r_e ثابت است، پارامترهای تعیین‌کننده مکان چرخنده (یا مکان ذره فرضی وابسته) زوایای قطبی θ و φ از شکل ۱ هستند. پس حالت کوانتوم مکانیکی چرخنده توسط تابع موج $\psi(\theta, \varphi)$ که فقط بستگی به این دو پارامتر دارد توصیف می‌شود. $\psi(\theta, \varphi)$ انتگرال پذیر مجذوری است. فرض می‌کنیم این تابع بهنجار باشد

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta |\psi(\theta, \varphi)|^2 = 1 \quad (۱۰)$$

تعبیر فیزیکی $\psi(\theta, \varphi)$ این است که $|\psi(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi$ معرف احتمال یافتن محور چرخنده در عنصر زاویه فضایی $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$ حول راستایی با زوایای قطبی θ و φ است.

با استفاده از نمادگذاری دیراک، به هر تابع انتگرال پذیر مجذوری یک کیت $|\psi\rangle$ از فضای حالت \mathcal{E}_Ω وابسته می‌کنیم

$$\psi(\theta, \varphi) \longleftrightarrow |\psi\rangle \in \mathcal{E}_\Omega \quad (۱۱).$$

حاصلضرب نرده‌ای $\langle \psi | \chi \rangle$ و $\langle \chi | \psi \rangle$ بنا به تعریف عبارت است از

$$\langle \chi | \psi \rangle = \int d\Omega \chi^*(\theta, \varphi) \psi(\theta, \varphi) \quad (12)$$

که در آن $\chi(\theta, \varphi)$ و $\psi(\theta, \varphi)$ تابع موجهای وابسته به $\langle \chi |$ و $|\psi \rangle$ هستند. هامیلتونی کوانتوم مکانیکی H چرخنده (یا ذره فرضی مربوطه) را می‌توان با گذاشتن عملگر L^2 ، که در بخش ۴-۶ مطالعه شد، به جای L^2 در عبارت (۹) برای انرژی کلاسیکی به دست آورد

$$H = \frac{L^2}{2\mu r_e^2} \quad (13)$$

H عملگری است که در \mathcal{E}_Ω عمل می‌کند. برطبق فرمول (۸۱-۶ الف)، اگر $|\psi \rangle$ با تابع موج $\psi(\theta, \varphi)$ نمایش داده شود، $H |\psi \rangle$ با عبارت زیر نمایش داده می‌شود

$$H |\psi \rangle \longleftrightarrow -\frac{\hbar^2}{2\mu r_e^2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \psi(\theta, \varphi) \quad (14)$$

مشاهده‌پذیرهای دیگر مورد نظر که بعداً مطالعه خواهند شد، آنهایی هستند که به سه تصویر جبری x, y, z از پاره خط $M_1 M_2$ مربوط می‌شوند (x, y, z مختصات ذره فرضی نیز هستند):

$$\begin{aligned} x &= r_e \sin \theta \cos \varphi \\ y &= r_e \sin \theta \sin \varphi \\ z &= r_e \cos \theta \end{aligned} \quad (15)$$

اهمیت این متغیرها در بخش ۴-الف دیده خواهد شد. مشاهده‌پذیرهای X, Y و Z مربوط به x, y, z و در \mathcal{E}_Ω عمل می‌کنند. توابع زیر به کتهای $\langle \psi | X$ ، $\langle \psi | Y$ و $\langle \psi | Z$ وابسته‌اند

$$\begin{aligned} X |\psi \rangle &\longleftrightarrow r_e \sin \theta \cos \varphi \psi(\theta, \varphi) \\ Y |\psi \rangle &\longleftrightarrow r_e \sin \theta \sin \varphi \psi(\theta, \varphi) \\ Z |\psi \rangle &\longleftrightarrow r_e \cos \theta \psi(\theta, \varphi) \end{aligned} \quad (16)$$

یادداشت:

همان‌طور که قبلاً در مقدمه متذکر شدیم، تابع موجهای حقیقی مولکول به r, θ, φ بستگی دارند، به‌طور

مشابه، مشاهده پذیرهای این مولکول، که توسط قوانین کوانتس فصل سوم از کمیات کلاسیکی متناظر به دست می آیند، نه تنها روی توابع θ و φ بلکه روی این توابع از سه متغیر عمل می کنند. در مکمل ۶ از فصل ۷ دیدگاهی را که در اینجا اتخاذ کرده ایم یعنی چشمپوشی از قسمت شعاعی تابع موجها و اینکه r به عنوان یک پارامتر ثابت و برابر با r_e تلقی می شود، توجیه خواهیم کرد. [فرمولهای (۱۴) و (۱۶)]. ■

ب) ویژه حالتها و ویژه مقادارهای هامیلتونی

ویژه مقادارهای عملگر L^2 را در بخش ۶-۲ تعیین کردیم: این ویژه مقادارها به صورت $l(l+1)\hbar^2$ هستند که l یک عدد درست نامفی است. به علاوه، یک دستگاه راست هنجار از ویژه تابعهای L^2 را می شناسیم: هماهنگهای کروی $Y_l^m(\theta, \varphi)$ ، که در فضای توابع انتگرال پذیر مجذوری بر حسب θ و φ یک پایه تشکیل می دهند (قسمت ج-۲ بخش ۶-۴-۱). کیت \mathcal{E}_Ω وابسته به $Y_l^m(\theta, \varphi)$ را با (l, m) نمایش می دهیم

$$Y_l^m(\theta, \varphi) \longleftrightarrow |l, m\rangle \quad (17)$$

از (۱۳) ملاحظه می شود که

$$H |l, m\rangle = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_e^2} |l, m\rangle \quad (18)$$

معمولاً جایگذاری زیر را انجام می دهند

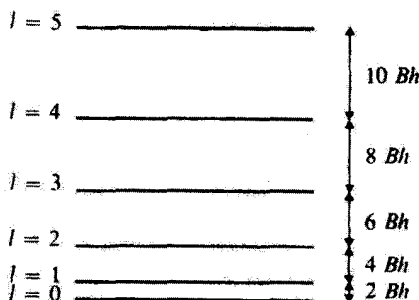
$$B = \frac{\hbar}{4\pi I} = \frac{\hbar}{4\pi\mu r_e^2} \quad (19)$$

B را "ثابت دورانی" گویند که دارای ابعاد بسامد است.^۱ بنابراین، ویژه مقادارهای H به شکل زیر خواهند بود

$$E_l = Bhl(l+1) \quad (20)$$

چون به ازای یک مقدار معین l تعداد $(2l+1)$ هماهنگ کروی $Y_l^m(\theta, \varphi)$ وجود دارد ($m = -l, -l+1, \dots, l$) ملاحظه می شود که هر ویژه مقدار E_l واگن مرتبه $(2l+1)$ است. شکل ۲ اولین ترازهای انرژی چرخنده را نشان می دهد. فاصله دو تراز مجاور l و $l-1$ برابر است

۱. گاهی در مخرج طرف راست (۱۹) سرعت نوب قرار داده می شود. آنگاه B دارای ابعاد عکس طول است و بر حسب cm^{-1} (در دستگاه CGS) بیان می شود.



شکل ۲ اولین ترازهای چرخنده صلب، با انرژیهای $E_l = Bh l(l+1)$ ، $(l = 0, 1, 2, \dots)$ ، هر تراز E_l که برای آن $l \geq 1$ ، از تراز مجاور پایین به اندازه انرژی $2Bhl$ فاصله دارد.

با

$$E_l - E_{l-1} = Bh[l(l+1) - (l-1)l] = 2Bhl \quad (21)$$

که به طور خطی با l افزایش می‌یابد.

ویژه‌حالت‌های H در روابط راست‌هنجاری و بستاری زیر (که از روابط صادق برای هماهنگ‌های کروی قسمت ج-۲، بخش ۴-۶-۱ این فصل نتیجه شده‌اند) صدق می‌کند

$$\begin{aligned} \langle l, m | l', m' \rangle &= \delta_{ll'} \delta_{mm'} \\ \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} |l, m\rangle \langle l, m| &= 1 \end{aligned} \quad (22)$$

عمومیت‌ترین حالت کوانتومی چرخنده را می‌توان برحسب حالت‌های $|l, m\rangle$ بسط داد

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} c_{l,m}(t) |l, m\rangle \quad (23)$$

مؤلفه

$$c_{l,m}(t) = \langle l, m | \psi(t) \rangle = \int d\Omega Y_l^{m*}(\theta, \varphi) \psi(\theta, \varphi; t) \quad (24)$$

برطبق معادله زیر برحسب زمان تحول می‌یابد

$$c_{l,m}(t) = c_{l,m}(0) e^{-iE_l t/\hbar} \quad (25)$$

ج) مطالعه مشاهده‌پذیر Z

قبلاً مشاهده‌پذیرهای X ، Y ، و Z را که به تصاویر پاره‌خط $M_1 M_2$ روی سه محور مربوط می‌شوند معرفی کردیم. در این قسمت، تحول مقادیر متوسط این مشاهده‌پذیرها را مطالعه خواهیم کرد و نتایج به دست آمده را با نتایج پیش‌بینی شده از مکانیک کلاسیک مقایسه خواهیم کرد. فقط محاسبه $\langle Z \rangle(t)$ را انجام می‌دهیم زیرا $\langle X \rangle(t)$ و $\langle Y \rangle(t)$ خواص مشابهی دارند.

بسامد بور $E_l - E_{l'}/\hbar$ می‌تواند در تابع $\langle Z \rangle(t)$ ظاهر شود، هرگاه Z دارای عنصر ماتریسی غیرصفر بین حالت $|l, m\rangle$ با انرژی E_l و حالت $|l', m'\rangle$ با انرژی $E_{l'}$ باشد. بنابراین اولین مسئله پیدا کردن عناصر ماتریسی غیرصفر Z است. برای حل این مسئله، از رابطه زیر استفاده می‌کنیم که از روی خواص ریاضی هماهنگهای کروی اثبات می‌شود [مکمل ۱، همین فصل، فرمول (۳۵)]:

$$\cos \theta Y_l^m(\theta, \psi) = \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{4l^2 - 1}} Y_{l-1}^m(\theta, \psi) + \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{4(l+1)^2 - 1}} Y_{l+1}^m(\theta, \psi) \quad (26)$$

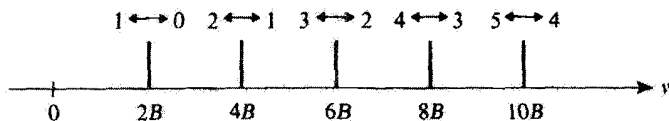
از اینجا، با استفاده از روابط (۱۶)، (۱۷)، و (۲۲) نتیجه می‌گیریم که

$$\langle l', m' | Z | l, m \rangle = r_e \delta_{mm'} \left[\delta_{l', l-1} \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{4l^2 - 1}} + \delta_{l', l+1} \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{4(l+1)^2 - 1}} \right] \quad (27)$$

یادداشت:

برطبق (۲۷)، قوانین انتخاب صادق برای Z عبارت‌اند از: $\Delta l = \pm 1$ ، $\Delta m = 0$. می‌توان نشان داد که برای X و Y داریم $\Delta l = \pm 1$ ، $\Delta m = \pm 1$. چون انرژیها فقط بستگی به l دارند، بسامدهای بور برای \blacksquare $\langle X \rangle$ ، $\langle Y \rangle$ ، و $\langle Z \rangle$ یکی هستند.

بنابراین عملگر Z می‌تواند فقط حالت‌های متعلق به دو تراز مجاور در شکل ۲ را متصل کند (گذارهای مربوط توسط نیکانه‌های عمودی در شکل ۲ نمایش داده شده‌اند). پس تنها بسامدهای



شکل ۳ بسامدهایی که در تحول مقدار متوسط مشاهده پذیر Z ظاهر می‌شوند. به علت قاعده گزینش $\Delta l = \pm 1$ فقط بسامدهای بور $2Bl$ (با $l \geq 1$) وابسته به دو تراز مجاور E_l و E_{l-1} در شکل ۲ مشاهده می‌شوند.

پور که در تحول $\langle Z \rangle(t)$ ظاهر می‌شوند به شکل زیر هستند

$$v_{l,l-1} = \frac{E_l - E_{l-1}}{\hbar} = 2Bl \quad (28)$$

این بسامدها تشکیل یک رشته بسامدهای هم فاصله می‌دهند که به اندازه $2B$ از هم جدا شده‌اند (شکل ۳).

مقدار متوسط $\langle Z \rangle(t)$ فقط به ازای یک رشته کاملاً معین از بسامدها می‌تواند تحول پیدا کند، و این متفاوت از مورد کلاسیک است که بر طبق آن بسامد دوران ν_R چرخنده می‌تواند هر مقداری بگیرد.

بر طبق (۲۷)، اگر دستگاه در حالت مانای $|l, m\rangle$ باشد، $\langle Z \rangle(t)$ همیشه صفر است حتی اگر l بزرگ باشد. برای به دست آوردن یک حالت کوانتوم مکانیکی که در آن $\langle Z \rangle$ مانند متغیر کلاسیک متناظر رفتار کند، باید تعداد زیادی از حالت‌های $|l, m\rangle$ را برهم نهمیم. اگر فرض کنیم حالت دستگاه توسط فرمول (۲۳) داده شود و اعداد $|c_{l,m}(0)|^2$ دارای مقادیری باشند که مطابق شکل ۴، با l تغییر می‌کنند محتملترین مقدار l ، یعنی l_M ، بسیار بزرگ است؛ گسترش Δl مقادیر l نیز از لحاظ قدر مطلق بسیار زیاد است. ولی مقدار نسبی آن بسیار کم است

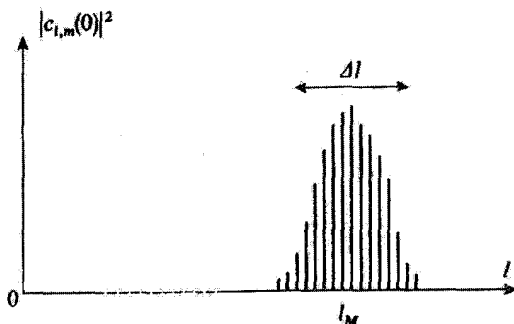
$$l_M, \Delta l \gg 1 \quad (29\text{-الف})$$

$$\frac{\Delta l}{l_M} \ll 1 \quad (29\text{-ب})$$

می‌توان نشان داد که در چنین حالتی

$$\langle \mathbf{L} \rangle^2 \simeq \langle \mathbf{L}^2 \rangle \simeq l_M(l_M + 1)\hbar^2 \simeq l_M^2 \hbar^2 \quad (30)$$

به علاوه، بسامدهای بور که در $\langle Z \rangle(t)$ ظاهر می‌شوند در این حال تماماً (از لحاظ مقدار نسبی)



شکل ۴ مجذور قدرمطلق ضرایب بسط یک حالت "شبه کلاسیک" روی حالت‌های مانای (l, m) از یک چرخنده صلب. گسترش Δl وسیع است، چون مهمترین مقدار l ، یعنی l_M ، بسیار زیاد است، داریم $\Delta l/l_M \ll 1$ و دقت نسبی نسبت به l بسیار خوب است.

بسیار نزدیک به مقدار زیر هستند

$$\nu_M = 2Bl_M \quad (31)$$

با حذف l_M بین (۳۰) و (۳۱)، برطبق (۱۹) داریم

$$\nu_M \simeq \frac{2B |\langle L \rangle|}{\hbar} = \frac{|\langle L \rangle|}{2\pi I} \quad (32)$$

که معادل رابطه کلاسیک (۶) است.

یادداشت:

مطالعه مفصلتر حرکت بسته موج مربوط به حالت شکل ۴ جالب توجه است. این بسته موج با تابعی از θ و φ نمایش داده می‌شود و می‌توان در نظر گرفت که روی کره‌ای به شعاع واحد تحول می‌یابد. بحث قبلی نشان می‌دهد که این بسته موج روی کره با بسامد متوسط ν_M دوران می‌کند. به علت گسترش l به اندازه Δl و گسترش متناظر $2B\Delta l$ مربوط به بسامدهای بور که در (X) ، (Y) ، و (Z) وارد می‌شوند، بسته موج در خلال زمان تغییر شکل می‌دهد. این تغییر شکل بعد از زمانی از مرتبه زیر قابل ملاحظه می‌شود

$$\tau \simeq \frac{1}{2B \Delta l} \quad (33)$$

چون گسترش l از لحاظ مقدار نسبی کوچک است، داریم

$$\nu_{MT} \simeq \frac{l_M}{\Delta l} \gg 1 \quad (34)$$

پس تغییر شکل بسته موج نسبت به دوران آن کند است.

در واقع، بسامدهای یور دستگاه تشکیل یک رشته گسسته از بسامدهای هم فاصله می دهند که با بازه $2B$ از یکدیگر مجزا شده اند. پس حرکتی که از برهم نهی این بسامدها پدید می آید دوره ای است و دوره آن برابر است با

$$T = \frac{1}{2B} \quad (35)$$

که بنابر (۲۹-الف) داریم

$$T \gg \tau \gg \frac{1}{\nu_M} \quad (36)$$

بنابراین، تغییر شکل بسته موج برگشت ناپذیر نیست؛ این تغییر شکل از چرخه ای که به طور متناوب تکرار می شود تبعیت می کند. این رفتار باید با رفتار بسته های موج آزاد (گسترش برگشت ناپذیر؛ مکمل G_1 فصل یک) و رفتار حالت های شبه کلاسیک نوسانگر هماهنگ (نوسان بدون تغییر شکل؛ به مکمل ۷ فصل ۵) مقایسه شود.

۴. شواهد تجربی برای دوران مولکولها

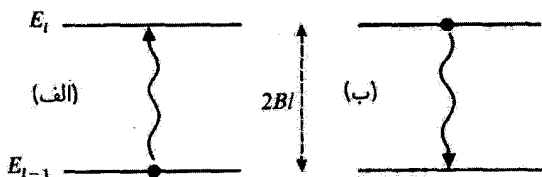
الف) مولکولهای ناهمقطب. طیف دورانی محض

۱. توصیف طیف

اگر مولکول از دو اتم مختلف ترکیب شده باشد، الکترونها توسط اتمی که الکترون گاتیوتر است جذب می شوند، و مولکول عموماً دارای گشتاور دوقطبی الکتریکی دائمی d_0 است که در راستای محور مولکول قرار می گیرد. تصویر گشتاور دوقطبی الکتریکی روی Oz ، به بیان مکانیک کوانتومی، یک مشاهده پذیر متناسب با Z می شود. دیده ایم که $\langle Z \rangle(t)$ در تمام بسامدهای یور $2Bl$ ($l = 1, 2, 3, \dots$) که در شکل ۳ نشان داده شده اند، تحول می یابد. بنابراین می بینیم که چگونه مولکول به میدان الکترومغناطیسی جفت می شود و می تواند تابش قطبیده به موازات Oz را جذب یا گسیل کند؛ به شرطی که بسامد این تابش برابر یکی از بسامدهای یور $2Bl$ باشد.

طیف جذبی یا گسیلی متناظر مولکول را "طیف دورانی محض" گویند. این طیف از یک رشته خطوط هم فاصله ترکیب می یابد؛ مطابق شکل ۳، فاصله بسامدی بین خطوط متوالی برابر $2B$ است. جذب (یا گسیل) خط بسامد $2Bl$ متناظر با گذار مولکول از تراز $l-1$ به تراز l (یا از تراز l به تراز $l-1$) است درحالی که یک فوتون با بسامد $2Bl$ جذب (یا گسیل) می شود. شکل ۵

۱. اگر حرکت $(X)(t)$ و $(Y)(t)$ را بررسی کنیم، ملاحظه می کنیم که مولکول همچنین می تواند تابش قطبیده موازی با Ox یا Oy را جذب یا گسیل کند.



شکل ۵ طرحواره نمایش گذار مولکول از یک تراز دورانی معین به تراز مجاور با جذب (الف) یا گسیل (ب) یک فوتون.

به طور طرحوار این فرایند را نشان می‌دهد [شکل ۵ (الف) معرف جذب و شکل ۵ (ب) معرف گسیل یک فوتون با بسامد $2Bl$ است].

پس طیف دورانی محض مولکولهای دو اتمی، یک اثبات مستقیم تجربی برای کوانتس مشاهده پذیر L^2 به دست می‌دهد.

۲. مقایسه با طیف "ارتعاشی محض"

در بخش ۱-ج-۱ از مکمل ۱ فصل ۵، طیف "ارتعاشی محض" یک مولکول دو اتمی ناهمقطب را مطالعه کردیم. جالب است که این طیف را با طیف دورانی محض که در اینجا مطالعه می‌کنیم، مقایسه کنیم.

الف) بسامدهای دورانی مولکول دو اتمی معمولاً بسیار کمتر از بسامدهای ارتعاشی هستند. فاصله $2B/c$ دو خط طیفی بین چنددهم cm^{-1} و چند ده cm^{-1} تغییر می‌کند. بنابراین، برای مقادیر کم l بسامدهای دورانی $2Bl$ متناظر با طول موجهایی از مرتبه سانتیمتر یا میلیمتر هستند. مثلاً برای HCl ، فاصله $2B/c$ برابر $(8\text{cm}^{-1})^\circ 20$ است، درحالی‌که بسامد ارتعاشی، که متناظر با 2886cm^{-1} است، بیش از صد مرتبه بزرگتر است.

بنابراین طیفهای دورانی محض در ناحیه فرورسرخ دور یا ریزموج واقع می‌شوند.

یادداشت:

همان‌طور که در مکمل ۶ فصل ۷ نشان خواهیم داد، دوران مولکولها نیز در طیفهای ارتعاشی ساختار ریزی ایجاد می‌کنند (طیفهای ارتعاشی-دورانی). پس $2B$ می‌تواند در قلمرو طول موجهایی که بلندتر از ریزموجها نیستند واقع شود. همین یادداشت در اثر دورانی رامان (بخش ۴-ب زیر)، که به صورت ساختار دورانی خط اپتیکی ظاهر می‌شود، صادق است. ■

ب) طیف "ارتعاشی محض" که در مکمل ۱ فصل ۵ مطالعه شد فقط دارای یک خط ارتعاشی است. این امر ناشی از این است که ترازهای ارتعاشی مختلف هم‌فاصله هستند (اگر از ناهماهنگ بودن پتانسیل صرف‌نظر شود) و در نتیجه فقط یک بسامد بور در حرکت دوقطبی ظاهر

می‌شود (قاعدهٔ گزینش $\pm 1 = \Delta v$). از طرف دیگر، طیف دورانی محض از یک رشته خطوط هم‌فاصله تشکیل می‌شود.

(ج) در مکمل ۱ فصل ۵ نشان دادیم که گشتاور دوقطبی الکتریکی دائمی یک مولکول ناهمقطب را می‌توان برحسب توانهای $(r - r_e)$ در مجاورت مکان تعادل پایدار مولکول بسط داد

$$D(r) = d_0 + d_1(r - r_e) + \dots \quad (37)$$

برای اینکه طیف ارتعاشی محض ظاهر شود، باید $D(r)$ با r تغییر کند؛ بنابراین باید d_1 متفاوت از صفر باشد. از طرف دیگر، حتی اگر r ثابت و برابر با r_e بماند، دوران مولکول، تصویر دوقطبی الکتریکی را روی یکی از محورها مدوله می‌کند، به شرط اینکه d_0 متفاوت از صفر باشد. بنابراین ملاحظه می‌کنیم که مطالعهٔ شدت خطوط ارتعاشی و دورانی اندازه‌گیری مجزای ضرایب d_0 و d_1 از (۳۷) را امکانپذیر می‌سازد.

۳. کاربردها

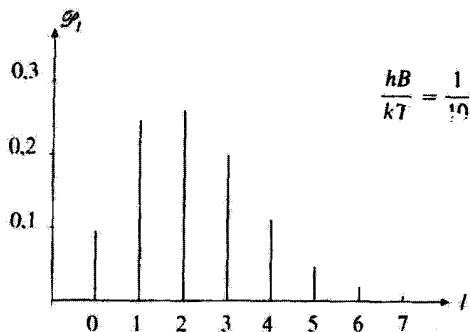
مطالعهٔ طیف دورانی محض کاربردهای جالبی دارد؛ سه نمونه را بیان می‌کنیم.

(الف) اندازه‌گیری فاصلهٔ B دو خط طیفی مجاور هم، گشتاور لختی I مولکول را برطبق (۱۹) می‌دهد. اگر m_1 و m_2 را بدانیم، می‌توانیم r_e یعنی فاصلهٔ دو هسته در مکان تعادل پایدار مولکول را نتیجه بگیریم r_e عرض مینیموم منحنی $V(r)$ در شکل ۱ از مکمل ۱ فصل ۵ است. یادآوری می‌کنیم که اندازه‌گیری بسامد ارتعاشی انحنای $V(r)$ را در $r = r_e$ می‌دهد.

(ب) دو مولکول دوامی $N - M$ و $N - M'$ را در نظر می‌گیریم، که در آنها دو ایزوتوپ M و M' از یک عنصر به یک اتم N متصل شده‌اند. چون فاصلهٔ r_e بین هسته‌ها در دو مولکول یکسان است اندازه‌گیری نسبت ضرایب متناظر B ، که می‌تواند با دقت زیاد انجام شود، نسبت جرمهای دو ایزوتوپ M و M' را به دست می‌دهد.

همچنین می‌توان بسامدهای ارتعاشی دو مولکول را مقایسه کرد، اما بهتر است که از طیف دورانی استفاده شود، زیرا بسامدهای دورانی به نسبت $1/\mu$ تغییر می‌کنند [فرمول (۱۹)]، در حالی که بسامدهای ارتعاشی به نسبت $1/\sqrt{\mu}$ تغییر می‌کنند [فرمول (۵)] از مکمل ۱ فصل ۵].

(ج) در مطالعهٔ یک نمونهٔ محتوی تعداد زیادی از مولکولهای یکسان، شدت نسبی خطوط (در جذب یا گسیل) طیف دورانی محض، اطلاعاتی دربارهٔ توزیع مولکولها بین ترازهای مختلف E_i به دست می‌دهد. برخلاف آنچه در مورد طیف ارتعاشی رخ می‌دهد، گذار بین دو تراز مجاور معین (پیکانها در شکل ۲) در یک بسامد ویژه رخ می‌دهد، که مشخصهٔ این دو تراز است. بنابراین، شدت خط متناظر، به تعداد مولکولهایی که در دو تراز یافت می‌شوند بستگی دارد.



شکل ۶ جمعیت \mathcal{P}_l ترازهای دوران مختلف E_l در تعادل ترمودینامیکی. این واقعیت که \mathcal{P}_l در آغاز با افزایش l زیاد می‌شود، ناشی از مرتبه $(2l + 1)$ واگنی ترازهای E_l است. وقتی l به حد کافی بزرگ شود، عامل بولتزمان $e^{-E_l/kT}$ غلبه می‌کند و باعث کاهش \mathcal{P}_l می‌شود.

از این اطلاعات می‌توان در تعیین دمای یک محیط استفاده کرد.^۱ اگر تعادل ترمودینامیکی برقرار باشد می‌دانیم که احتمال اینکه یک مولکول معین در یک حالت خاصی از انرژی E_l باشد با $e^{-E_l/kT}$ متناسب است؛ چون مرتبه واگنی تراز دورانی E_l برابر $(2l + 1)$ است، احتمال کل \mathcal{P}_l یافتن مولکول مورد نظر در یکی از حالت‌های تراز E_l ("جمعیت" تراز E_l) عبارت است از

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_l &= \frac{1}{Z} (2l + 1) e^{-E_l/kT} \\ &= \frac{1}{Z} (2l + 1) e^{-l(l+1)hB/kT} \end{aligned} \quad (28)$$

که در آن

$$Z = \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) e^{-l(l+1)hB/kT} \quad (29)$$

تابع افزایش است. اگر دستگاهی محتوی تعداد زیادی مولکول که بتوان از برهم‌کنش آنها صرف‌نظر کرد، مورد مطالعه قرار گیرد، \mathcal{P}_l کسری از آنها را می‌دهد که انرژی‌شان E_l است.

در ماه‌های معمولی، hB بسیار کوچکتر از kT است، به طوری که ترازهای دورانی متعددی اشغال می‌شوند. توجه کنید که حضور عامل $(2l + 1)$ می‌رساند که پایستترین ترازها پرجمعیت‌ترین ترازها نیستند؛ شکل ۶ نمودار \mathcal{P}_l را به صورت تابعی از l به ازای دمای T به طوری که hB/kT

۱. در عمل طیف‌های ارتعاشی-دورانی، یا طیف دورانی رامان، اغلب بیشتر مورد استفاده‌اند، زیرا در گستره‌های بسامدی راحت‌تر در طیف دورانی محض قرار می‌گیرند.

از مرتبه $1/10$ است نشان می‌دهد. متذکر می‌شویم که ترازهای ارتعاشی، از طرف دیگر، واگن نیستند، و فاصله آنها بسیار بیشتر از hB است؛ در نتیجه، وقتی توزیع مولکولها بین دو تراز دورانی به‌مانند شکل ۶ است، آنها عملاً همگی در حالت پایه ارتعاشی ($v = 0$) هستند.

ب) مولکولهای همقطب. طیفهای دورانی رامان

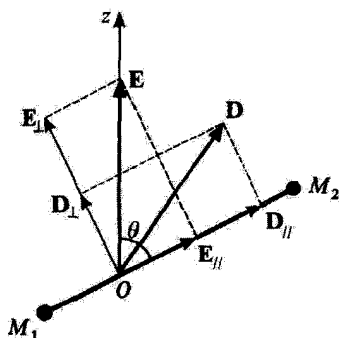
همان‌طور که در بخش ۱-ج-۲ از مکمل ۱ فصل ۵ متذکر شدیم، یک مولکول همقطب (یعنی مولکولی که از دو اتم یکسان ترکیب شده است)، دارای گشتاور دوقطبی الکتریکی دائمی نیست؛ در فرمول (۳۷)، داریم $d_0 = d_1 = \dots = 0$. ارتعاش و دوران مولکول، با میدان الکترومغناطیسی ایجاد جفتیگی نمی‌کند و در نتیجه، مولکول در قلمرو فروسرخ نزدیک (ارتعاشی) و زیرموج (دورانی) "غیرفعال" می‌ماند. اما، مانند ارتعاش (بخش ۱-ج-۲ مکمل ۱ فصل ۵)، دوران مولکول را می‌توان، از طریق پراکنندگی ناکشسان نور (اثر رامان) مشاهده کرد.

۱. اثر دورانی رامان. بررسی کلاسیک

قبلاً در مکمل ۱ فصل ۵ پذیرفتاری χ مولکول در محدوده نوری را معرفی کردیم: موج نور فرودی، که میدان الکتریکی آن $E e^{i\Omega t}$ است، الکترونها را به حرکت واداشته در می‌آورد و ایجاد دوقطبی الکتریکی $D e^{i\Omega t}$ می‌کند، که با همان بسامد موج فرودی نوسان می‌کند. χ ضریب تناسب بین D و E است. اگر E موازی محور مولکول باشد، χ بستگی به فاصله z بین دو هسته دارد؛ وقتی مولکول ارتعاش می‌کند χ با همان بسامد ارتعاش می‌کند. این پدیده منشأ اثر ارتعاشی رامان است که در بخش ۱-ج-۲ مکمل ۱ فصل ۵ توصیف شد.

یک مولکول دو اتمی عملاً یک دستگاه ناهمسانگرد است. وقتی زاویه بین محور مولکولی و E اختیاری باشد معمولاً D موازی E نیست؛ رابطه بین E و D تانسوری است (χ "تانسور پذیرفتاری" است). در دو مورد ساده زیر D موازی E است: E موازی محور مولکول است (به طوری که داریم $\chi_{||} = \chi$)، و E عمود بر این محور است ($\chi = \chi_{\perp}$). در مورد کلی، محور Oz را در امتداد میدان الکتریکی E موج نور (که قطبیده فرض می‌شود) انتخاب می‌کنیم؛ مولکولی را در نظر می‌گیریم که محورش با زوایای قطبی θ و φ تعیین می‌شود و مؤلفه z دوقطبی که توسط E در این مولکول القا می‌شود را محاسبه می‌کنیم. E را می‌توان به یک مؤلفه $E_{||}$ موازی با محور مولکول، و یک مؤلفه E_{\perp} ، قائم بر $M_1 M_2$ و واقع در سطحی که از Oz و $M_1 M_2$ تشکیل می‌شود، تجزیه کرد (شکل ۷). پس دوقطبی القا شده در مولکول توسط میدان $E \cos \Omega t$ برابر است با

$$D = (\chi_{||} E_{||} + \chi_{\perp} E_{\perp}) \cos \Omega t \quad (40)$$



شکل ۷ تجزیه میدان الکتریکی \mathbf{E} به مؤلفه $\mathbf{E}_{||}$ موازی با محور مولکول و \mathbf{E}_{\perp} عمود بر همین محور. این میدانها دوقطبیهای الکتریکی $\chi_{||}\mathbf{E}_{||}$ و $\chi_{\perp}\mathbf{E}_{\perp}$ را تولید می‌کند که با میدانهای مربوط همخط‌اند. اما چون $\chi_{||}$ و χ_{\perp} مقادیر متفاوتی دارند (مولکول ناهمسانگرد است) دوقطبی القایی $\mathbf{D} = \chi_{||}\mathbf{E}_{||} + \chi_{\perp}\mathbf{E}_{\perp}$ با میدان \mathbf{E} در یک خط نیست.

که تصویر آن روی Oz عبارت است از

$$\begin{aligned} D_z &= (\cos \theta \chi_{||} | \mathbf{E}_{||} | + \sin \theta \chi_{\perp} | \mathbf{E}_{\perp} |) \cos \Omega t \\ &= (\cos^2 \theta \chi_{||} + \sin^2 \theta \chi_{\perp}) E \cos \Omega t \\ &= [\chi_{\perp} + (\chi_{||} - \chi_{\perp}) \cos^2 \theta] \cos \Omega t \end{aligned} \quad (41)$$

ملاحظه می‌شود که D_z بستگی به θ دارد، چون $\chi_{||}$ و χ_{\perp} مساوی نیستند (مولکول ناهمسانگرد است).

برای اینکه بینیم وقتی مولکول دوران می‌کند چه رخ می‌دهد، ابتدا استدلال کلاسیک را بیان می‌کنیم. این واقعیت که مولکول با بسامد $\omega_R/2\pi$ دوران می‌کند می‌رساند که $\cos \theta$ با همان بسامد نوسان می‌کند

$$\cos \theta = \alpha \cos(\omega_R t - \beta) \quad (42)$$

که α و β به شرایط اولیه و سمت‌گیری تکانه زاویه‌ای \mathcal{L} (که ثابت است) بستگی دارد. بنابراین می‌بینیم که عبارت مربوط به $\cos^2 \theta$ در (۴۱) به مؤلفه‌های D_z این منجر می‌شود که با بسامدهای $\Omega \pm 2\omega_R/2\pi$ نوسان می‌کنند، که علاوه بر مؤلفه‌ای است که با بسامد $\Omega/2\pi$ تغییر می‌کند. این واقعیت که دوران مولکول در بسامد $\omega_R/2\pi$ قطبش‌پذیری آن را در دو برابر بسامدش مدوله می‌کند به سهولت قابل درک است: بعد از نیم دوران، که در نیم دوره انجام می‌شود، مولکول به همان موقعیت هندسی نسبت به موج نور فرودی بر می‌گردد. نور مجدداً گسیل یافته با قطبش موازی

Oz نوری است که توسط D_z تابش می‌شود. این نور دارای یک خط بدون جابه‌جایی با بسامد $\Omega/2\pi$ (خط ریلی) و همچنین دو خط جابه‌جا شده است، که هرکدام در یک طرف خط ریلی، با بسامدهای $\Omega - 2\omega_R/2\pi$ (خط رامان-استوکس) و $\Omega + 2\omega_R/2\pi$ (خط رامان-پاداستوکس) قرار می‌گیرند.

۲. قواعد گزینش مکانیک کوانتومی. شکل طیف رامان از لحاظ مکانیک کوانتومی، پراکندگی رامان متناظر با یک فرایند پراکندگی کشسان است که در آن مولکول از تراز E_i به تراز $E_{i'}$ می‌رود، درحالی‌که انرژی فوتون $\hbar\Omega$ فوتون $\hbar\Omega + E_{i'} - E_i$ می‌شود (انرژی کل دستگاه در خلال این فرایند پایسته می‌ماند).

نظریه کوانتومی اثر رامان (که در اینجا بحث نخواهیم کرد) نشان می‌دهد که احتمال چنین فرایندی شامل عناصر ماتریسی $(\chi_{\parallel} - \chi_{\perp}) \cos^2 \theta + \chi_{\perp}$ بین حالت اولیه $Y_l^m(\theta, \varphi)$ و حالت نهایی $Y_{l'}^{m'}(\theta, \varphi)$ مولکول است:

$$\int d\Omega Y_{l'}^{m'*}(\theta, \varphi) [(\chi_{\parallel} - \chi_{\perp}) \cos^2 \theta + \chi_{\perp}] Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (43)$$

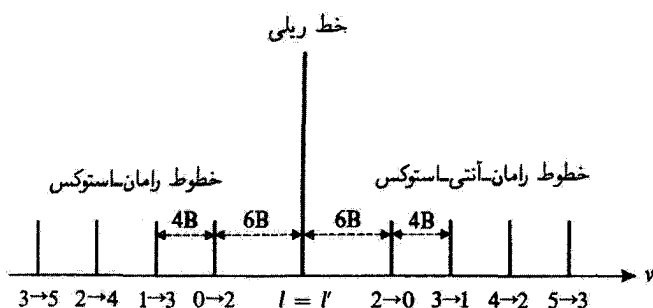
با استفاده از خواص هماهنگهای کروی، می‌توان نشان داد که یک چنین عنصر ماتریسی فقط وقتی مخالف صفر است که^۱

$$l' - l = 0, +2, -2 \quad (44)$$

فقط یک خط ریلی (که متناظر با $l = l'$ است) وجود دارد. چون ترازهای دورانی هم‌فاصله نیستند چندین خط رامان-پاداستوکس (که متناظر با $l' = l - 2$ هستند) با بسامدهای زیر وجود دارند

$$\begin{cases} \frac{\Omega}{2\pi} + \frac{E_{l'+2} - E_{l'}}{h} = \frac{\Omega}{2\pi} + 2B \left(l' + \frac{3}{2} \right) \\ l' = 0, 1, 2, \dots \end{cases} \quad (45)$$

۱. انتگرال (۴۳) در صورتی که $m' \neq m$ نیز صفر است. اگر نور مجدداً گسیل‌یافته را با حالت قطبش متفاوت از حالت موج فرودی در نظر بگیریم. قواعد گزینش زیر را برای m به دست می‌آوریم $\Delta m = 0, \pm 1, \pm 2$.



شکل ۸ طیف دورانی رامان یک مولکول. این مولکول، که ابتدا در تراز دورانی $E_{l'}$ است، یک فوتون فرودی را با انرژی $\hbar\Omega$ به طور ناکشسان پراکنده می‌کند. بعد از پراکندگی، مولکول به تراز دورانی $E_{l'}$ رفته است، و انرژی فوتون برابر است با $\hbar\Omega + E_{l'} - E_{l'}$ (پایستگی انرژی).

اگر $l' = l$ ، فوتون پراکنده دارای همان بسامد $\Omega/2\pi$ بسامد فرودی است؛ این منجر به خط ریلی می‌شود. اما این امکان نیز وجود دارد که داشته باشیم $l' - l = \pm 2$ ؛ اگر $l' = l + 2$ ، بسامد فوتون پراکنده کمتر است (پراکندگی استوکس)؛ اگر $l' = l - 2$ ، بیشتر است (پراکندگی پاداستوکس). چون ترازهای دورانی $E_{l'}$ هم فاصله نیستند (شکل ۲)، به همان تعداد که l وجود دارد خطوط استوکس یا پاداستوکس وجود دارند. این خطوط در شکل توسط $l' \rightarrow l$ (با $l' = l \pm 2$) نشان داده شده‌اند.

و تعدادی خط رامان-استوکس (متناظر با $l' = l + 2$) با بسامدهای

$$\begin{cases} \frac{\Omega}{2\pi} + \frac{E_{l'} - E_{l'+2}}{\hbar} = \frac{\Omega}{2\pi} - 4B \left(l + \frac{3}{2} \right) \\ l = 0, 1, 2, \dots \end{cases} \quad (46)$$

شکل طیف دورانی رامان در شکل ۸ نشان داده شده است. خطوط استوکس و پاداستوکس نسبت به خط ریلی به طور متقارن رخ می‌دهند. فاصله بین دو خط استوکس (یا پاداستوکس) مجاور برابر است با $4B$ ، یعنی دو برابر فاصله‌ای که ممکن است بین دو خط مجاور در طیف دورانی محض، در صورت وجود، پیدا شود. به علاوه، چون بسامد ارتعاشی خیلی بیشتر از B است، خطوط ارتعاشی رامان-استوکس و پاداستوکس نسبت به خطوط دورانی رامان بسیار دورتر در طرف چپ و راست خط ریلی واقع می‌شوند، و از این رو در شکل ظاهر نمی‌شوند (این خطوط دارای ساختارهای دورانی شبیه به شکل ۸ نیز هستند).

یادداشتها:

۱. یک بسته موج نظیر آنچه در بخش ۳-ج مطالعه شد در نظر بگیرید، یعنی بسته‌ای که برای آن مقادیر l حول یک عدد صحیح بسیار بزرگ l_0 واقع شده باشند (شکل ۴). برطبق (۴۵) و

(۴۶)، بسامدهای خطوط مختلف استوکس و پاداستوکس (از لحاظ مقدار نسبی) بسیار نزدیک به مقادیر زیر هستند

$$\frac{\Omega}{2\pi} \pm 4Bl_M \quad (47)$$

یا، برطبق (۳۱)

$$\frac{\Omega}{2\pi} \pm 2\nu_M \quad (48)$$

که ν_M بسامد دورانی متوسط مولکول است. بنابراین، بررسی مکانیک کوانتومی، در حد کلاسیک نتیجه بخش ۴-ب-۱ را به دست می‌دهد.

۲. در طیفهای دورانی رامان، خطوط استوکس و پاداستوکس با شدتهای حدود هم ظاهر می‌شوند زیرا ترازهای با l بزرگ، چون $\hbar B$ بسیار کمتر از $\hbar T$ است، جمعیتهای زیادی دارند. این برای مشاهده خطوط پاداستوکس که برای آنها حالت اولیه مولکول باید لا اقل $l = 2$ باشد، ضروری است. اما خط ارتعاشی پاداستوکس دارای شدتی بسیار کمتر از خط استوکس است. انرژی ارتعاشی بسیار بیشتر از $\hbar T$ است؛ جمعیت حالت پایه ارتعاشی $v = 0$ بسیار بیشتر از دیگران است، و فرایندهای استوکس $v = 0 \rightarrow v = 1$ بسیار فراوانتر از فرایندهای پاداستوکس $v = 1 \rightarrow v = 0$ هستند.

۳. اثر دورانی رامان برای مولکولهای ناهمقطب نیز وجود دارد.

مراجع برای مطالعه بیشتر

Karplus and Porter (12.1), §7.4; Herzberg (12.4), Vol. I, chap. III, §§1 and 2; Landau and Lifshitz (1.19), chaps. XI and XIII; Townes and Schawlow (12.10), chaps. 1 to 4.

تکانه زاویه‌ای حالت‌های مانای نوسانگر هماهنگ دوبعدی

۱. مقدمه

الف) مروری بر مسئله کلاسیک

ب) مسئله در مکانیک کوانتومی

۲. دسته‌بندی حالت‌های مانا با اعداد کوانتومی n_x و n_y

الف) انرژیها؛ حالت‌های مانا

ب) H_{xy} تشکیل یک مجموعه کامل از مشاهده پذیرهای جابه‌جایی پذیر را در \mathcal{E}_{xy} نمی‌دهد

۳. دسته‌بندی حالت‌های مانا برحسب تکانه‌های زاویه‌ای آنها

الف) مفهوم و خواص عملگر L_z

ب) کوانتومهای دایره‌ای راست و چپ

ج) حالت‌های مانا با تکانه زاویه‌ای کاملاً معین

د) تابع موجهای وابسته به ویژه حالت‌های مشترک H_{xy} و L_z

۴. حالت‌های شبه‌کلاسیک

الف) تعریف حالت‌های $|\alpha_x, \alpha_y\rangle$ و $|\alpha_x, \alpha_y\rangle$

ب) مقادیر میانگین و انحراف ریشه میانگین مربعی مشاهده پذیرهای مختلف.

در این مکمل، با خواص مکانیک کوانتومی نوسانگر هماهنگ دوبعدی سروکار داریم. مسئله مکانیک کوانتومی کاملاً قابل حل است و حاوی محاسبات پیچیده نیست. به علاوه، این موضوع فرصتی برای مطالعه کاربرد ساده‌ای از خواص تکانه زاویه‌ای مداری L_z به دست می‌دهد، چون همان‌طور که خواهیم دید حالت‌های مانای چنین نوسانگری را می‌توان برحسب مقادیر ممکن مشاهده پذیر L_z دسته‌بندی کرد. به علاوه، نتایج به دست آمده در مکمل بعدی، مفید خواهند بود.

۱. مقدمه

الف) مروری بر مسئله کلاسیک

یک ذره فیزیکی همیشه در فضای سه‌بعدی حرکت می‌کند. اما، اگر انرژی پتانسیل آن فقط به x و y بستگی داشته باشد، مسئله را می‌توان در دو بُعد بررسی کرد. در اینجا فرض می‌کنیم که این

انرژی پتانسیل را بتوان به صورت زیر نوشت

$$V(x, y) = \frac{\mu}{\gamma} \omega^2 (x^2 + y^2) \quad (1)$$

که μ جرم ذره و ω یک ثابت است. پس هامیلتونی کلاسیک دستگاه عبارت است از

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{xy} + \mathcal{H}_z \quad (2)$$

با

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{xy} &= \frac{1}{\gamma \mu} (p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{\gamma} \mu \omega^2 (x^2 + y^2) \\ \mathcal{H}_z &= \frac{1}{\gamma \mu} p_z^2 \end{aligned} \quad (3)$$

که p_x, p_y, p_z سه مؤلفه تکانه \mathbf{p} ذره هستند. \mathcal{H}_{xy} هامیلتونی نوسانگر هماهنگ دوبعدی است. از معادلات حرکت می توان به سهولت انتگرال گرفت و به دست آورد

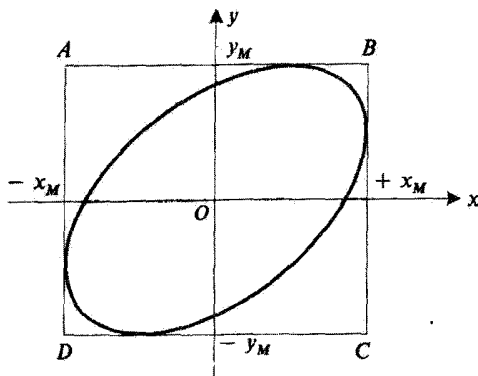
$$\begin{cases} p_z(t) = p_0 \\ z(t) = \frac{p_0}{\mu} t + z_0 \end{cases} \quad (4)$$

$$\begin{cases} x(t) = x_M \cos(\omega t - \varphi_x) \\ p_x(t) = -\mu \omega x_M \sin(\omega t - \varphi_x) \end{cases} \quad (5)$$

$$\begin{cases} y(t) = y_M \cos(\omega t - \varphi_y) \\ p_y(t) = -\mu \omega y_M \sin(\omega t - \varphi_y) \end{cases} \quad (6)$$

که $p_0, z_0, x_M, \varphi_x, y_M, \varphi_y$ ثابتهایی هستند که به شرایط اولیه بستگی دارند (فرض می کنیم x_M و y_M مثبت باشند).

ملاحظه می کنیم که تصویر ذره روی Oz حرکت یکنواختی را با سرعت p_0/μ توصیف می کند. تصویر روی صفحه xOy یک بیضی را توصیف می کند که در مستطیل $ABCD$ از



شکل ۱ تصویر مسیر کلاسیک یک ذره واقع در بتانسیل هماهنگ دویعدی روی صفحه xOy یک بیضی به دست می‌آوریم که در مستطیل $ABCD$ محاط شده است.

شکل ۱ محاط شده است. جهتی که ذره روی این بیضی می‌گیرد بستگی به اختلاف فاز $\varphi_y - \varphi_x$ دارد. وقتی $\varphi_y - \varphi_x = \pm\pi$ بیضی به خط AC تبدیل می‌شود. اگر $\varphi_y - \varphi_x$ بین $-\pi$ و 0 باشد ذره در جهت ساعتگرد روی بیضی حرکت می‌کند (حرکت "چپگرد")، و محورهای بیضی، به ازای $\varphi_y - \varphi_x = -\pi/2$ موازی Ox و Oy است. وقتی $\varphi_y - \varphi_x = 0$ ، بیضی به خط BD تبدیل می‌شود. بالاخره وقتی $\varphi_y - \varphi_x$ بین 0 و π است، ذره روی بیضی در خلاف جهت ساعتگرد حرکت می‌کند (حرکت "راستگرد")، با محورهای موازی با Ox و Oy به ازای $\varphi_y - \varphi_x = +\pi/2$. توجه کنید که به ازای $\varphi_y - \varphi_x = \pm\pi/2$ و $x_M = y_M$ بیضی به دایره تبدیل می‌شود.

به سهولت می‌توان چند ثابت حرکت مربوط به تصویر حرکت روی صفحه xOy را تعیین کرد:

— انرژی کل \mathcal{H}_{xy} ، که، برطبق (۳)، (۵)، و (۶) برابر است با

$$\mathcal{H}_{xy} = \frac{1}{4} \mu \omega^2 (x_M^2 + y_M^2) \quad (۷)$$

— انرژی‌های مربوط به تصاویر حرکت روی Ox و Oy —

$$\mathcal{H}_x = \frac{1}{4} \mu \omega^2 x_M^2 \quad (\text{الف } ۸)$$

$$\mathcal{H}_y = \frac{1}{4} \mu \omega^2 y_M^2 \quad (\text{ب } ۸)$$

— مؤلفهٔ نکانهٔ زاویه‌ای \mathcal{L}_z ذره در امتداد Oz

$$\mathcal{L}_z = xp_y - yp_x \quad (۹)$$

که برطبق (۵) و (۶)، برابر است با

$$\mathcal{L}_z = \mu\omega x_M y_M \sin(\varphi_y - \varphi_x) \quad (۱۰)$$

ملاحظه می‌شود که \mathcal{L}_z مثبت است اگر حرکت پاد ساعتگرد ($0 < \varphi_y - \varphi_x < \pi$) باشد و منفی است اگر ساعتگرد ($-\pi < \varphi_y - \varphi_x < 0$) باشد. برای دو حرکت راستخط $\varphi_y - \varphi_x = \pm\pi$ و $\varphi_y - \varphi_x = 0$ ، \mathcal{L}_z صفر است. بالاخره، برای حرکتی با یک انرژی معین، یعنی برای یک مقدار ثابت $x_M^2 + y_M^2$ مطابق با (۷)، $|\mathcal{L}_z|$ به‌ازای $\varphi_y - \varphi_x = \pm\pi/2$ ماکزیموم است و حاصلضرب $x_M y_M$ ماکزیموم است که ایجاب می‌کند $x_M = y_M$. از تمام حرکتها در یک انرژی معین، حرکت پادساعتگرد (ساعتگرد) متناظر با ماکزیموم (مینیموم) مقدار جبری \mathcal{L}_z است.

ب) مسئله در مکانیک کوانتومی

قواعد کوانتش فصل سوم به‌ما امکان می‌دهد که H ، H_{xy} و H_x را از \mathcal{H} ، \mathcal{H}_{xy} و \mathcal{H} به‌دست آوریم. حالت‌های مانای (φ) ذره عبارت‌اند از

$$H|\varphi\rangle = (H_{xy} + H_x)|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle \quad (۱۱)$$

با

$$H_{xy} = \frac{P_x^2 + P_y^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2(X^2 + Y^2) \quad (۱۲الف)$$

$$H_x = \frac{P_x^2}{2\mu} \quad (۱۲ب)$$

برطبق نتایج مکمل F۱ فصل یک، می‌دانیم که می‌توانیم یک پایه از ویژه‌حالت‌های H مرکب از بردارهایی به‌صورت زیر انتخاب کنیم

$$|\varphi\rangle = |\varphi_{xy}\rangle \otimes |\varphi_z\rangle \quad (۱۳)$$

که $\langle \varphi_{xy} |$ ویژه‌بردار H_{xy} در فضای حالت \mathcal{E}_{xy} وابسته به متغیرهای x و y است

$$H_{xy} | \varphi_{xy} \rangle = E_{xy} | \varphi_{xy} \rangle \quad (14)$$

و $\langle \varphi_z |$ ویژه‌بردار H_z در فضای \mathcal{E}_z وابسته به متغیر z است

$$H_z | \varphi_z \rangle = E_z | \varphi_z \rangle \quad (15)$$

پس انرژی کل وابسته به حالت (۱۳) عبارت است از

$$E = E_{xy} + E_z \quad (16)$$

اکنون، معادله (۱۵)، که در واقع حالت‌های مانای یک ذره آزاد را در مسئله یک‌بعدی توصیف می‌کند را می‌توان سریعاً حل کرد

$$\langle z | \varphi_z \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip_z z / \hbar} \quad (17)$$

که p_z یک ثابت حقیقی اختیاری است، با

$$E_z = \frac{p_z^2}{2\mu} \quad (18)$$

در نتیجه مسئله به تعیین جوابهای معادله (۱۴)، یعنی به انرژیها و حالت‌های مانای نوسانگر هماهنگ دوبعدی تبدیل می‌شود. این مسئله‌ای است که اکنون می‌خواهیم آن را حل کنیم.

خواهیم دید که ویژه‌مقادیر E_{xy} مربوط به H_{xy} واگن هستند: H_{xy} به‌تنهایی یک مجموعه کامل از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جایی‌پذیر در \mathcal{E}_{xy} تشکیل نمی‌دهد. بنابراین باید یک یا چند مشاهده‌پذیر به H_{xy} اضافه کنیم تا یک مجموعه کامل از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جایی‌پذیر ساخته شود. در واقع، در مکانیک کوانتومی همان ثابتهای حرکت در مکانیک کلاسیک را پیدا می‌کنیم: H_x و H_y انرژیهای تصویر حرکت روی Ox و Oy هستند؛ و L_z مؤلفه تکانه زاویه‌ای مدار L در امتداد Oz است. چون L_z نه با H_x جابه‌جایی‌پذیر است و نه با H_z ، خواهیم دید که یک مجموعه کامل مشاهده‌پذیر جابه‌جایی‌پذیر می‌تواند از H_{xy} ، H_x ، و H_y (بخش ۲) یا از H_{xy} و L_z (بخش ۳) تشکیل شود.

یادداشت:

۱. فرمول (۱۸) نشان می‌دهد که ویژه‌مقادیر E_z از H_z در فضای \mathcal{E}_z واگن مرتبه دو هستند. به علاوه، واگنی در $\mathcal{E}_z = \mathcal{E}_{xy} \otimes \mathcal{E}_z$ مربوط به ویژه‌مقادیر (۱۶) از هامیلتونی کل H تنها ناشی از واگنی E_{xy} در \mathcal{E}_{xy} و E_z در \mathcal{E}_z نیست: دو ویژه‌بردار H به صورت (۱۳) می‌توانند یک انرژی کل E داشته باشند بدون آنکه مقادیر E_{xy} (و E_z) متناظر آنها مساوی باشند.

۲. H با مؤلفه L_z از \mathbf{L} جابه‌جاپذیر است ولی با L_x و L_y جابه‌جاپذیر نیست. واقعیت آن است که انرژی پتانسیل (۱) فقط حول Oz ناوردای دورانی است. به علاوه، از سه عملگر L_x ، L_y و L_z فقط یکی، یعنی L_z ، فقط در \mathcal{E}_{xy} عمل می‌کند. بنابراین، در مطالعه نوسانگر هماهنگ دوبعدی فقط مشاهده‌پذیر L_z را به کار می‌بریم. در مکمل ۲ فصل ۷، نوسانگر هماهنگ همسانگرد سه‌بعدی را مطالعه خواهیم کرد، که انرژی پتانسیل آن نسبت به هر دوران حول محوری که از مبدأ می‌گذرد ناورداست؛ از این رو خواهیم دید تمام مؤلفه‌های \mathbf{L} با هامیلتونی جابه‌جاپذیر است. ■

۲. دسته‌بندی حالت‌های مانا با اعداد کوانتومی n_x و n_y

الف) انرژیها؛ حالت‌های مانا

برای به دست آوردن جواب‌های معادله ویژه مقدار (۱۴)، توجه کنید که H_{xy} را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$H_{xy} = H_x + H_y \quad (۱۹)$$

که H_x و H_y هامیلتونی نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی هستند:

$$\begin{aligned} H_x &= \frac{P_x^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 X^2 \\ H_y &= \frac{P_y^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 Y^2 \end{aligned} \quad (۲۰)$$

ویژه‌حالت‌های $|\varphi_{n_x}\rangle$ از H_x در \mathcal{E}_x و ویژه‌حالت‌های $|\varphi_{n_y}\rangle$ از H_y و \mathcal{E}_y را می‌شناسیم. انرژیهای آنها، به ترتیب عبارت‌اند از $E_x = (n_x + 1/2)\hbar\omega$ و $E_y = (n_y + 1/2)\hbar\omega$ (که n_x و n_y اعداد صحیح مثبت یا صفرند). پس ویژه‌حالت‌های H_{xy} را می‌توان به صورت زیر انتخاب کرد

$$|\varphi_{n_x, n_y}\rangle = |\varphi_{n_x}\rangle \otimes |\varphi_{n_y}\rangle \quad (۲۱)$$

که انرژی متناظر E_{xy} با معادله زیر داده می‌شود

$$\begin{aligned} E_{xy} &= \left(n_x + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega + \left(n_y + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \\ &= (n_x + n_y + 1) \hbar\omega \end{aligned} \quad (22)$$

برطبق خواص نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی، E_x ، در \mathcal{E}_x و E_y در \mathcal{E}_y ناواکن است. در نتیجه، بردار (φ_{n_x, n_y}) از \mathcal{E}_{xy} که با تقریب یک ضریب ثابت یکتاست متناظر با یک جفت $\{n_x, n_y\}$ است: H_x و H_y یک مجموعه کامل مشاهده‌پذیر جابه‌جایی‌پذیر را در \mathcal{E}_{xy} تشکیل می‌دهند. معلوم می‌شود که راحت‌تر است از عملگرهای a_x و a_y (عملگرهای نابودی یک کوانتوم به ترتیب نسبت به Ox و Oy)، که به صورت زیر تعریف می‌شوند، استفاده شود

$$\begin{aligned} a_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\beta X + i \frac{P_x}{\beta \hbar} \right) \\ a_y &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\beta Y + i \frac{P_y}{\beta \hbar} \right) \end{aligned} \quad (23)$$

با

$$\beta = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}} \quad (24)$$

چون a_x و a_y در فضاهای مختلف \mathcal{E}_x و \mathcal{E}_y عمل می‌کنند، تنها جابه‌جاگرهای غیرصفر بین چهار عملگر a_x ، a_y ، a_x^\dagger و a_y^\dagger عبارت‌اند از

$$[a_x, a_x^\dagger] = [a_y, a_y^\dagger] = 1 \quad (25)$$

عملگر N_x (تعداد کوانتومها نسبت به محور Ox) و N_y (تعداد کوانتومها نسبت به محور Oy) با روابط زیر داده می‌شوند

$$\begin{aligned} N_x &= a_x^\dagger a_x \\ N_y &= a_y^\dagger a_y \end{aligned} \quad (26)$$

که می‌توانیم H_{xy} را به صورت زیر بنویسیم

$$H_{xy} = H_x + H_y = (N_x + N_y + 1) \hbar\omega \quad (27)$$

روشن است که

$$\begin{aligned} N_x | \varphi_{n_x, n_y} \rangle &= n_x | \varphi_{n_x, n_y} \rangle \\ N_y | \varphi_{n_x, n_y} \rangle &= n_y | \varphi_{n_x, n_y} \rangle \end{aligned} \quad (28)$$

حالت پایه $|\varphi_{\cdot, \cdot}\rangle$ با رابطه زیر مشخص می‌شود

$$|\varphi_{\cdot, \cdot}\rangle = |\varphi_{n_x=0}\rangle \otimes |\varphi_{n_y=0}\rangle \quad (29)$$

حالت $|\varphi_{n_x, n_y}\rangle$ که با (۲۱) تعریف می‌شود با اعمال متوالی عملگرهای a_x^\dagger و a_y^\dagger روی $|\varphi_{\cdot, \cdot}\rangle$ به دست می‌آید

$$|\varphi_{n_x, n_y}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_x! n_y!}} (a_x^\dagger)^{n_x} (a_y^\dagger)^{n_y} |\varphi_{\cdot, \cdot}\rangle \quad (30)$$

تابع موج متناظر عبارت است از حاصلضرب $\varphi_{n_x}(x)$ و $\varphi_{n_y}(y)$ [مکمل ۲ فصل ۵، فرمول (۳۵)]:

$$\varphi_{n_x, n_y}(x, y) = \frac{\beta}{\sqrt{\pi(2)^{n_x+n_y} (n_x!) (n_y!)}} e^{-\beta^2(x^2+y^2)/2} H_{n_x}(\beta x) H_{n_y}(\beta y) \quad (31)$$

ب) H_{xy} تشکیل یک مجموعه کامل از مشاهده پذیرهای جابه جایی پذیر را در \mathcal{E}_{xy} نمی‌دهد از رابطه (۲۲) ملاحظه می‌شود که ویژه مقادیر H_{xy} به شکل زیرند

$$E_{xy} = E_n = (n+1)\hbar\omega \quad (32)$$

که

$$n = n_x + n_y \quad (33)$$

یک عدد صحیح مثبت یا صفر است. به هر مقدار انرژی ویژه بردارهای متعامد متعددی وابسته است

$$|\varphi_{n_x=n, n_y=0}\rangle, |\varphi_{n_x=n-1, n_y=1}\rangle, \dots, |\varphi_{n_x=0, n_y=n}\rangle \quad (34)$$

چون $(n+1)$ تا از این بردارها وجود دارند، ویژه مقدار E_n واگن مرتبه $(n+1)$ در \mathcal{E}_{xy} است. پس H_{xy} به تنهایی تشکیل یک مجموعه کامل مشاهده پذیرهای جابه جایی پذیر نمی دهد. از طرف دیگر، دیدیم که $\{H_x, H_y\}$ یک مجموعه کامل از مشاهده پذیرهای جابه جایی پذیر است؛ این امر به وضوح در موارد $\{H_{xy}, H_x\}$ و $\{H_{xy}, H_y\}$ نیز صادق است.

۳. دسته بندی حالت‌های مانا بر حسب تکانه‌های زاویه‌ای آنها

الف) مفهوم و خواص عملگر L_z

در بخش قبل، حالت‌های مانا را با اعداد کوانتومی n_x و n_y مشخص کردیم. اما محورهای Ox و Oy در این مسئله از جایگاه ممتازی برخوردار نیستند. چون اثری پتانسیل تحت دوران حول Oz ناورداست، می توانیم همچنین دستگاه دیگری از محورهای متعامد Ox' و Oy' را در صفحه xOy انتخاب کنیم؛ در این صورت ممکن است حالت‌های مانایی متفاوت از حالت‌های قبلی به دست آیند.

بنابراین، به منظور استفاده بهتری از تقارن مسئله، مؤلفه L_z تکانه زاویه‌ای را در نظر می گیریم که با رابطه زیر تعریف می شود

$$L_z = XP_y - YP_x \quad (35)$$

با بیان X و P_x بر حسب a_x, a_x^\dagger و Y و P_y بر حسب a_y, a_y^\dagger داریم

$$L_z = i\hbar(a_x a_y^\dagger - a_x^\dagger a_y) \quad (36)$$

اکنون، بیان H_{xy} بر حسب همان عملگرها عبارت است از

$$H_{xy} = (a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y + 1)\hbar\omega \quad (37)$$

چون

$$[a_x a_y^\dagger, a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y] = a_x a_y^\dagger - a_x^\dagger a_y = 0$$

(۳۸)

$$[a_x^\dagger a_y, a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y] = -a_x^\dagger a_y + a_x^\dagger a_y = 0$$

درمی‌یابیم که

$$[H_{xy}, L_z] = 0 \quad (39)$$

بنابراین باید دنبال پایه‌ای از ویژه‌دارهای مشترک H_{xy} و L_z بگردیم.

ب) کوانتومهای دایره‌ای راست و چپ

عملگرهای a_d و a_g را به صورت زیر تعریف می‌کنیم^۱

$$\begin{aligned} a_d &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x - ia_y) \\ a_g &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x + ia_y) \end{aligned} \quad (40)$$

از این تعریف ملاحظه می‌شود که عمل a_d (یا a_g) روی $|\varphi_{n_x, n_y}\rangle$ حالتی را می‌دهد که یک ترکیب خطی از $|\varphi_{n_x-1, n_y}\rangle$ و $|\varphi_{n_x, n_y-1}\rangle$ است. یعنی، حالت مانایی که انرژی آن به اندازه یک کوانتوم $\hbar\omega$ کمتر است. همین‌طور عمل a_d^\dagger (یا a_g^\dagger) روی $|\varphi_{n_x, n_y}\rangle$ حالت مانای دیگری می‌دهد که دارای یک کوانتوم انرژی بیشتر است. در واقع، خواهیم دید که a_d (یا a_g) مشابه a_x (یا a_y) است، و اینکه a_d و a_g را می‌توان به ترتیب به عنوان عملگرهای نابودی کوانتوم دایره‌ای راست و چپ تعبیر کرد. اول از همه، با استفاده از (۴۰) و (۲۵) به سادگی می‌توان بررسی کرد که تنها جابه‌جاگرهای مخالف صفر بین چهار عملگر $a_d, a_g, a_d^\dagger, a_g^\dagger$ عبارت‌اند از

$$[a_d, a_d^\dagger] = [a_g, a_g^\dagger] = 1 \quad (41)$$

این روابط در واقع مشابه (۲۵) هستند. به علاوه، H_{xy} را می‌توان برحسب این عملگرها، به طریقی شبیه به (۳۷) نوشت؛ چون

$$\begin{aligned} a_d^\dagger a_d &= \frac{1}{2}(a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y - ia_x^\dagger a_y + ia_x a_y^\dagger) \\ a_g^\dagger a_g &= \frac{1}{2}(a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y + ia_x^\dagger a_y - ia_x a_y^\dagger) \end{aligned} \quad (42)$$

داریم

$$H_{xy} = (a_d^\dagger a_d + a_g^\dagger a_g + 1)\hbar\omega \quad (43)$$

۱. زیرنویسهای d و g از حرف اول کلمات فرانسوی *droit* (راست) و *gauche* (چپ) است. م.م.

به‌علاوه، با استفاده از (۳۶) ملاحظه می‌کنیم که

$$L_z = \hbar(a_d^\dagger a_d - a_g^\dagger a_g) \quad (۴۴)$$

اگر عملگرهای N_d و N_g (تعداد "کوانتومهای دایره‌ای" راست و چپ) را معرفی کنیم

$$N_d = a_d^\dagger a_d \quad (۴۵)$$

$$N_g = a_g^\dagger a_g$$

فرمولهای (۴۳) و (۴۴) به‌صورت زیر درمی‌آیند

$$H_{xy} = (N_d + N_g + 1)\hbar\omega \quad (۴۶)$$

$$L_z = \hbar(N_d - N_g)$$

بنابراین، درحالی‌که H را به‌همان صورت ساده (۲۷) نگه می‌داریم، صورت L_z را ساده کرده‌ایم.

ج) حالت‌های مانای با تکانه زاویه‌ای کاملاً معین

با استفاده از عملگرهای a_d و a_g ، اکنون می‌توانیم همان استدلال را که برای a_x و a_y به‌کار بردیم دنبال کنیم. نتیجه می‌شود که طیفهای N_d و N_g از تمام اعداد صحیح مثبت و صفر تشکیل یافته‌اند. به‌علاوه، مشخص‌کردن یک جفت $\{n_d, n_g\}$ از این اعداد صحیح ویژه‌بردار مشترک در N_d و N_g ، وابسته به این ویژه‌مقادیر را به‌طور یکتا (با تقریب یک ضریب ثابت) تعیین می‌کند، که به‌صورت زیر نوشته می‌شود

$$|\chi_{n_d, n_g}\rangle = \frac{1}{\sqrt{(n_d)!(n_g)!}} (a_d^\dagger)^{n_d} (a_g^\dagger)^{n_g} |\varphi_{0,0}\rangle \quad (۴۷)$$

بنابراین N_d و N_g تشکیل یک مجموعه کامل مشاهده‌پذیر جابه‌جایی‌پذیر در \mathcal{E}_{xy} می‌دهند. بدین ترتیب، با استفاده از (۴۶)، ملاحظه می‌کنیم که $|\chi_{n_d, n_g}\rangle$ نیز ویژه‌بردار H_{xy} و L_z ، با ویژه‌مقادیر $(n+1)\hbar\omega$ و $m\hbar$ است که n و m با روابط زیر داده می‌شوند

$$n = n_d + n_g \quad (۴۸)$$

$$m = n_d - n_g$$

از معادلات (۴۸) می‌توان به‌وجه تسمیه "کوانتومهای دایره‌ای" راست یا چپ پی برد. اثر عملگر a_d^\dagger روی $|\chi_{n_d, n_g}\rangle$ حالتی را با یک کوانتوم بیشتر می‌دهد، که چون m یکی بیشتر شده است، باید به آن یک تکانه زاویه‌ای اضافی $+\hbar$ نسبت داده شود (این متناظر با دورانی پادساعتگرد حول Oz است). همچنین، a_g^\dagger حالتی با یک کوانتوم بیشتر یا تکانه زاویه‌ای $-\hbar$ (دوران ساعتگرد) می‌دهد.

چون n_g و n_d اعداد صحیح مثبت (یا صفر) اند، نتایج ما با نتایج فصل قبل سازگار است: ویژه‌مقادیر H_{xy} به شکل $(n+1)\hbar\omega$ هستند، که n عدد صحیح مثبت یا صفر است؛ مرتبه واگنی آنها $(n+1)$ است زیرا، به‌ارزی یک n ثابت، می‌توان نوشت

$$n_d = n \quad ; \quad n_g = 0$$

$$n_d = n - 1 \quad ; \quad n_g = 1$$

$$\vdots$$

$$n_d = 0 \quad ; \quad n_g = n$$

(۴۹)

به‌علاوه، ملاحظه می‌کنیم که ویژه‌مقادیر L_z به شکل $m\hbar$ هستند، که m یک عدد صحیح مثبت یا منفی یا صفر است، که نتیجه‌ای است که برای مورد عمومی در فصل ۶ به‌دست آمد. به‌علاوه، جدول (۴۹) نشان می‌دهد چه مقادیری از m به یک مقدار معین n وابسته است. مثلاً برای حالت پایه، داریم $n_d = n_g = 0$ و بنابراین لزوماً $m = 0$ ؛ برای اولین حالت برانگیخته می‌توانیم داشته باشیم $n_d = 1$ و $n_g = 0$ یا $n_d = 0$ و $n_g = 1$ که می‌دهد $m = +1$ یا $m = -1$. به‌طور کلی فرمولهای (۴۸) و (۴۹) نشان می‌دهند که، برای یک تراز انرژی معین $(n+1)\hbar\omega$ ، مقادیر ممکن m عبارت‌اند از

$$m = n, n-2, n-4, \dots, -n+2, -n \quad (50)$$

نتیجه می‌شود که، به یک جفت از n و m ، یک بردار منفرد (با تقریب یک ضریب ثابت) متناظر

$$|\chi_{n_d = \frac{n+m}{2}, n_g = \frac{n-m}{2}}\rangle$$

است. بنابراین H و L_z تشکیل یک مجموعه کامل مشاهده‌پذیر جابه‌جایی‌پذیر در \mathcal{E}_{xy} می‌دهند.

یادداشت:

پس برای یک مقدار معین از انرژی کل (با شاخص n)، حالت‌های $\chi_{n_d=n, n_g=0}$ و $\chi_{n_d=0, n_g=n}$ متناظر با مقادیر ماکزیموم $(n\hbar)$ و مینیموم $(-n\hbar)$ از L_z هستند. در نتیجه این حالتها متناظر با حرکت‌های کلاسیک دایره‌ای راست و چپ وابسته به یک مقدار معین انرژی کل هستند، که برای آن L_z مقادیر ماکزیموم و مینیموم خود را می‌گیرد (بخش ۱-الف). ■

(د) تابع موجهای وابسته به ویژه حالت‌های مشترک H_{xy} و L_z

برای حفظ تقارن مسئله نسبت به دوران حول Oz ، از مختصات قطبی استفاده خواهیم کرد

$$\begin{aligned} x &= \rho \cos \varphi & \rho &\geq 0 \\ y &= \rho \sin \varphi & 0 &\leq \varphi < 2\pi \end{aligned} \quad (51)$$

اکنون ببینیم اثر عملگرهای a_d و a_g روی تابعی از ρ و φ چیست؟ ابتدا اثر آنها را روی تابعی از x و y تعیین می‌کنیم. با معلوم بودن اثر X و P_x و در نتیجه اثر a_x (وجه تشابه، اثر a_y)، می‌توان (۴۰) را به کار برد، که می‌دهد

$$a_d \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\beta(x - iy) + \frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \right] \quad (52)$$

پس بر طبق قواعد مشتق‌گیری از توابع چندمتغیره، به دست می‌آوریم

$$a_d \Rightarrow \frac{e^{-i\varphi}}{\sqrt{2}} \left[\beta\rho + \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{i}{\beta\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \quad (53)$$

همین‌طور

$$a_d^\dagger \Rightarrow \frac{e^{i\varphi}}{\sqrt{2}} \left[\beta\rho - \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{i}{\beta\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \quad (54)$$

و

$$\begin{aligned} a_g &\Rightarrow \frac{e^{i\varphi}}{\sqrt{2}} \left[\beta\rho + \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\beta\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \\ a_g^\dagger &\Rightarrow \frac{e^{-i\varphi}}{\sqrt{2}} \left[\beta\rho - \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\beta\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \end{aligned} \quad (55)$$

برای محاسبه تابع موجهای $\chi_{n_d, n_g}(\rho, \varphi)$ کافی است عملگرهای دیفرانسیلی معرف a_d^\dagger و a_g^\dagger را بر تابع $\chi_{0,0}(\rho, \varphi)$ اثر دهیم، که بر طبق (۳۱)، عبارت‌است از

$$\chi_{0,0}(\rho, \varphi) = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} e^{-\beta^2 \rho^2 / 2} \quad (56)$$

اما از (۵۴) و (۵۵) دیده می‌شود که از عمل a_d^\dagger (یا a_g^\dagger) روی تابعی به صورت $e^{im\varphi} F(\rho)$ داریم

$$\begin{aligned} a_d^\dagger [e^{im\varphi} F(\rho)] &= \frac{e^{i(m+1)\varphi}}{2} \left[\left(\beta\rho + \frac{m}{\beta\rho} \right) F(\rho) - \frac{1}{\beta} \frac{dF}{d\rho} \right] \\ a_g^\dagger [e^{im\varphi} F(\rho)] &= \frac{e^{i(m-1)\varphi}}{2} \left[\left(\beta\rho - \frac{m}{\beta\rho} \right) F(\rho) - \frac{1}{\beta} \frac{dF}{d\rho} \right] \end{aligned} \quad (57)$$

با اعمال مکرر این روابط بر (۵۶) ملاحظه می‌شود که بستگی φ ی $\chi_{n_d, n_g}(\rho, \varphi)$ صرفاً عبارت است از $e^{i(n_d - n_g)\varphi}$. این یک نتیجه عمومی است که از این فصل به دست آمده است: بستگی φ ویژه تابع L_z مربوط به ویژه مقدار $m\hbar$ عبارت است از $e^{im\varphi}$.

اگر در (۵۷) قرار دهیم $F(\rho) = \rho^m e^{-\beta^2 \rho^2 / 2}$ ، آنگاه

$$a_d^\dagger [e^{im\varphi} \rho^m e^{-\beta^2 \rho^2 / 2}] = \beta e^{i(m+1)\varphi} \rho^{m+1} e^{-\beta^2 \rho^2 / 2} \quad (58)$$

با اتردادن n_d بار عملگر a_d^\dagger بر تابع $\chi_{0,0}(\rho)$ به دست می‌آوریم

$$\chi_{n_d, 0}(\rho, \varphi) = \frac{\beta}{\sqrt{\pi(n_d)!}} e^{in_d \varphi} (\beta\rho)^{n_d} e^{-\beta^2 \rho^2 / 2} \quad (59)$$

با محاسبه مشابهی داریم

$$\chi_{0, n_g}(\rho, \varphi) = \frac{\beta}{\sqrt{\pi(n_g)!}} e^{-in_g \varphi} (\beta\rho)^{n_g} e^{-\beta^2 \rho^2 / 2} \quad (60)$$

این تابع موجها بهنجار شده هستند. برای یک تراز معین انرژی $(n+1)\hbar\omega$ ، تابع موجهای (۵۹) و (۶۰) متناظر با مقادیر حدی $+n$ و $-n$ عدد کوانتومی m اند. بستگی ρ آنها به ویژه ساده است: قدرمطلق آنها به ازای $\rho = \sqrt{n}/\beta$ به ماکزیموم می‌رسد. بنابراین (به مانند مورد نوسانگر هماهنگ یک بعدی)، گسترش فضایی این تابع موجها با انرژی $(n+1)\hbar\omega$ که با آن وابسته هستند افزایش می‌یابد.

به همین طریق، اعمال عملگرهای a_d^\dagger (یا a_g^\dagger) روی (۵۹) و (۶۰) امکان می‌دهد توابع $\chi_{n_d, n_g}(\rho, \varphi)$ را به ازای هر n_d و n_g بسازیم. نتایج به دست آمده برای اولین ترازهای برانگیخته در جدول ۱ داده شده است.

یادداشت:

توابع $\chi_{n_d, 0}(\rho, \varphi)$ در (۵۹) متناسب با $e^{-\beta^2 \rho^2 / 2} (\beta\rho e^{i\varphi})^{n_d}$ هستند. به طور عمومیتر، تمام ترکیبات خطی آنها به شکل زیرند

$$F(\rho, \varphi) = e^{-\beta^2 \rho^2 / 2} f(\beta\rho e^{i\varphi}) \quad (61)$$

جدول ۱ ویژه‌تابع‌های مشترک هامیلتونی H_{xy} و مشاهده‌پذیر L_z ، برای اولین ترازهای نوسانگر هماهنگ دوبعدی.

$n = 0$	$m = 0$	$\chi_{0,0}(\rho) = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} e^{-\beta^2 \rho^2 / 2}$
$n = 1$	$m = 1$	$\chi_{1,0}(\rho, \varphi) = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} \beta \rho e^{-\beta^2 \rho^2 / 2} e^{i\varphi}$
	$m = -1$	$\chi_{0,1}(\rho, \varphi) = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} \beta \rho e^{-\beta^2 \rho^2 / 2} e^{-i\varphi}$
$n = 2$	$m = 2$	$\chi_{2,0}(\rho, \varphi) = \frac{\beta}{\sqrt{2\pi}} (\beta \rho)^2 e^{-\beta^2 \rho^2 / 2} e^{2i\varphi}$
	$m = 0$	$\chi_{1,1}(\rho, \varphi) = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} [(\beta \rho)^2 - 1] e^{-\beta^2 \rho^2 / 2}$
	$m = -2$	$\chi_{0,2}(\rho, \varphi) = \frac{\beta}{\sqrt{2\pi}} (\beta \rho)^2 e^{-\beta^2 \rho^2 / 2} e^{-2i\varphi}$

(که f یک تابع اختیاری یک متغیره است) و ویژه‌تابع‌های N_g با ویژه‌مقدار صفرند. از روی (۵۵) می‌توان به‌سادگی نشان داد که

$$a_g F(\rho, \varphi) = 0 \quad (62)$$

همین‌طور، زیرفضای ویژه‌تابع‌های N_d با ویژه‌مقدار صفر، از توابعی به‌شکل زیر تشکیل می‌شود

$$G(\rho, \varphi) = e^{-\beta^2 \rho^2 / 2} g(\beta \rho e^{-i\varphi}) \quad (63)$$

۴. حالت‌های شبه‌کلاسیک

با استفاده از خواص نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی، می‌توانیم به‌سادگی تحول زمانی بردار حالت و مقادیر میانگین مشاهده‌پذیرهای مختلف نوسانگر دوبعدی را محاسبه کنیم. به‌عنوان مثال، می‌توانیم به‌آسانی نشان دهیم که در مقادیر میانگین $\langle X \rangle(t)$ و $\langle Y \rangle(t)$ ، به‌مانند $\langle P_x \rangle(t)$ و $\langle P_y \rangle(t)$ ، فقط بسامد بور ω ظاهر می‌شود. به‌علاوه، می‌توان نشان داد که این مقادیر میانگین دقیقاً از معادلات کلاسیک حرکت تبعیت می‌کنند. در این بخش، با خواص و تحول حالت‌های شبه‌کلاسیک نوسانگر هماهنگ دوبعدی سروکار داریم.

الف) تعریف حالت‌های $|\alpha_x, \alpha_y\rangle$ و $|\alpha_d, \alpha_g\rangle$

برای ساختن یک حالت شبه‌کلاسیک نوسانگر هماهنگ دوبعدی، می‌توانیم استدلال خود را پرمبنای نوسانگر یک‌بعدی قرار دهیم (مکمل ۳ فصل ۵). به‌خاطر آوردن که، در یک حالت شبه‌کلاسیک وابسته به یک حرکت کلاسیک معین، مقادیر میانگین $\langle X \rangle(t)$ و $\langle P \rangle(t)$ در هر لحظه با $x(t)$ و $p(t)$ مطابقت می‌کنند. همچنین، مقدار میانگین هامیلتونی H (با تقریب نیم کوانتوم $\hbar\omega/2$) برابر با انرژی کلاسیک است. در مکمل ۷ فصل ۵ نشان دادیم که، در هر زمان، حالت‌های شبه‌کلاسیک عبارت‌اند از ویژه‌حالت‌های عملگر نابودی a و می‌توان آنها را به‌صورت زیر نوشت

$$|\alpha\rangle = \sum_n c_n(\alpha) |\varphi_n\rangle \quad (۶۴)$$

که α ویژه‌مقدار a است، و

$$c_n(\alpha) = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-|\alpha|^2/2} \quad (۶۵)$$

درموردی که اینجا در نظر گرفته‌ایم، می‌توانیم قواعد ضرب تانسوری را به‌کار ببریم و حالت‌های شبه‌کلاسیک را به‌صورت زیر به‌دست آوریم

$$|\alpha_x, \alpha_y\rangle = |\alpha_x\rangle \otimes |\alpha_y\rangle = \sum_{n_x=0}^{\infty} \sum_{n_y=0}^{\infty} c_{n_x}(\alpha_x) c_{n_y}(\alpha_y) |\varphi_{n_x, n_y}\rangle \quad (۶۶)$$

با

$$a_x |\alpha_x, \alpha_y\rangle = \alpha_x |\alpha_x, \alpha_y\rangle \quad (۶۷)$$

$$a_y |\alpha_x, \alpha_y\rangle = \alpha_y |\alpha_x, \alpha_y\rangle$$

پس مطمئن هستیم که $\langle X \rangle$ ، $\langle P_x \rangle$ ، $\langle H_x \rangle$ ، $\langle Y \rangle$ ، $\langle P_y \rangle$ ، و $\langle H_y \rangle$ به‌همان صورت کمیات کلاسیک متناظر هستند. اکنون، با برگشت به‌تعریف (۴۰) و استفاده از (۶۷)، می‌بینیم که

$$a_d |\alpha_x, \alpha_y\rangle = \alpha_d |\alpha_x, \alpha_y\rangle \quad (۶۸)$$

$$a_g |\alpha_x, \alpha_y\rangle = \alpha_g |\alpha_x, \alpha_y\rangle$$

$$\begin{aligned}\alpha_d &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_x - i\alpha_y) \\ \alpha_g &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_x + i\alpha_y)\end{aligned}\quad (69)$$

بنابراین، حالت $|\alpha_x, \alpha_y\rangle$ نیز یک ویژه‌بردار a_d و a_g با ویژه‌مقادیر (۶۹) است. ویژه‌بردار مشترک a_d و a_g وابسته به ویژه‌مقادیر α_d و α_g را با $|\alpha_d, \alpha_g\rangle$ نمایش خواهیم داد. می‌توان به آسانی نشان داد که بسط $|\alpha_d, \alpha_g\rangle$ در پایه $\{|\chi_{n_d, n_g}\rangle\}$ همان شکل $|\alpha_x, \alpha_y\rangle$ در پایه $\{|\varphi_{n_x, n_y}\rangle\}$ را دارد

$$|\alpha_d, \alpha_g\rangle = \sum_{n_d=0}^{\infty} \sum_{n_g=0}^{\infty} c_{n_d}(\alpha_d) c_{n_g}(\alpha_g) |\chi_{n_d, n_g}\rangle \quad (70)$$

که در آن ضرایب c_n توسط (۶۵) داده می‌شوند. از (۶۸) و (۶۹) نتیجه می‌شود که

$$|\alpha_x, \alpha_y\rangle = |\alpha_d = \frac{\alpha_x - i\alpha_y}{\sqrt{2}}, \alpha_g = \frac{\alpha_x + i\alpha_y}{\sqrt{2}}\rangle \quad (71)$$

به علت خواص حالت‌های $|\alpha\rangle$ (مکمل ۳ فصل ۵، بخش ۳-الف)، ملاحظه می‌کنیم که اگر

$$|\psi(0)\rangle = |\alpha_x, \alpha_y\rangle = |\alpha_d, \alpha_g\rangle \quad (72)$$

بردار حالت در لحظه t عبارت‌است از

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle &= e^{-i\omega t} |e^{-i\omega t}\alpha_x, e^{-i\omega t}\alpha_y\rangle \\ &= e^{-i\omega t} |e^{-i\omega t}\alpha_d, e^{-i\omega t}\alpha_g\rangle\end{aligned}\quad (73)$$

(ب) مقادیر میانگین و انحرافات ریشه میانگین مربعی مشاهده‌پذیرهای مختلف قرار می‌دهیم

$$\begin{aligned}\alpha_x &= |\alpha_x| e^{i\varphi_x} \\ \alpha_y &= |\alpha_y| e^{i\varphi_y}\end{aligned}\quad (74)$$

با استفاده از فرمول (۹۳) از مکمل ۷ فصل ۵، به دست می‌آوریم

$$\begin{cases} \langle X \rangle(t) = \frac{\sqrt{\Upsilon}}{\beta} |\alpha_x| \cos(\omega t - \varphi_x) \\ \langle Y \rangle(t) = \frac{\sqrt{\Upsilon}}{\beta} |\alpha_y| \cos(\omega t - \varphi_y) \end{cases} \quad (۷۵)$$

$$\begin{cases} \langle P_x \rangle(t) = -\mu\omega \frac{\sqrt{\Upsilon}}{\beta} |\alpha_x| \sin(\omega t - \varphi_x) \\ \langle P_y \rangle(t) = -\mu\omega \frac{\sqrt{\Upsilon}}{\beta} |\alpha_y| \sin(\omega t - \varphi_y) \end{cases} \quad (۷۶)$$

از مقایسه (۷۵) و (۷۶) با (۵) و (۶)، می‌بینیم که

$$\begin{aligned} \alpha_x &= \frac{\beta x_M}{\sqrt{\Upsilon}} e^{i\varphi_x} \\ \alpha_y &= \frac{\beta y_M}{\sqrt{\Upsilon}} e^{i\varphi_y} \end{aligned} \quad (۷۷)$$

که x_M ، φ_x ، y_M و φ_y پارامترهای تعیین‌کننده حرکت کلاسیکی هستند که حالت $|\alpha_x, \alpha_y\rangle$ را به بهترین وجه مجدداً بازسازی می‌کند.

همچنین

$$\begin{aligned} \langle N_x \rangle &= |\alpha_x|^2 \\ \langle N_y \rangle &= |\alpha_y|^2 \end{aligned} \quad (۷۸)$$

و

$$\begin{aligned} \langle N_d \rangle &= |\alpha_d|^2 = \frac{1}{\Upsilon} [|\alpha_x|^2 + |\alpha_y|^2 + i(\alpha_x \alpha_y^* - \alpha_x^* \alpha_y)] \\ \langle N_g \rangle &= |\alpha_g|^2 = \frac{1}{\Upsilon} [|\alpha_x|^2 + |\alpha_y|^2 - i(\alpha_x \alpha_y^* - \alpha_x^* \alpha_y)] \end{aligned} \quad (۷۹)$$

یعنی، برطبق (۴۶) داریم

$$\langle H_{xy} \rangle = \hbar\omega (|\alpha_x|^2 + |\alpha_y|^2 + 1) = \hbar\omega (|\alpha_d|^2 + |\alpha_g|^2 + 1) \quad (۸۰)$$

$$\langle L_z \rangle = 2\hbar |\alpha_x| |\alpha_y| \sin(\varphi_y - \varphi_x) = \hbar(|\alpha_d|^2 - |\alpha_g|^2) \quad (۸۱)$$

برطبق (۷۷)، همان مقدار کلاسیک \mathcal{L}_z است [فرمول (۱۰)]. اکنون انحرافات ریشه میانگین مربعی مکان و تکانه و سپس انرژی و تکانه زاویه‌ای در حالت (α_x, α_y) را در نظر می‌گیریم. از کاربرد مستقیم نتایج مکمل ۷ فصل ۵، بدست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \Delta X = \Delta Y &= \frac{1}{\beta\sqrt{2}} \\ \Delta P_x = \Delta P_y &= \frac{\mu\omega}{\beta\sqrt{2}} \end{aligned} \quad (۸۲)$$

انحرافات ریشه میانگین مربعی مکان و تکانه مستقل از α_x و α_y هستند: اگر $|\alpha_x|$ و $|\alpha_y|$ بسیار بزرگتر از ۱ باشند، مکان و تکانه نوسانگر دارای گسترش بسیار کوچکی حول $\langle X \rangle$ و $\langle Y \rangle$ و $\langle P_x \rangle$ و $\langle P_y \rangle$ هستند.

دست آخر، انحرافات ریشه میانگین مربعی ΔH_{xy} برای انرژی و ΔL_z برای تکانه زاویه‌ای را محاسبه می‌کنیم. به‌مانند مکمل ۷ فصل ۵ داریم

$$\begin{aligned} \Delta N_x &= |\alpha_x| \\ \Delta N_y &= |\alpha_y| \\ \Delta N_d &= |\alpha_d| \\ \Delta N_g &= |\alpha_g| \end{aligned} \quad (۸۳)$$

اما هامیلتونی H_{xy} شامل $N = N_x + N_y$ است، و L_z متناسب با $N_d - N_g$ است. اکنون باید، به‌عنوان مثال، مقدار زیر را محاسبه کنیم

$$\begin{aligned} (\Delta N)^2 &= \langle (N_x + N_y)^2 \rangle - \langle (N_x + N_y) \rangle^2 \\ &= (\Delta N_x)^2 + (\Delta N_y)^2 + 2[\langle N_x N_y \rangle - \langle N_x \rangle \langle N_y \rangle] \end{aligned} \quad (۸۴)$$

برطبق (۶۶)، حالت دست‌گام یک حاصلضرب تانسوری است، یعنی مشاهده‌پذیرهای N_y و N_x

یا هم در ارتباط نیستند

$$\langle N_x N_y \rangle = \langle N_x \rangle \langle N_y \rangle \quad (۸۵)$$

نتیجه می شود که

$$(\Delta N)^2 = (\Delta N_x)^2 + (\Delta N_y)^2 \quad (۸۶)$$

یعنی

$$\Delta H_{xy} = \hbar\omega\sqrt{|\alpha_x|^2 + |\alpha_y|^2} = \hbar\omega\sqrt{|\alpha_d|^2 + |\alpha_g|^2} \quad (۸۷)$$

به همین ترتیب داریم

$$\Delta L_z = \hbar\sqrt{|\alpha_d|^2 + |\alpha_g|^2} = \hbar\sqrt{|\alpha_x|^2 + |\alpha_y|^2} \quad (۸۸)$$

مکمل ۵

ذرهٔ باردار در یک میدان مغناطیسی: ترازهای لاندائو

۱. مرور مسئلهٔ کلاسیک

الف) حرکت ذره

ب) پتانسیل برداری. لاگرانژی و هامیلتونی کلاسیک

ج) ثابتهای حرکت در یک میدان یکنواخت

۲. خواص کوانتومی عمومی ذره در میدان مغناطیسی

الف) کوانتس. هامیلتونی

ب) روابط جابه‌جایی

ج) نتایج فیزیکی

۳. مورد میدان مغناطیسی یکنواخت

الف) ویژه‌مقادیر هامیلتونی

ب) مطالعهٔ مشاهده‌پذیرها در یک پیمانهٔ ویژه

ج) مطالعهٔ حالت‌های مانا

د) تحول زمانی

تاکنون، در موارد ویژهٔ متعدد، خواص ذره‌ای را بررسی کرده‌ایم که تحت پتانسیل نرده‌ای $V(\mathbf{r})$ (که به‌عنوان مثال، نمایشگر اثر یک میدان الکتریکی روی یک ذرهٔ باردار است) قرار دارد. در فصل ۵ (نوسانگر هماهنگ) و فصل ۷ (ذرهٔ واقع در پتانسیل مرکزی) نمونه‌های دیگری از پتانسیلهای نرده‌ای بررسی شده‌اند. در اینجا با یک مسئلهٔ مکمل سروکار خواهیم داشت، و آن خواص ذرهٔ واقع در پتانسیل برداری $A(\mathbf{r})$ (ذرهٔ باردار واقع در میدان مغناطیسی) است. با تعدادی اثرات مکانیک کوانتومی محض، نظیر ترازهای انرژی هم‌فاصله در میدان مغناطیسی یکنواخت (ترازهای لاندائو) مواجه خواهیم شد.^۱ قبل از مطالعهٔ مسئله از دیدگاه مکانیک کوانتومی، بعضی نتایج کلاسیک را به‌سرعت مرور خواهیم کرد.

۱. این هم‌فاصله بودن، همان‌طور که نشان خواهیم داد، نتیجه‌ای از خواص نوسانگر هماهنگ است، و می‌توانستیم آن‌را در فصل ۵ بررسی کنیم. اما، همچنین خواهیم دید که خواص تکانهٔ زاویه‌ای در مطالعه و دسته‌بندی حالت‌های مانای ذره مفیدند. به‌این علت است که این مکمل را پس از فصل ۶ آورده‌ایم.

۱. مرور مسئله کلاسیک

الف) حرکت ذره

وقتی ذره‌ای با مکان \mathbf{r} و بار q تحت میدان مغناطیسی $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ قرار گیرد، نیروی \mathbf{f} وارد بر آن توسط نیروی لورنتس داده می‌شود

$$\mathbf{f} = q \mathbf{v} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}) \quad (۱)$$

که

$$\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} \quad (۲)$$

سرعت ذره است. حرکت ذره از قانون بنیادی دینامیک پیروی می‌کند

$$\mu \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{f} \quad (۳)$$

(که μ جرم ذره است).

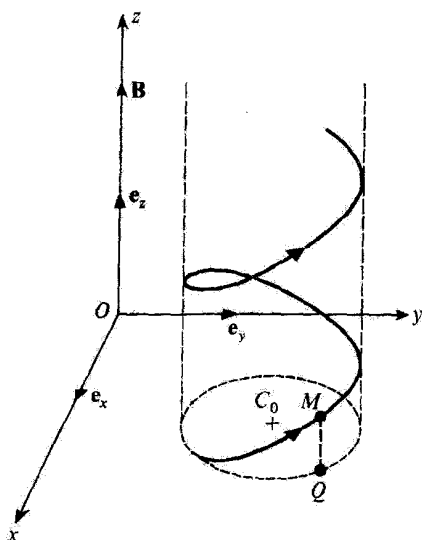
در بقیه این مکمل، اغلب موردی را در نظر می‌گیریم که میدان مغناطیسی یکنواخت است؛ راستای آن را در امتداد محور Oz انتخاب می‌کنیم. با حل معادله حرکت (۳)، می‌توان نشان داد که در این مورد سه مختصه $x(t)$ ، $y(t)$ ، و $z(t)$ ذره با روابط زیر داده می‌شوند

$$\begin{aligned} x(t) &= x_0 + \sigma \cos(\omega_c t - \varphi_0) \\ y(t) &= y_0 + \sigma \sin(\omega_c t - \varphi_0) \\ z(t) &= v_{z0} t + z_0 \end{aligned} \quad (۴)$$

که x_0 ، y_0 ، z_0 ، σ ، φ_0 ، و v_{z0} شش پارامتر ثابت هستند که به شرایط اولیه بستگی دارند؛ "بسامد سیکلوترونی" ω_c با رابطه زیر داده می‌شود

$$\omega_c = -q \frac{B}{\mu} \quad (۵)$$

معادلات (۴) نشان می‌دهند که تصویر مکان M ذره روی سطح xOy حرکت دایره‌ای یکنواختی انجام می‌دهد با سرعت زاویه‌ای ω_c و فاز اولیه φ_0 ، روی دایره‌ای به شعاع σ که مرکزش در نقطه



شکل ۱ مسیر کلاسیک یک ذره باردار در میدان مغناطیسی یکنواخت موازی با Oz . ذره با سرعت ثابت روی یک مارپیچ دایره‌ای حرکت می‌کند که محورش موازی Oz است و از نقطه C_0 می‌گذرد. شکل برای $q < 0$ (مورد الکترون) رسم شده است، یعنی $\omega_c > 0$.

C_0 ، با مختصات x_0 و y_0 است. حرکت تصویر M روی Oz صرفاً مستقیم‌الخط و یکنواخت است. بنابراین، ذره در فضا در امتداد یک مارپیچ دایره‌ای که محورش موازی Oz است و از C_0 می‌گذرد حرکت می‌کند (شکل ۱).

اگر فقط حرکت نقطه Q یعنی تصویر M روی سطح xOy را در نظر بگیریم، باید رفتار بردار زیر را مطالعه کنیم

$$\rho = x e_x + y e_y \quad (6)$$

که e_x و e_y بردارهای واحد محورهای Ox و Oy هستند. سرعت Q عبارت است از

$$v_{\perp} = \frac{d\rho}{dt} \quad (7)$$

بنابراین مناسب است مؤلفه‌های x' و y' بردار Q ، C_0 را معرفی کنیم

$$\begin{aligned} x' &= x - x_0 \\ y' &= y - y_0 \end{aligned} \quad (8)$$

چون Q حرکت دایره‌ای یکنواخت حول C_0 انجام می‌دهد، داریم

$$\mathbf{v}_\perp = \omega_c \mathbf{e}_z \times \mathbf{C}_0 \cdot \mathbf{Q} \quad (9)$$

(که \mathbf{e}_z بردار واحد Oz است.) این می‌رساند که مختصات x_0 و y_0 نقطه C_0 با مختصات Q و مؤلفه‌های \mathbf{v}_\perp توسط روابط زیر مرتبط‌اند

$$\begin{aligned} x_0 &= x - \frac{1}{\omega_c} v_y \\ y_0 &= y + \frac{1}{\omega_c} v_x \end{aligned} \quad (10)$$

ب) پتانسیل برداری. لاگرانژی و هامیلتونی کلاسیک

برای توصیف میدان مغناطیسی $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ ، می‌توان از پتانسیل برداری $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ استفاده کرد که بنا بر تعریف با رابطه زیر به $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ ارتباط دارد

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) \quad (11)$$

برای مثال، اگر میدان \mathbf{B} یکنواخت باشد، می‌توان $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ را به صورت زیر انتخاب کرد

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{c} \mathbf{r} \times \mathbf{B} \quad (12)$$

به علاوه می‌دانیم که، وقتی $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ معلوم باشد، شرط (۱۱)، $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ را به طور یکتا تعیین نمی‌کند: گرادیان هر تابع دلخواه \mathbf{r} را می‌توانیم به $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ اضافه کنیم بدون آنکه $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ تغییر کند.^۱ می‌توان نشان داد (پیوست ۳، بخش ۴-ب) که تابع لاگرانژی $\mathcal{L}(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ ذره با رابطه زیر داده می‌شود

$$\mathcal{L}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \frac{1}{2} \mu v^2 + q \mathbf{v} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) \quad (13)$$

۱. به عنوان مثال، برای یک میدان یکنواخت موازی Oz می‌توان به جای بردار (۱۲) برداری انتخاب کرد که مؤلفه‌هایش عبارت‌اند از $A_x = 0$ ، $A_y = xB$ ، $A_z = 0$ و $A_z = 0$.

نتیجه می‌شود که \mathbf{p} ، تکانهٔ مزدوج مکان \mathbf{r} ، با رابطهٔ زیر به \mathbf{v} و $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ مربوط می‌شود

$$\mathbf{p} = \nabla_{\mathbf{v}} \mathcal{L}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \mu \mathbf{v} + q\mathbf{A}(\mathbf{r}) \quad (14)$$

پس هامیلتونی کلاسیک $\mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ عبارت است از

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2\mu} [\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r})]^2 \quad (15)$$

می‌شود ثابت کرد که بهتر است قرار دهیم

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \mathcal{H}_{\perp}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) + \mathcal{H}_{\parallel}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \quad (16)$$

با

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\perp}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) &= \frac{1}{2\mu} \{ [p_x - qA_x(\mathbf{r})]^2 + [p_y - qA_y(\mathbf{r})]^2 \} \\ \mathcal{H}_{\parallel}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) &= \frac{1}{2\mu} [p_z - qA_z(\mathbf{r})]^2 \end{aligned} \quad (17)$$

یادداشت:

در این مورد، برخلاف پتانسیل نرده‌ای $V(\mathbf{r})$ ، رابطهٔ (۱۴) نشان می‌دهد که تکانهٔ \mathbf{p} برابر تکانهٔ مکانیکی $\mu\mathbf{v}$ نیست. همچنین از مقایسه (۱۴) و (۱۵) می‌بینیم که \mathcal{H} برابر انرژی جنبشی $\mu v^2/2$ ذره است؛ این نتیجه از این حقیقت ناشی می‌شود که چون نیروی لورنتس (۱) همیشه عمود بر \mathbf{v} است، هنگام حرکت کار انجام نمی‌دهد. همین‌طور، باید خاطر نشان کرد که تکانهٔ زاویه‌ای

$$\mathcal{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (18)$$

متفاوت از گشتاور تکانهٔ مکانیکی $\mu\mathbf{v}$ است

$$\lambda = \mathbf{r} \times \mu\mathbf{v} \quad (19)$$

ج) ثابتهای حرکت در یک میدان یکنواخت

مورد خاصی را در نظر بگیرید که میدان \mathbf{B} یکنواخت باشد. حرکت ذره (بخش ۱-الف) طوری است که \mathcal{H}_\perp و \mathcal{H}_\parallel تعریف شده‌اند، که با (۱۷) تعریف شده‌اند، ثابتهای حرکت هستند.^۱ اگر (۱۴) را در (۱۰) جانشین کنیم، به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} x_0 &= x - \frac{1}{\mu\omega_c} [p_y - qA_y(\mathbf{r})] \\ y_0 &= y + \frac{1}{\mu\omega_c} [p_x - qA_x(\mathbf{r})] \end{aligned} \quad (20)$$

نتیجه می‌شود که شعاع σ مسیر ماریچ در رابطه زیر صادق است

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= (x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 = \left(\frac{1}{\mu\omega_c}\right)^2 \{ [p_y - qA_y(\mathbf{r})]^2 + [p_x - qA_x(\mathbf{r})]^2 \} \\ &= \frac{2}{\mu\omega_c^2} \mathcal{H}_\perp \end{aligned} \quad (21)$$

پس σ^2 متناسب با هامیلتونی \mathcal{H}_\perp است.

همین‌طور، فرض کنید θ گشتاور تکانه مکانیکی $\mu\mathbf{v}$ نسبت به مرکز C_0 دایره باشد

$$\theta = C_0 \mathbf{M} \times \mu \mathbf{v} \quad (22)$$

بنابراین، مؤلفه θ_z این گشتاور را، با در نظر گرفتن (۲۰)، می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned} \theta_z &= \mu [(x - x_0)v_y - (y - y_0)v_x] \\ &= \frac{1}{\mu\omega_c} \{ [p_y - qA_y(\mathbf{r})]^2 + [p_x - qA_x(\mathbf{r})]^2 \} = \frac{2}{\omega_c} \mathcal{H}_\perp \end{aligned} \quad (23)$$

بنابراین، همان‌طور که ممکن است انتظار رود، θ_z یک ثابت حرکت است. از طرف دیگر، مؤلفه λ_z گشتاور تکانه مکانیکی $\mu\mathbf{v}$ نسبت به O ، به طور کلی، ثابت نیست، زیرا

$$\lambda_z = \theta_z + \mu [x_0 v_y(t) - y_0 v_x(t)] \quad (24)$$

بنابراین، بر طبق (۴)، λ_z به طور سینوسی نسبت به زمان تغییر می‌کند.

دست‌آخر، \mathcal{L}_z یعنی تصویر تکانه زاویه‌ای \mathcal{L} روی Oz را در نظر می‌گیریم

$$\mathcal{L}_z = xp_y - yp_x \quad (25)$$

۱. این امر از آنجا ناشی می‌شود که، بر طبق (۱۴) و (۱۷)، \mathcal{H}_\perp و \mathcal{H}_\parallel به ترتیب برابر انرژیهای جنبشی $\mu v_\perp^2/2$ و $\mu v_\parallel^2/2$ هستند که به حرکت‌های عمود بر و موازی با Oz مرتبط‌اند.

برطبق (۱۴)، می‌توان نوشت

$$\mathcal{L}_z = x[\mu v_y + qA_y(\mathbf{r})] - y[\mu v_x + qA_x(\mathbf{r})] \quad (26)$$

بنابراین، \mathcal{L}_z به پیمانهٔ انتخاب‌شده، یعنی به پتانسیل برداری \mathbf{A} که برای توصیف میدان مغناطیسی انتخاب می‌شود، بستگی صریح دارد. در اغلب موارد، \mathcal{L}_z ثابت حرکت نیست. با وجود این، اثر پیمانهٔ (۱۲) را انتخاب کنیم، از روی (۴) داریم

$$\mathcal{L}_z = \frac{qB}{\gamma} (x_0^2 + y_0^2 - \sigma^2) \quad (27)$$

دراین صورت \mathcal{L}_z یک ثابت حرکت است.

رابطهٔ (۲۷)، تعبیر فیزیکی ساده‌ای ندارد، زیرا به‌ازای فقط یک پیمانهٔ خاص معتبر است. اما، در بخشهای زیر، در مطالعهٔ مکانیک کوانتومی مسئلهٔ مفیدبودن آن برای ما ثابت خواهد شد.

۲. خواص کوانتومی عمومی ذره در میدان مغناطیسی

الف) کوانتش. هامیلتونی

ذره‌ای در نظر بگیرید که در یک میدان مغناطیسی دلخواه که با پتانسیل برداری $\mathbf{A}(x, y, z)$ توصیف می‌شود قرار دارد. در مکانیک کوانتومی، پتانسیل برداری یک عملگر می‌شود که تابعی از سه مشاهده‌پذیر X, Y, Z و H عملگر H ، هامیلتونی ذره، از روی (۱۵) به‌دست می‌آید

$$H = \frac{1}{2\mu} [\mathbf{P} - q\mathbf{A}(X, Y, Z)]^2 \quad (28)$$

برطبق (۱۴)، عملگر V ، مربوط به سرعت ذره، با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$\mathbf{V} = \frac{1}{\mu} [\mathbf{P} - q\mathbf{A}(X, Y, Z)] \quad (29)$$

که با استفاده از آن می‌توانیم H را به‌صورت زیر بنویسیم

$$H = \frac{\mu}{2} \mathbf{V}^2 \quad (30)$$

ب) روابط جابه‌جایی

مشاهده‌پذیرهای \mathbf{R} و \mathbf{P} در روابط جابه‌جایی بنیادی صدق می‌کنند

$$[X, P_x] = [Y, P_y] = [Z, P_z] = i\hbar \quad (31)$$

جابه‌جاگرهای دیگر بین مؤلفه‌های \mathbf{R} و \mathbf{P} صفرند. بنابراین، دو مؤلفه \mathbf{P} جابه‌جا می‌شوند. اما، از (۲۹) ملاحظه می‌شود که این امر برای \mathbf{V} صادق نیست؛ به‌عنوان مثال

$$[V_x, V_y] = -\frac{q}{\mu^2} \{ [P_x, A_y(\mathbf{R})] + [A_x(\mathbf{R}), P_y] \} \quad (۳۲)$$

محاسبه این عبارت، با استفاده از قاعده داده‌شده در مکمل B_{II}، ساده است [فرمول (۴۸)]

$$[V_x, V_y] = \frac{iq\hbar}{\mu^2} \left\{ \frac{\partial A_y}{\partial X} - \frac{\partial A_x}{\partial Y} \right\} = \frac{iq\hbar}{\mu^2} B_z(\mathbf{R}) \quad (\text{الف-۳۳})$$

همچنین می‌توان نشان داد که

$$[V_y, V_z] = \frac{iq\hbar}{\mu^2} B_x(\mathbf{R}) \quad (\text{ب-۳۳})$$

$$[V_z, V_x] = \frac{iq\hbar}{\mu^2} B_y(\mathbf{R}) \quad (\text{ج-۳۳})$$

بنابراین میدان مغناطیسی به‌طور صریح در روابط جابه‌جایی برای سرعت وارد می‌شود. اما، چون $\mathbf{A}(\mathbf{R})$ با X, Y, Z و جابه‌جاپذیر است، رابطه (۲۹) ایجاب می‌کند

$$[X, V_x] = \frac{1}{\mu} [X, P_x] = \frac{i\hbar}{\mu} \quad (\text{الف-۳۴})$$

و، همچنین

$$[Y, V_y] = [Z, V_z] = \frac{i\hbar}{\mu} \quad (\text{ب-۳۴})$$

(جابه‌جاگرهای دیگر بین مؤلفه‌های \mathbf{R} از مؤلفه‌های \mathbf{V} صفرند). از این روابط، می‌توان نتیجه گرفت که (مکمل C_{III})

$$\Delta X \times \Delta V_x \geq \frac{\hbar}{2\mu} \quad (۳۵)$$

(با نامساویهای مشابهی برای مؤلفه‌های مربوط به Oy و Oz). پس نتایج فیزیکی روابط عدم قطعیت هایزنبرگ در اثر حضور میدان مغناطیسی تغییر نمی‌کنند.

دست آخر، روابط جابه‌جایی بین مؤلفه‌های عملگر زیر را محاسبه می‌کنیم

$$\Lambda = \mu \mathbf{R} \times \mathbf{V} \quad (۳۶)$$

که وابسته به گشتاور تکانه مکانیکی نسبت به O است.^۱ به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} [\Lambda_x, \Lambda_y] &= \mu^2 [YV_z - ZV_y, ZV_x - XV_z] \\ &= \mu^2 Y \{ [V_z, Z] V_x + Z [V_z, V_x] \} - \mu^2 Z^2 [V_y, V_x] \\ &\quad + \mu^2 X \{ Z [V_y, V_z] + [Z, V_z] V_y \} \end{aligned} \quad (۳۷)$$

یعنی، با به حساب آوردن (۳۳) و (۳۴) داریم

$$[\Lambda_x, \Lambda_y] = i\hbar \{ -\mu Y V_x + q Y Z B_y + q Z^2 B_z + q X Z B_x + \mu X V_y \} \quad (۳۸)$$

نتیجه می‌شود که

$$[\Lambda_x, \Lambda_y] = i\hbar \{ \lambda_z + q Z \mathbf{R} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{R}) \} \quad (۳۹)$$

(جابه‌جاگرهای دیگر را می‌توان با جایگشت چرخه‌ای شاخصهای x, y, z و z به دست آورد). وقتی میدان \mathbf{B} صفر نباشد، روابط جابه‌جایی Λ کاملاً متفاوت از روابط مربوط به \mathbf{L} هستند. بنابراین، عملگر Λ به‌طور پیشین، دارای خواص تکانه‌های زاویه‌ای که در این فصل اثبات شدند نیست.

ج) نتایج فیزیکی

۱. تحول $\langle \mathbf{R} \rangle$

تغییر زمان میانگین مکان ذره توسط قضیه اهرنفسست داده می‌شود [برطبق فرمول (۳۰)]

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \mathbf{R} \rangle = \langle [\mathbf{R}, H] \rangle = \left\langle \left[\mathbf{R}, \frac{\mu}{\gamma} \mathbf{V}^2 \right] \right\rangle \quad (۴۰)$$

۱. البته، مؤلفه‌های تکانه زاویه‌ای $\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$ همیشه در روابط جابه‌جایی متداول خود صدق می‌کنند.

معادلات (۳۴) تعبیر مشکلی ندارند، زیرا با جانشینی در (۴۰)، می‌دهند

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{R} \rangle = \langle \mathbf{V} \rangle \quad (41)$$

بنابراین، مانند موردی که در آن میدان مغناطیسی صفر است، میانگین سرعت برابر با مشتق $\langle \mathbf{R} \rangle$ است. معادله (۴۱) مشابه مکانیک کوانتومی معادله (۲) است.

۲. تحول $\langle \mathbf{V} \rangle$. نیروی لورنتس

حال مشتق زمانی مقدار میانگین $\langle \mathbf{V} \rangle$ سرعت را محاسبه می‌کنیم

$$i\hbar \frac{d}{dt}\langle \mathbf{V} \rangle = \left\langle \left[\mathbf{V}, \frac{\mu}{\gamma} \mathbf{V}^2 \right] \right\rangle \quad (42)$$

چون، بر طبق روابط (۳۳)، داریم

$$\begin{aligned} [\mathbf{V}^2, V_x] &= [V_x^2 + V_y^2 + V_z^2, V_x] \\ &= V_y[V_y, V_x] + [V_y, V_x]V_y + V_z[V_z, V_x] + [V_z, V_x]V_z \\ &= \frac{iq\hbar}{\mu^2} \{-V_y B_z(\mathbf{R}) - B_z(\mathbf{R})V_y + V_z B_y(\mathbf{R}) + B_y(\mathbf{R})V_z\} \end{aligned} \quad (43)$$

به‌سهولت دیده می‌شود که

$$\mu \frac{d}{dt}\langle \mathbf{V} \rangle = \langle \mathbf{F}(\mathbf{R}, \mathbf{V}) \rangle \quad (44)$$

که عملگر $\mathbf{F}(\mathbf{R}, \mathbf{V})$ با رابطه زیر تعریف می‌شود

$$\mathbf{F}(\mathbf{R}, \mathbf{V}) = \frac{q}{\gamma} \{\mathbf{V} \times \mathbf{B}(\mathbf{R}) - \mathbf{B}(\mathbf{R}) \times \mathbf{V}\} \quad (45)$$

دو رابطه آخر، همان مشابه‌های روابط کلاسیک (۱) و (۳) هستند. در اینجا، یک عبارت متقارن برای $\mathbf{F}(\mathbf{R}, \mathbf{V})$ به‌دست می‌آوریم (فصل سوم، بخش ۵-B)، چون \mathbf{R} و \mathbf{V} جابه‌جاپذیر نیستند.

۳. تحول $\langle \Lambda \rangle$

حال رابطهٔ زیر را محاسبه می‌کنیم

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \Lambda \rangle = \langle [\Lambda, H] \rangle \quad (46)$$

برای این منظور، به‌عنوان مثال، جابه‌جاگر $[XV_y - YV_x, H]$ را حساب می‌کنیم

$$\begin{aligned} [XV_y - YV_x, H] &= X[V_y, H] + [X, H]V_y - Y[V_x, H] - [Y, H]V_x \\ &= \frac{i\hbar}{\mu} (XF_y - YF_x) + i\hbar(V_xV_y - V_yV_x) \end{aligned} \quad (47)$$

اما X و V_y ، و همچنین Y و V_x ، جابه‌جاپذیرند. بنابراین جابه‌جاگری که مورد محاسبهٔ ماست برابر است با

$$\begin{aligned} [V_yX - V_xY, H] &= V_y[X, H] + [V_y, H]X - V_x[Y, H] - [V_x, H]Y \\ &= \frac{i\hbar}{\mu} (F_yX - F_xY) + i\hbar(V_yV_x - V_xV_y) \end{aligned} \quad (48)$$

با گرفتن نیمی از مجموع این دو عبارت، $d/dt \langle \Lambda_z \rangle$ به‌شکل زیر پیدا می‌شود

$$\frac{d}{dt} \langle \Lambda_z \rangle = \frac{1}{\hbar} \langle XF_y - YF_x - F_xY + F_yX \rangle \quad (49)$$

با استدلال مشابهی می‌توان مشتق $\langle \Lambda_x \rangle$ و $\langle \Lambda_y \rangle$ را به‌دست آورد؛ در نهایت داریم

$$\frac{d}{dt} \langle \Lambda \rangle = \frac{1}{\hbar} \langle \mathbf{R} \times \mathbf{F}(\mathbf{R}, \mathbf{V}) - \mathbf{F}(\mathbf{R}, \mathbf{V}) \times \mathbf{R} \rangle \quad (50)$$

مشابه کلاسیک این رابطه عبارت است از

$$\frac{d}{dt} \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{r} \times \mathbf{f}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \quad (51)$$

که یک قضیهٔ معروف را بیان می‌کند؛ مشتق زمانی گشتاور تکانهٔ مکانیکی نسبت به نقطهٔ ثابت O برابر است با گشتاور نیروی وارد بر ذره نسبت به O .

۳. مورد میدان مغناطیسی یکنواخت

وقتی میدان مغناطیسی یکنواخت است، بررسی عمومی پیشین را می‌توان به سهولت پیگیری کرد. راستای میدان B را به عنوان محور Oz انتخاب می‌کنیم. آنگاه روابط جابه‌جایی (۳۳)، یا استفاده از تعریف (۵)، می‌شود

$$[V_x, V_y] = -i \frac{\hbar \omega_c}{\mu} \quad (\text{الف-۵۲})$$

$$[V_y, V_z] = [V_z, V_x] = 0 \quad (\text{ب-۵۲})$$

یادداشت:

با اعمال نتایج مکمل C_{III} بر V_x و V_y ، از (الف-۵۲) دیده می‌شود که انحرافات ریشه میانگین مربعی در رابطه زیر صدق می‌کنند

$$\Delta V_x \times \Delta V_y \geq \frac{\hbar |\omega_c|}{2\mu} \quad (\text{۵۳})$$

پس مؤلفه‌های سرعت V_{\perp} کمیت فیزیکی ناسازگارند.

الف) ویژه‌مقادیر هامیلتونی

مشابه با (۱۶)، می‌توان H را به صورت زیر نوشت

$$H = H_{\perp} + H_{\parallel} \quad (\text{۵۴})$$

$$H_{\perp} = \frac{\mu}{\gamma} (V_x^2 + V_y^2) \quad (\text{الف-۵۵})$$

$$H_{\parallel} = \frac{\mu}{\gamma} V_z^2 \quad (\text{ب-۵۵})$$

برطبق (ب-۵۲)، داریم

$$[H_{\perp}, H_{\parallel}] = 0 \quad (\text{۵۶})$$

اکنون می‌توان پایه‌ای از ویژه‌بردارهای مشترک H_{\perp} (ویژه‌مقادیر E_{\perp}) و H_{\parallel} (ویژه‌مقادیر E_{\parallel}) را جستجو کرد؛ آنها طبعاً ویژه‌بردارهای H با ویژه‌مقادیر زیر خواهند بود

$$E = E_{\perp} + E_{\parallel} \quad (57)$$

۱. ویژه‌مقادیر H_{\parallel}
 ویژه‌بردارهای عملگر V_z ویژه‌بردارهای H_{\parallel} نیز هستند. اما اکنون، Z و V_z دو عملگر هرمیتی هستند که در رابطهٔ زیر صدق می‌کنند

$$[Z, V_z] = \frac{i\hbar}{\mu} \quad (58)$$

بنابراین، می‌توانیم در مورد آنها نتایج مکمل E_{II} از فصل دوم را به‌کار ببریم، به‌ویژه، طیف V_z شامل تمام اعداد حقیقی است. در نتیجه، ویژه‌مقادیر H_{\parallel} به‌شکل زیر هستند

$$E_{\parallel} = \frac{\mu}{\gamma} v_z^2 \quad (59)$$

که v_z یک ثابت اختیاری حقیقی است. بنابراین طیف H_{\parallel} پیوسته است؛ انرژی E_{\parallel} می‌تواند هر مقدار مثبت یا صفر را بگیرد. تعبیر این نتیجه واضح است: H_{\parallel} انرژی جنبشی یک ذرهٔ آزاد متحرک در امتداد Oz را توصیف می‌کند (به‌مانند مورد مکانیک کلاسیک، بخش ۱-الف).

۲. ویژه‌مقادیر H_{\perp}
 فرض خواهیم کرد، به‌عنوان مثال، که ذرهٔ مورد نظر دارای بار منفی q باشد، پس بسامد سیکلوترونی ω_c مثبت است [فرمول (۵)].
 قرار می‌دهیم

$$\begin{aligned} \hat{Q} &= \sqrt{\frac{\mu}{\hbar\omega_c}} V_y \\ \hat{S} &= \sqrt{\frac{\mu}{\hbar\omega_c}} V_x \end{aligned} \quad (60)$$

بنابراین رابطه (۵۲ الف) را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$[\hat{Q}, \hat{S}] = i \quad (۶۱)$$

و H_{\perp} می‌شود

$$H_{\perp} = \frac{\hbar\omega_c}{\gamma}(\hat{Q}^2 + \hat{S}^2) \quad (۶۲)$$

پس H_{\perp} شکل هامیلتونی نوسانگر هماهنگ یک بعدی می‌گیرد [رابطه (۵-۲۳)]. \hat{Q} و \hat{S} ، که در (۶۱) صادق‌اند، نقشهای مکان \hat{X} و تکانه \hat{P} این نوسانگر را بازی می‌کنند.

دلایلی که در بخش ۵-۲-۲ برای عملگرهای \hat{X} و \hat{P} بیان شدند را می‌توان در اینجا برای \hat{Q} و \hat{S} تکرار کرد. به عنوان مثال، می‌توان به سهولت نشان داد اگر $|\varphi_{\perp}\rangle$ ویژه‌بردار H_{\perp} باشد

$$H_{\perp} |\varphi_{\perp}\rangle = E_{\perp} |\varphi_{\perp}\rangle \quad (۶۳)$$

آنگاه کتهای

$$|\varphi'_{\perp}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q} + i\hat{S}) |\varphi_{\perp}\rangle \quad (۶۴-الف)$$

$$|\varphi''_{\perp}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q} - i\hat{S}) |\varphi_{\perp}\rangle \quad (۶۴-ب)$$

ویژه‌بردارهای H_{\perp} نیز هستند

$$H_{\perp} |\varphi'_{\perp}\rangle = (E_{\perp} - \hbar\omega_c) |\varphi'_{\perp}\rangle \quad (۶۵-الف)$$

$$H_{\perp} |\varphi''_{\perp}\rangle = (E_{\perp} + \hbar\omega_c) |\varphi''_{\perp}\rangle \quad (۶۵-ب)$$

از اینجا نتیجه می‌شود که مقادیر ممکن E_{\perp} با رابطه زیر داده می‌شوند

$$E_{\perp} = \left(n + \frac{1}{\gamma}\right) \hbar\omega_c \quad (۶۶)$$

که n یک عدد صحیح مثبت یا صفر است.

۳. ویژه‌مقادیر H

برطبق نتایج پیشین، ویژه‌مقادیر هامیلتونی کل H به شکل زیرند

$$E(n, v_z) = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c + \frac{1}{2} \mu v_z^2 \quad (۶۷)$$

ترازهای متناظر را ترازهای لاتداؤ گویند.

به‌ازای یک مقدار معین v_z ، تمام مقادیر ممکن n (صحیح مثبت یا صفر)، عملاً پیدا می‌شوند. با تکرار عمل عملگرهای $(\hat{Q} \pm i\hat{S}) / \sqrt{2}$ روی یک ویژه‌بردار H از ویژه‌مقدار $E(n, v_z)$ می‌توان حالت انرژی $E(n', v_z)$ را از (۶۵) به‌دست آورد، که n' یک عدد صحیح اختیاری است اما v_z عوض نشده است (چون \hat{Q} و \hat{S} با H_{\parallel} جابه‌جاپذیر است). بنابراین، اگر چه انرژی حرکت در امتداد Oz کوانتیده نیست، انرژی حرکت تصویرشده روی xOy کوانتیده است.

یادداشت:

درفصل ۵ (بخش ۳-۲-۵) نشان دادیم که ترازهای انرژی نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی در \mathcal{E}_x ناواکن است. وضعیت اینجا متفاوت است، زیرا ذره تحت مطالعه در فضای سه‌بعدی حرکت می‌کند. چون $\sqrt{\mu/2\hbar\omega_c}(V_y + iV_x) = 1/\sqrt{2}(\hat{Q} + i\hat{S})$ عملگر نابودی کوانتوم $\hbar\omega_c$ است، ویژه‌بردارهای H_{\perp} متناظر با $n = 0$ جوابهای معادلهٔ زیرند

$$(V_y + iV_x) | \varphi \rangle = 0 \quad (۶۸)$$

از یک طرف بردارهایی که جوابهای (۶۸) هستند می‌توانند ویژه‌بردارهای H_{\parallel} با یک ویژه‌مقدار (مثبت) اختیاری باشند. از طرف دیگر، حتی برای یک مقدار ثابت v_z ، معادلهٔ (۶۸) یک معادلهٔ دیفرانسیل جزئی نسبت به x و y است، که تعداد بینهایت جواب دارد. پس انرژیهای $E(n = 0, v_z)$ بینهایت واکن هستند. با استفاده از عملگر آفرینش کوانتوم، به‌سادگی می‌توان نشان داد که این مورد برای تمام ترازهای $E(n, v_z)$ و برای هر n (عدد صحیح نامنفی) صادق است. ■

ب) مطالعه مشاهده‌پذیرها در یک پیمانهٔ ویژه

برای آنکه نتایج فوق را دقیقتر بیان کنیم، حالت‌های مانای دستگاه را محاسبه خواهیم کرد. آنگاه می‌توانیم خواص فیزیکی این حالتها را مطالعه کنیم. اکنون لازم است یک پیمانه اختیار کنیم؛

پیمانه‌ای را انتخاب می‌کنیم که با (۱۲) داده می‌شود. پس مؤلفه‌های سرعت عبارت‌اند از

$$\begin{aligned} V_x &= \frac{P_x}{\mu} - \frac{\omega_c}{\gamma} Y \\ V_y &= \frac{P_y}{\mu} + \frac{\omega_c}{\gamma} X \\ V_z &= \frac{P_z}{\mu} \end{aligned} \quad (۶۹)$$

۱. هامیلتونیهای H_{\perp} و H_{\parallel} . رابطه با نوسانگر هماهنگ دوبعدی با جانشانی (۶۹) در (۵۵)، داریم

$$H_{\perp} = \frac{P_x^2 + P_y^2}{2\mu} + \frac{\omega_c}{\gamma} L_z + \frac{\mu \omega_c^2}{8} (X^2 + Y^2) \quad (۷۰\text{-الف})$$

$$H_{\parallel} = \frac{P_z^2}{2\mu} \quad (۷۰\text{-ب})$$

که L_z مؤلفهٔ تکانهٔ زاویه‌ای $\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$ در امتداد Oz است.

در نمایش $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ ، H_{\parallel} عملگری است که فقط روی متغیر z اثر می‌کند، در صورتی که H_{\perp} فقط روی متغیرهای x و y اثر می‌کند. بنابراین می‌توانیم با حل معادلهٔ ویژه مقدار H_{\parallel} در \mathcal{E}_z ، و معادلهٔ ویژه مقدار H_{\perp} در \mathcal{E}_{xy} پایه‌ای از ویژه بردارهای H ، پیدا کنیم. آنگاه تنها کافی است حاصلضربهای تانسوری بردارهای به دست آمده را تعیین کنیم.

در واقع، معادلهٔ ویژه مقدار H_{\parallel} به سادگی به تابع موجهای زیر منجر می‌شود

$$\varphi(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip_z z/\hbar} \quad (۷۱)$$

با

$$E_{\parallel} = \frac{p_z^2}{2\mu} \quad (۷۲)$$

[مجدداً (۵۹) را به دست آورده‌ایم]. بنابراین، به حل معادلهٔ ویژه مقدار H_{\perp} در \mathcal{E}_{xy} خواهیم پرداخت؛ تابع موجهایی که اکنون در نظر خواهیم گرفت، به x و y بستگی دارند نه به z .

از مقایسه (۷۰ الف) با عبارت (۱۲ الف) از مکمل ۴ همین فصل ملاحظه می‌کنیم که H_{\perp} به سادگی برحسب هامیلتونی H_{xy} نوسانگر هماهنگ دوبعدی بیان می‌شود

$$H_{\perp} = H_{xy} + \frac{\omega_c}{\gamma} L_z \quad (۷۳)$$

به شرطی که برای مقدار ثابتی که در H_{xy} وارد می‌شود، قرار دهیم

$$\omega = \frac{\omega_c}{\gamma} \quad (۷۴)$$

اما، در مکمل ۴ این فصل دیدیم که H_{xy} و L_z تشکیل یک مجموعه کامل مشاهده‌پذیر جابه‌جایی‌پذیر در \mathcal{E}_{xy} می‌دهند، و پایه‌ای از ویژه‌بردارهای $|\chi_{n_d, n_g}\rangle$ مشترک این دو مشاهده‌پذیر ساختم [فرمول (۴۷) از مکمل ۴ همین فصل]. $|\chi_{n_d, n_g}\rangle$ نیز ویژه‌بردارهای H_{\perp} هستند؛ بنابراین مکمل ۴ این فصل جوابهای معادله ویژه مقدار H_{\perp} را به دست می‌دهد.

یادداشت:

۱. در بخش ۳ الف، دیدیم که H_{\perp} می‌تواند به شکلی که شبیه به هامیلتونی نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی است نوشته شود. در اینجا دریافتیم که، در یک پیمانه ویژه، همین عملگر H_{\perp} نیز به سادگی به هامیلتونی H_{xy} نوسانگر هماهنگ دوبعدی ارتباط دارد. این دو نتیجه متناقض نیستند؛ آنها صرفاً متناظر با دو تفکیک مختلف یک هامیلتونی هستند، که به روشنی به نتیجه‌گیریهای فیزیکی یکسان منجر می‌شوند.

۲. نباید این واقعیت را از نظر دور بداریم که هامیلتون H_{\perp} حاوی مسئله‌ای فیزیکی است که کاملاً متفاوت از مسئله نوسانگر هماهنگ دوبعدی است؛ ذره باردار تحت یک پتانسیل برداری (که توصیف‌کننده یک میدان مغناطیسی یکنواخت است) قرار دارد نه یک پتانسیل زده‌ای هماهنگ (که باید به عنوان مثال، یک میدان الکتریکی غیر یکنواخت را توصیف کند)؛ این یک امر اتفاقی است که، در پیمانه انتخاب شده، اثرات میدان مغناطیسی می‌توانند قابل مقایسه با اثرات یک پتانسیل زده‌ای هماهنگ فرضی باشند.

۲. عبارتی برای مشاهده‌پذیرها برحسب عملگرهای آفرینش و نابودی کوانتومهای دایره‌ای اول از همه، مشاهده‌پذیرهای توصیف‌کننده کمیات وابسته به ذره را برحسب عملگرهای a_g و a_d بیان خواهیم کرد که توسط معادلات (۴۰) از مکمل ۴ همین فصل و الحاق a_d^{\dagger} و a_g^{\dagger} آنها تعریف می‌شوند (همچنین عملگرهای $N_g = a_g^{\dagger} a_g$ و $N_d = a_d^{\dagger} a_d$ را به کار خواهیم برد).

با جاگذاری روابط (۴۶) از مکمل ۴ همین فصل در (۷۳)، به دست می آوریم^۱

$$H_{\perp} = \left(N_d + \frac{1}{\gamma} \right) \hbar \omega_c \quad (75)$$

بنابراین انرژی وابسته به حالت $| \chi_{n_d, n_g} \rangle$ می شود

$$E_{\perp} = \left(n_d + \frac{1}{\gamma} \right) \hbar \omega_c \quad (76)$$

که در (۶۶) به دست آوردیم. به علاوه، چون E_{\perp} مستقل از n_g است، می بینیم که تمام ویژه مقادیر H_{\perp} بینهایت واگن هستند.

با استفاده از روابط (۲۳) و (۴۰) از مکمل ۴ همین فصل، می توانیم ببینیم که

$$X = \frac{1}{\gamma \beta} (a_d + a_d^{\dagger} + a_g + a_g^{\dagger}) \quad (77)$$

$$Y = \frac{i}{\gamma \beta} (a_d - a_d^{\dagger} - a_g + a_g^{\dagger})$$

که با استفاده از (۷۴)، β به صورت زیر تعریف می شود

$$\beta = \sqrt{\frac{\mu \omega_c}{2 \hbar}} \quad (78)$$

همچنین

$$P_x = \frac{i \hbar \beta}{\gamma} (-a_d + a_d^{\dagger} - a_g + a_g^{\dagger})$$

$$P_y = \frac{\hbar \beta}{\gamma} (a_d + a_d^{\dagger} - a_g - a_g^{\dagger}) \quad (79)$$

این عبارتها را اگر در (۶۹) جاگذاری کنیم به دست می آوریم

۱. به خاطر آورید که ω_c را مثبت گرفتیم. اگر ω_c منفی بود، شاخصهای d و g می بایست در برخی فرمولهایی که آورده می شوند با هم عوض شوند؛ به عنوان مثال، (۷۵) می شود

$$H_{\perp} = (N_g + 1/2) \hbar | \omega_c |$$

$$\begin{aligned} V_x &= -\frac{i\omega_c}{\sqrt{\beta}}(a_d - a_d^\dagger) \\ V_y &= \frac{\omega_c}{\sqrt{\beta}}(a_d + a_d^\dagger) \end{aligned} \quad (۸۰)$$

چون a_d و a_d^\dagger با N_d جابه‌جاپذیر نیست، با استفاده از (۷۵) می‌توان دید که، به‌مانند مکانیک کلاسیک، V_x و V_y ثابت‌های حرکت نیستند؛ به‌علاوه، با استفاده از روابط جابه‌جایی a_d و a_d^\dagger ، در واقع (۵۲الف) را به‌دست می‌آوریم.

همچنین جالب است که عملگرهای مکانیک کوانتومی وابسته به متغیرهای مختلفی که در توصیف حرکت کلاسیکی وارد می‌شوند را معرفی کنیم (بخش ۱): مختصات (x_0, y_0) از مرکز C_0 مسیر کلاسیک، مؤلفه‌های (x', y') از بردار $\mathbf{C}_0 \cdot \mathbf{Q}$ و غیره. مانند سابق، هرکدام از این عملگرها را با حرف بزرگ متناظر با حرف کوچکی که متغیر کلاسیک متناظر را نمایش می‌دهد نشان خواهیم داد. پس مشابه با (۱۰) قرار می‌دهیم

$$X_0 = X - \frac{1}{\omega_c} V_y = \frac{1}{\sqrt{\beta}}(a_g + a_g^\dagger) \quad (۸۱-الف)$$

$$Y_0 = Y + \frac{1}{\omega_c} V_x = \frac{i}{\sqrt{\beta}}(a_g^\dagger - a_g) \quad (۸۱-ب)$$

عملگرهای a_g و a_g^\dagger با N_d جابه‌جاپذیرند؛ نتیجه می‌شود که X_0 و Y_0 ثابت‌های حرکت‌اند. فرمولهای (۸۱) همچنین ایجاب می‌کنند که

$$[X_0, Y_0] = \frac{i}{\sqrt{\beta}^2} = \frac{i\hbar}{\mu\omega_c} \quad (۸۲)$$

در نتیجه X_0 و Y_0 کمیت‌های فیزیکی ناسازگارند، و انحرافهای ریشه میانگین مربعی آنها با نامساوی زیر به هم مربوط‌اند

$$\Delta X_0 \times \Delta Y_0 \geq \frac{\hbar}{\sqrt{\mu\omega_c}} \quad (۸۳)$$

همچنین تعریف می‌کنیم

$$X' = X - X_0 = \frac{1}{\sqrt{\beta}}(a_d + a_d^\dagger) \quad (۸۴)$$

$$Y' = Y - Y_0 = \frac{i}{\sqrt{\beta}}(a_d - a_d^\dagger)$$

بی‌درنگ ملاحظه می‌شود که X' و Y' ، به‌مانند مورد کلاسیک، ثابت‌های حرکت نیستند؛ به‌علاوه X' و Y' مانند متغیرهای کلاسیک متناظر [فرمول (۱۹)] به‌ترتیب صرفاً متناسب با V_x و V_y هستند

$$\begin{aligned} V_x &= -\omega_c Y' \\ V_y &= \omega_c X' \end{aligned} \quad (۸۵)$$

برطبق (۵۳)، معادلات (۸۵) ایجاب می‌کنند که

$$\Delta X' \times \Delta Y' \geq \frac{\hbar}{2\mu\omega_c} \quad (۸۶)$$

فرض کنید Σ^2 عملگر متناظر با σ^2 (مجذور مربع شعاع مسیر کلاسیک باشد):

$$\Sigma^2 = (X - X_0)^2 + (Y - Y_0)^2 \quad (۸۷)$$

برطبق (۸۷)، داریم

$$\Sigma^2 = \left(\frac{1}{\omega_c}\right)^2 (V_x^2 + V_y^2) = \frac{2}{\mu\omega_c^2} H_{\perp} \quad (۸۸)$$

بنابراین Σ^2 یک ثابت حرکت است، به‌مانند مورد σ^2 در مکانیک کلاسیک. دست‌آخر، عملگر وابسته با گشتاور تکانه مکانیکی μv نسبت به O می‌شود

$$\Theta_z = \mu[(X - X_0)V_y - (Y - Y_0)V_x] \quad (۸۹)$$

فرمول (۸۱) نشان می‌دهد که

$$\Theta_z = \frac{2}{\omega_c} H_{\perp} \quad (۹۰)$$

که مشابه (۲۳) است. بنابراین Θ_z یک ثابت حرکت است. از طرف دیگر، عملگر Λ_z ، یعنی مؤلفه $\mu \mathbf{R} \times \mathbf{V}$ در امتداد Oz می‌شود

$$\Lambda_z = \frac{2}{\omega_c} H_{\perp} + \hbar(a_d a_g + a_d^{\dagger} a_g^{\dagger}) \quad (۹۱)$$

و بنابراین با H_{\perp} جابه‌جاپذیر نیست.

ج) مطالعه حالت‌های مانا

در بالا نشان دادیم که ویژه‌مقادیر هامیلتونی H_{\perp} در \mathcal{E}_{xy} تماماً بینهایت واگن هستند. برای هر عدد صحیح n مثبت یا صفر، یک زیرفضای بینهایت بعدی $\mathcal{E}_{xy}^{(n)}$ از \mathcal{E}_{xy} وجود دارد، که تمام کتهای آن ویژه‌بردارهای H_{\perp} با همان ویژه‌مقادیر $(n + 1/2)\hbar\omega_c$ هستند. در این بخش، پایه‌های متفاوتی را مطالعه خواهیم کرد که می‌توانند در هر یک از این زیرفضاها انتخاب شوند. در ابتدا، خواص عمومی حالت‌های مانا را نشان خواهیم داد، که برای هر پایه‌ای از ویژه‌حالت‌های H_{\perp} معتبرند.

۱. خواص عمومی

روابط (۸۸) و (۹۰) نشان می‌دهند که هر حالت مانای اختیاری لزوماً یک ویژه‌بردار از Σ^z و Θ_z است؛ بنابراین، کمیات فیزیکی متناظر نیز همیشه در چنین حالتی کاملاً معین هستند و برابرند با

$$\begin{aligned} \text{برای } \Sigma^z & \quad \frac{\hbar}{\mu\omega_c} (2n + 1) \\ \text{برای } \Theta_z & \quad \hbar (2n + 1) \end{aligned} \quad (92)$$

مقادیر Σ^z و Θ_z متناسب با انرژی هستند؛ این نتیجه متناظر با توصیف کلاسیک حرکت است (بخش ۱).

از (۸۰) و (۸۴) نتیجه می‌شود که V_x, Y', X', V_y در یک زیرفضای $\mathcal{E}_{xy}^{(n)}$ معین دارای عناصر ماتریسی نیستند؛ نتیجه می‌شود که برای یک حالت مانا

$$\begin{aligned} \langle V_x \rangle = \langle V_y \rangle & = 0 \\ \langle X' \rangle = \langle Y' \rangle & = 0 \end{aligned} \quad (93)$$

با وجود این، چون V_x و V_y (و از این رو X' و Y') ثابت‌های حرکت نیستند، کمیات فیزیکی متناظر دارای مقادیر کاملاً معین در حالت مانا نیستند. در واقع، با استفاده از (۸۰) و (۸۴) و خواص نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی [رابطه (۵-۹۷)]، می‌توان نشان داد

$$\begin{aligned} \Delta V_x = \omega_c \Delta Y' & = \sqrt{\left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar\omega_c}{\mu}} \\ \Delta V_y = \omega_c \Delta X' & = \sqrt{\left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar\omega_c}{\mu}} \end{aligned} \quad (94)$$

که با (۳۵) موافق است. علاوه بر این، ملاحظه می‌شود که تنها حالت‌های مانایی که در آنها حاصلضرب $\Delta V_x \times \Delta V_y$ (یا $\Delta X' \times \Delta Y'$) کمترین مقدار خود را دارد حالت‌های پایه ($n = 0$) هستند.

یادداشت:

حالت‌های پایهٔ مختلفی جوابهای معادلهٔ

$$a_d | \varphi \rangle = 0 \quad (۹۵\text{-الف})$$

هستند، یعنی با استفاده از (۸۰)

$$(V_y + iV_x) | \varphi \rangle = 0 \quad (۹۵\text{-ب})$$

که همان (۶۸) است.

۲. حالت‌های $|\chi_{n_d, n_g}\rangle$

همان‌طور که در مکمل ۴ همین فصل دیدیم، از این واقعیت که H_{\perp} و L_z تشکیل یک مجموعهٔ کامل مشاهده‌پذیر جابه‌جایی‌پذیر در \mathcal{E}_{xy} می‌دهند، می‌توان در ساختن یک پایه از ویژه‌بردارهای مشترک این دو مشاهده‌پذیر استفاده کرد. این پایه از بردارهای $|\chi_{n_d, n_g}\rangle$ ترکیب یافته است، زیرا بر طبق فرمول (۴۶) از مکمل ۴ همین فصل داریم

$$H_{\perp} | \chi_{n_d, n_g} \rangle = \left(n_d + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c | \chi_{n_d, n_g} \rangle \quad (۹۶\text{-الف})$$

$$L_z | \chi_{n_d, n_g} \rangle = (n_d - n_g) \hbar | \chi_{n_d, n_g} \rangle \quad (۹۶\text{-ب})$$

پس زیرفضای $\mathcal{E}_{xy}^{(n)}$ که با مشخص کردن عدد صحیح (نامنفی) n تعریف می‌شود توسط مجموعهٔ بردارهای $|\chi_{n_d, n_g}\rangle$ ایجاد می‌شود به طوری که $n_d = n$. ویژه‌مقادیر L_z وابسته به این بردارهای مختلف به شکل $m\hbar$ هستند، و به ازای n ثابت، m یک عدد صحیح است که می‌تواند از $-\infty$ تا n تغییر کند (مثلاً، تمام حالت‌های پایه متناظر با مقادیر منفی m هستند؛ این مطالب در ارتباط با فرض $\omega_c > 0$ است که در بالا عنوان شد).

تابع موجهای وابسته به حالت‌های $|\chi_{n_d, n_g}\rangle$ در مکمل ۴ همین فصل (بخش ۳-د) محاسبه شدند. توجه کنید که حالت‌های $|\chi_{n_d, n_g}\rangle$ ویژه‌حالت‌های عملگر L_z هستند اما ویژه‌حالت‌های عملگر Λ_z وابسته به گشتاور تکانه مکانیکی نیستند. می‌توان این‌را مستقیماً از فرمول (۹۱) ملاحظه کرد.

در یک حالت $|\chi_{n_d, n_g}\rangle$ ، مقادیر میانگین $\langle X_0 \rangle$ و $\langle Y_0 \rangle$ ، بر طبق (۸۱)، صفر هستند. اما، نه X_0 و نه Y_0 متناظر با کمیات فیزیکی کاملاً معین نیستند، زیرا با استفاده از خواص نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی به سهولت می‌توان نشان داد که در یک حالت $|\chi_{n_d, n_g}\rangle$

$$\begin{aligned} \Delta X_0 &= \sqrt{\left(n_g + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar}{\mu \omega_c}} \\ \Delta Y_0 &= \sqrt{\left(n_g + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar}{\mu \omega_c}} \end{aligned} \quad (۹۷)$$

پس حداقل مقدار حاصلضرب $\Delta X_0 \times \Delta Y_0$ برای حالت‌های $|\chi_{n_d, n_g=0}\rangle$ به دست می‌آید، یعنی حالت‌های مربوط به هر تراز انرژی $E_{\perp} = (n + 1/2)\hbar\omega_c$ که برای آن L_z حداکثر مقدارش $n\hbar$ را می‌گیرد [معادله (۹۶)].

اکنون، عملگر زیر را تعریف می‌کنیم

$$\Gamma^{\dagger} = X_0^{\dagger} + Y_0^{\dagger} \quad (98)$$

این عملگر با مجذور فاصله از مرکز C_0 مسیر تا مبدأ متناظر است. با استفاده از (۸۱)، به سهولت پیدا می‌کنیم که

$$\begin{aligned} \Gamma^{\dagger} &= \frac{\hbar}{\mu\omega_c} (a_g a_g^{\dagger} + a_g^{\dagger} a_g) \\ &= \frac{\hbar}{\mu\omega_c} (2N_g + 1) \end{aligned} \quad (99)$$

بنابراین، حالت $|\chi_{n_d, n_g}\rangle$ یک ویژه‌حالت از Γ^{\dagger} با ویژه‌مقدار $(2n_g + 1)\hbar/\mu\omega_c$ است؛ این واقعیت که این مقدار نمی‌تواند صفر شود به عدم جابه‌جایی عملگر X_0 و Y_0 ارتباط دارد.

یادداشت:

عملگر L_z ، برطبق (۷۵) و (۹۹)، با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$L_z = \hbar(N_d - N_g) = \hbar \left[\frac{H_{\perp}}{\hbar\omega_c} - \frac{1}{2} - \frac{\mu\omega_c}{2\hbar} \Gamma^{\dagger} + \frac{1}{2} \right] \quad (100)$$

یعنی، برطبق (۸۸)

$$L_z = \frac{\mu\omega_c}{4} (\Sigma^{\dagger} - \Gamma^{\dagger}) = \frac{qB}{4} (\Gamma^{\dagger} - \Sigma^{\dagger}) \quad (101)$$

که هم‌ارز رابطهٔ کلاسیک (۲۷) است.

۳. انواع دیگر حالت‌های مانا

هر ترکیب خطی از بردارهای $|\chi_{n_d, n_g}\rangle$ وابسته به یک مقدار m_d ، یک ویژه‌حالت از H_{\perp} است و از این رو دارای خواص بیان‌شده در بخش ۳-ج است. با انتخاب مناسب ضرایب ترکیب خطی، می‌توان حالت‌های مانایی به دست آورد که دارای خواص جالب دیگری نیز هستند.

می‌دانیم، به‌عنوان مثال (بخش ۳-ب)، که X_0 و Y_0 ثابت‌های حرکت هستند. اما، چون X_0 و Y_0 جابه‌جایی‌پذیر نیستند، ویژه‌حالت‌های مشترک برای این دو عملگر وجود ندارند. این می‌رساند که، در مکانیک کوانتومی، امکان ندارد حالتی به دست آورد که در آن دو مختصهٔ نقطهٔ C_0 معلوم باشند.

برای ساختن ویژه‌حالت‌های مشترک H_{\perp} و X_0 ، می‌توانیم از خواص نوسانگر هماهنگ یک بعدی استفاده کنیم؛ فرمول (۸۱-الف) نشان می‌دهد که X_0 با تقریب یک ضریب ثابت، دارای همان عبارت عملگر مکان X_g از یک نوسانگر یک بعدی است که عملگر نابودی آن a_g است

$$X_0 = \frac{1}{\beta\sqrt{2}} \hat{X}_g \quad (102)$$

چون تابع موج‌های $\hat{\varphi}_k(\hat{x})$ وابسته به حالت‌های پایدار $|\hat{\varphi}_k\rangle$ از یک نوسانگر هماهنگ یک بعدی را می‌شناسیم (مکمل ۲ از فصل ۵، بخش ۲-ب)، می‌دانیم که چگونه ویژه‌بردارهای $|\hat{x}\rangle$ عملگر مکان را برحسب ترکیبات خطی حالت‌های $|\hat{\varphi}_k\rangle$ بنویسیم

$$\begin{aligned} |\hat{x}\rangle &= \sum_{k=0}^{\infty} |\hat{\varphi}_k\rangle \langle \hat{\varphi}_k | \hat{x} \rangle \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \hat{\varphi}_k^*(\hat{x}) |\hat{\varphi}_k\rangle \end{aligned} \quad (103)$$

برای به دست آوردن ویژه‌حالت‌های مشترک H_{\perp} و X_0 ، کافی است این نتیجه را در مورد حالت‌های $|\chi_{n_d, n_g} = k\rangle$ به کار ببریم؛ بردار

$$|\xi_{n, x_0}\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{\varphi}_k^*(\beta\sqrt{2}x_0) |\chi_{n_d=n, n_g=k}\rangle \quad (104)$$

یک ویژه‌بردار مشترک H_{\perp} و X_0 با ویژه‌مقدار $(n + 1/2)\hbar\omega_c$ و x_0 است. ویژه‌حالت‌های $|\eta_{n, y_0}\rangle$ مشترک H_{\perp} و Y_0 را می‌توان به روش مشابه پیدا کرد. رابطه (۸۱-ب) نشان می‌دهد که Y_0 متناسب با عملگر تکانه P_g از نوسانگر یک بعدی فرضی است که در بالا به کار بردیم

$$Y_0 = \frac{1}{\beta\sqrt{2}} \hat{P}_g \quad (105)$$

در نتیجه [فرمول (۲۰) از مکمل ۴ فصل ۵ را ببینید]

$$|\eta_{n, y_0}\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} i^k \hat{\varphi}_k^*(\beta\sqrt{2}y_0) |\chi_{n_d=n, n_g=k}\rangle \quad (106)$$

هم‌اکنون حالت‌هایی را ساختیم که در آنها یا X_0 کاملاً معین است یا Y_0 . همچنین می‌توانیم حالت‌های مانایی را تعیین کنیم که در آن حاصلضرب $\Delta X_0 \times \Delta Y_0$ به مقدار حداقلش، که با (۸۳) داده می‌شود، برسد. برای یک نوسانگر هماهنگ یک بعدی، در مکمل ۷ فصل ۵، حالت‌هایی که در آنها حاصلضرب $\Delta \hat{X} \times \Delta \hat{P}$ حداقل است را مطالعه کردیم؛ اینها حالت‌های شبه‌کلاسیک هستند که با فرمول زیر داده می‌شوند

$$|\alpha\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} c_k(\alpha) |\varphi_k\rangle \quad (107)$$

$$c_k(\alpha) = \frac{\alpha^k}{\sqrt{k!}} e^{-|\alpha|^2/2} \quad (108)$$

در این حالتها

$$\Delta \hat{X} = \Delta \hat{P} = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (109)$$

درموردی که در اینجا برای ما جالب توجه است، نتیجه می‌شود که حالت

$$|\theta_{n, \alpha_0}\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} c_k(\alpha_0) |\chi_{n_{\alpha}=n, n_{\beta}=k}\rangle \quad (110)$$

برای X_0 و Y_0 ، انحرافات ریشه میانگین مربعی زیر را می‌دهد

$$\Delta X_0 = \Delta Y_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (111)$$

بنابراین حاصلضرب $\Delta X_0 \times \Delta Y_0$ مینیموم است.

یادداشت:

چون میدان مغناطیسی یکنواخت است، مسئله فیزیکی مورد نظر ما نسبت به انتقال ناورد است. تاکنون، این تقارن به علت انتخاب پیمانه خاص (۱۲)، که مبدأ O را نسبت به تمام نقاط دیگر فضا متمایز می‌کند، مستتر مانده است. در نتیجه، نه هامیلتونی H و نه ویژه حالتهاش نسبت به انتقال ناورد می‌مانند. اما، می‌دانیم (مکمل ۸ همین فصل) که پیش‌بینیهای فیزیکی مکانیک کوانتومی ناوردای پیمانه‌ای هستند. این پیش‌بینیها در صورتی یکسان می‌مانند که، با تغییر پیمانه، نقطه دیگری غیر از مبدأ را متمایز کنیم. در نتیجه، تقارن انتقالی می‌باید در بررسی خواص فیزیکی یک حالت معین مجدداً ظاهر شود.

برای اینکه این مطلب را دقیقتر نشان دهیم، فرض می‌کنیم که در یک لحظه معین حالت ذره با کیت $|\psi\rangle$ که تابع موج $\langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \psi(\mathbf{r})$ به آن وابسته است در پیمانه (۱۲) مشخص می‌شود. اکنون یک انتقال \mathcal{K} که با بردار \mathbf{a} مشخص می‌شود انجام می‌دهیم، و کیت $|\psi_T\rangle$ را در نظر می‌گیریم که با رابطه زیر تعریف می‌شود

$$|\psi_T\rangle = e^{-i/\hbar \mathbf{P} \cdot \mathbf{a}} |\psi\rangle \quad (112)$$

که به آن، برطبق نتایج مکمل EII، تابع موج زیر وابسته است

$$\psi_T(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi_T \rangle = \psi(\mathbf{r} - \mathbf{a}) \quad (113)$$

همین انتقال می‌تواند در مورد پتانسیل برداری به کار رود

$$\mathbf{A}_T(\mathbf{r}) = \mathbf{A}(\mathbf{r} - \mathbf{a}) = -\frac{1}{c} (\mathbf{r} - \mathbf{a}) \times \mathbf{B} \quad (114)$$

واضح است که $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ و $\mathbf{A}_T(\mathbf{r})$ میدان یکسانی را توصیف می‌کنند. چون خواص فیزیکی وابسته به یک حالت برداری فقط بستگی به این حالت برداری و پتانسیل \mathbf{A} انتخابی دارد، وقتی عبارتهای (۱۱۳) و (۱۱۴) جانشین $\psi(\mathbf{r})$ و $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ شوند این خواص باید متحمل انتقال \mathcal{L} شوند. به‌سادگی می‌توان از این روابط در به‌دست‌آوردن عبارتی برای چگالی احتمال وابسته به $\langle \psi_T | \psi_T \rangle$ استفاده کرد

$$\rho_T(\mathbf{r}) = |\langle \psi_T(\mathbf{r}) | \psi(\mathbf{r} - \mathbf{a}) \rangle|^2 = \rho(\mathbf{r} - \mathbf{a}) \quad (115)$$

و عبارتی برای جریان $\mathbf{J}_T(\mathbf{r})$ که با پتانسیل برداری $\mathbf{A}_T(\mathbf{r})$ محاسبه می‌شود

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_T(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\gamma\mu} \left\{ \psi_T^*(\mathbf{r}) \left[\frac{\hbar}{i} \nabla + \frac{q}{\gamma} (\mathbf{r} - \mathbf{a}) \times \mathbf{B} \right] \psi_T(\mathbf{r}) + \text{c.c.} \right\} \\ &= \frac{1}{\gamma\mu} \left\{ \psi^*(\mathbf{r} - \mathbf{a}) \left[\frac{\hbar}{i} \nabla + \frac{q}{\gamma} (\mathbf{r} - \mathbf{a}) \times \mathbf{B} \right] \psi(\mathbf{r} - \mathbf{a}) + \text{c.c.} \right\} \\ &= \mathbf{J}(\mathbf{r} - \mathbf{a}) \end{aligned} \quad (116)$$

یکه $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ جریان احتمال وابسته به $\psi(\mathbf{r})$ در پیمانه (۱۲) است. پس کیت $\langle \psi_T |$ ، در پیمانه جدید $\mathbf{A}_T(\mathbf{r})$ ، حالتی را توصیف می‌کند که خواص فیزیکی آن توسط انتقال \mathcal{L} به خواص فیزیکی متناظر با کیت $\langle \psi |$ در پیمانه $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ مربوطاند.

علاوه براین، اکنون نشان می‌دهیم که انتقال یک حرکت ممکن، یک حرکت ممکن دیگر را به‌دست می‌دهد؛ و بدین ترتیب اثبات ناوردایی انتقالی مسئله را به‌پایان می‌رسانیم. برای این منظور، معادله شرودینگر را در نمایش $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ ، در پیمانه $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ ، در نظر بگیرید

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\gamma\mu} \left[\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A}(\mathbf{r}) \right]^2 \psi(\mathbf{r}, t) \quad (117)$$

با استفاده از روابط (۱۱۳) و (۱۱۴) و تبدیل $\mathbf{r} - \mathbf{a}$ به \mathbf{r} به‌دست می‌آوریم

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_T(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\gamma\mu} \left[\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A}_T(\mathbf{r}) \right]^2 \psi_T(\mathbf{r}, t) \quad (118)$$

عملگری که در طرف راست (۱۱۸) ظاهر می‌شود، چیزی غیر از هامیلتونی در پیمانه $\mathbf{A}_T(\mathbf{r})$ نیست. در نتیجه، اگر $\psi(\mathbf{r}, t)$ در پیمانه $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ ، یک حرکت ممکن دستگاه را توصیف کند، $\psi_T(\mathbf{r}, t)$ ، در پیمانه هم‌ارز $\mathbf{A}_T(\mathbf{r})$ ، حرکت ممکن دیگری را توصیف می‌کند که بر طبق آنچه هم‌اکنون نشان دادیم، چیزی جز نتیجه انتقال حرکت اولی نیست. به‌ویژه، اگر

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar}$$

یک حالت پایدار [در پیمانه $\mathbf{A}(\mathbf{r})$] باشد، آنگاه

$$\psi_T(\mathbf{r}, t) = \varphi_T(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar}$$

حالت مانای دیگری با همان انرژی [در پیمانه $A_T(\mathbf{r})$] است.

اگر بخواهیم بازهم از پیمانه (۱۲)، بعد از انجام انتقال \mathcal{U} روی حالت فیزیکی ذره، استفاده کنیم، باید حالت انتقال یافته را با یک کیت ریاضی $|\psi'_T\rangle$ ، که متفاوت از $|\psi_T\rangle$ است، توصیف کنیم. برطبق بخش ۳-۱۰-۱ فصل سوم، کیت $|\psi'_T\rangle$ را می‌توان با تبدیل یکانی از $|\psi_T\rangle$ به دست آورد

$$|\psi'_T\rangle = T_X |\psi_T\rangle \quad (119)$$

عملگر T_X عبارت است از

$$T_X = e^{i/hq\chi(\mathbf{r})} \quad (120)$$

که $\chi(\mathbf{r})$ تابع مشخص‌کنندهٔ تبدیل پیمانه‌ای انجام شده است. در اینجا، پتانسیل بعد از تغییر پیمانه می‌شود

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{c}\mathbf{r} \times \mathbf{B} = \mathbf{A}_T(\mathbf{r}) - \frac{1}{c}\mathbf{a} \times \mathbf{B} \quad (121)$$

به طوری که

$$\chi(\mathbf{r}) = -\frac{1}{c}\mathbf{r} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{B}) \quad (122)$$

با جاگذاری (۱۱۲)، (۱۲۰)، و (۱۲۲) در (۱۱۹)، بالاخره خواهیم داشت

$$|\psi'_T\rangle = U(\mathbf{a}) |\psi\rangle \quad (123)$$

با

$$U(\mathbf{a}) = e^{-i(q/2\hbar)\mathbf{R} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{B})} e^{-i/\hbar \mathbf{P} \cdot \mathbf{a}} \quad (124)$$

بنابراین، اگر در پیمانه $A_T(\mathbf{r})$ بمانیم، عملگر انتقال $U(\mathbf{a})$ است که با (۱۲۴) داده می‌شود.

مؤلفه‌های \mathbf{R} و \mathbf{P} در امتداد دو محور متعامد در فرمول (۱۲۴) وارد می‌شوند؛ از این رو جابه‌جاپذیرند،

بنابراین، می‌توانیم بنویسیم

$$U(\mathbf{a}) = e^{-i(q/2\hbar)\mathbf{R} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{B}) - (i/\hbar)\mathbf{P} \cdot \mathbf{a}} \quad (125)$$

موقعی که \mathbf{a} برداری از سطح xOy است، یک محاسبهٔ ساده، با استفاده از فرمولهای (۱۰) و (۶۹)، می‌دهد

$$U(\mathbf{a}) = e^{iq/h(\mathbf{a} \times \mathbf{R}_0) \cdot \mathbf{B}} \quad (126)$$

با

$$\mathbf{R}_0 = X_0 \mathbf{e}_x + Y_0 \mathbf{e}_y \quad (127)$$

بنابراین عملگرهای X_0 و Y_0 (مختصات مرکز دایره)، به ترتیب به انتقالات بینهایت کوچک در امتداد Ox

و Oy وابسته‌اند.

د) تحول زمانی

۱. مقادیر میانگین مشاهده پذیرها

اخیراً، با معدودی از کمیات فیزیکی مواجه شدیم که ثابتهای حرکت اند: X_0, Y_0, Θ_z و Σ^2 . حالت دستگاه هرچه باشد مقادیر میانگین آنها مستقل از زمان هستند.

اکنون تحول زمانی مقادیر میانگین $\langle X \rangle, \langle Y \rangle, \langle V_x \rangle, \langle V_y \rangle, \langle X' \rangle, \langle Y' \rangle$ را بررسی می‌کنیم. از عبارتهای داده شده در بخش ۳-ب-۲ بلافاصله ملاحظه می‌شود که عملگرهای متناظر دارای عناصر ماتریسی فقط بین حالت‌های $|X_{n_d, n_g}\rangle$ هستند که مقادیر n_d آنها به اندازه ± 1 (یا ۰) تفاوت دارند. بنابراین، تحول این مقادیر میانگین، فقط شامل یک بسامد بور است که چیزی جز بسامد سیکلوترونی $\omega_c/2\pi$ که در (۵) تعریف شده است نیست. این نتیجه کاملاً مشابه نتیجه داده شده توسط مکانیک کلاسیک است.

۲. حالت‌های شبه کلاسیک

فرض کنید که در $t = 0$ حالت ذره عبارت است از

$$|\psi_{\perp}(0)\rangle = |\alpha_d, \alpha_g\rangle \quad (128)$$

که در آن کیت $|\alpha_d, \alpha_g\rangle$ با رابطه (۷۰) از مکمل ۴ همین فصل تعریف می‌شود. چون عبارت (۷۵) برای H_{\perp} شامل N_d است ولی N_g ندارد، بردار حالت $|\psi_{\perp}(t)\rangle$ در لحظه t با تعویض α_d به $\alpha_d e^{-i\omega_c t}$ به دست می‌آید

$$|\psi_{\perp}(t)\rangle = e^{-i\omega_c t/2} |\alpha_d e^{-i\omega_c t}, \alpha_g\rangle \quad (129)$$

[عبارت (۹۲) از مکمل ۷ فصل ۵].

قرار می‌دهیم

$$\begin{aligned} \alpha_d &= |\alpha_d| e^{i\varphi_d} \\ \alpha_g &= |\alpha_g| e^{i\varphi_g} \end{aligned} \quad (130)$$

پس روابط (۸۰)، (۸۱) و (۸۴) نشان می‌دهند که

$$\begin{cases} \langle X_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\beta} (\alpha_g + \alpha_g^*) = \frac{|\alpha_g|}{\beta} \cos \varphi_g \\ \langle Y_0 \rangle = \frac{i}{\sqrt{2}\beta} (\alpha_g^* - \alpha_g) = \frac{|\alpha_g|}{\beta} \sin \varphi_g \end{cases} \quad (131)$$

$$\begin{cases} \langle X' \rangle(t) = \frac{1}{\sqrt{2}\beta} (\alpha_d e^{-i\omega_c t} + \alpha_d^* e^{i\omega_c t}) = \frac{|\alpha_d|}{\beta} \cos(\omega_c t - \varphi_d) \\ \langle Y' \rangle(t) = \frac{i}{\sqrt{2}\beta} (\alpha_d e^{-i\omega_c t} - \alpha_d^* e^{i\omega_c t}) = \frac{|\alpha_d|}{\beta} \sin(\omega_c t - \varphi_d) \end{cases} \quad (132)$$

$$\begin{cases} \langle V_x \rangle(t) = -\frac{|\alpha_d|}{\beta} \omega_c \sin(\omega_c t - \varphi_d) \\ \langle V_y \rangle(t) = \frac{|\alpha_d|}{\beta} \omega_c \cos(\omega_c t - \varphi_d) \end{cases} \quad (133)$$

به علاوه، خواص حالت‌های $|\alpha\rangle$ ایجاب می‌کنند که

$$\begin{aligned} \langle H_{\perp} \rangle &= \hbar \omega_c \left(|\alpha_d|^2 + \frac{1}{2} \right) \\ \langle \Theta_z \rangle &= 2\hbar \left(|\alpha_d|^2 + \frac{1}{2} \right) \\ \langle \Sigma^z \rangle &= \frac{1}{\beta^2} \left(|\alpha_d|^2 + \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (134)$$

تمام این نتایج بسیار نزدیک به نتایج داده شده توسط مکانیک کلاسیک است [معادله (۴)]. می‌بینیم که $|\alpha_d|$ به شعاع σ مسیر کلاسیک و φ_d به فاز اولیه φ مربوط است، در حالی که $|\alpha_g|$ به فاصله OC مربوط است و φ_g متناظر با زاویه قطبی بردار OC است.

به علاوه، با استفاده از خواص حالت‌های $|\alpha\rangle$ می‌توان نشان داد که

$$\Delta X_o = \Delta Y_o = \Delta X' = \Delta Y' = \frac{1}{\sqrt{2}\beta} \quad (الف-135)$$

$$\Delta V_x = \Delta V_y = \frac{\omega_c}{\sqrt{2}\beta} \quad (ب-135)$$

(بنابراین، حاصلضربهای $\Delta X_o \times \Delta Y_o$ ، $\Delta X' \times \Delta Y'$ ، و $\Delta V_x \times \Delta V_y$ ، کمترین مقادیرشان را می‌گیرند)، و

$$\begin{aligned} \Delta H_{\perp} &= \hbar \omega_c |\alpha_d| \\ \Delta \Theta_z &= 2\hbar |\alpha_d| \\ \Delta \Sigma^z &= \frac{1}{\beta^2} |\alpha_d| \end{aligned} \quad (136)$$

به مانند انحرافات ΔX و ΔY ، می‌توان آنها را با استفاده از فرمول زیر محاسبه کرد

$$|\psi_{\perp}(t)\rangle = e^{-i\omega_c t/2} |\alpha_x\rangle = \frac{\alpha_d e^{-i\omega_c t} + \alpha_g}{\sqrt{2}}, \alpha_y = \frac{i\alpha_d e^{i\omega_c t} - i\alpha_g}{\sqrt{2}} \quad (137)$$

[که $|\alpha_x, \alpha_y\rangle$ با رابطه (۶۶) از مکمل ۴ همین فصل تعریف می‌شود]، و به دست می‌آید

$$\Delta X = \Delta Y = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega_c}} = \frac{1}{\beta\sqrt{2}} \quad (138)$$

ΔP_y و ΔP_x را می‌توان به سهولت به همین طریق به دست آورد).
اگر شرایط

$$|\alpha_d| \gg 1, |\alpha_g| \gg 1 \quad (139)$$

صادق باشند، ملاحظه می‌شود که کمیات مختلف فیزیکی (مکان، سرعت، انرژی، ...) از لحاظ مقدار نسبی، کاملاً معین هستند. پس حالت‌های (۱۳۹)، معرف حالت‌های "شبه کلاسیک" ذره باردار می‌باشند که در یک میدان مغناطیسی یکنواخت قرار داده شده است.

یادداشت:

اگر $\alpha_d = 0$ داریم

$$\begin{cases} \langle H_{\perp} \rangle = \frac{1}{2} \hbar \omega_c \\ \Delta H_{\perp} = 0 \end{cases} \quad (140)$$

پس حالت‌های

$$|\alpha_x, \alpha_y\rangle = -i\alpha_x \quad (141)$$

مربوط به حالت پایه هستند.

مراجع برای مطالعه بیشتر

Landau and Lifshitz (1. 19), chap. XVI, §§124 and 125; Ter Haar (1. 23), chap. 6.

کاربرد در فیزیک حالت جامد:

Mott and Jones (13.7), chap. VI, §6;

Kittel (13. 2), chap. 8, p. 239 and chap. 9, p. 290.

مکمل ۶

تمرینات

۱. دستگاهی با تکانه زاویه‌ای $1 = z$ در نظر بگیرید، که حالت فضایی آن توسط پایه $\{|-1\rangle, |0\rangle, |1\rangle\}$ از سه ویژه بردار مشترک J^2 (ویژه مقدار $2\hbar^2$) و J_z (ویژه مقدار به ترتیب $+\hbar$ ، 0 ، $-\hbar$) ایجاد شده باشد. حالت این دستگاه عبارت است از

$$|\psi\rangle = \alpha |1\rangle + \beta |0\rangle + \gamma |-1\rangle$$

که α ، β ، و γ سه پارامتر مختلط معین هستند.

الف) مقدار میانگین $\langle J \rangle$ تکانه زاویه‌ای را برحسب α ، β ، و γ به دست آورید.

ب) عبارت مربوط به سه مقدار میانگین $\langle J_x^2 \rangle$ ، $\langle J_y^2 \rangle$ ، و $\langle J_z^2 \rangle$ را برحسب همان پارامترها نشان دهید.

۲. یک دستگاه فیزیکی اختیاری در نظر بگیرید که حالت فضایی چهار بعدی آن توسط پایه‌ای از چهار ویژه بردار مشترک J^2 و J_z ($|j, m_z\rangle$ به ازای $j = 0$ یا 1 ؛ $-j \leq m_z \leq +j$) با ویژه مقادیر $\hbar^2 j(j+1)$ و $\hbar m_z$ ایجاد شده است، به طوری که

$$J_{\pm} |j, m_z\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m_z(m_z \pm 1)} |j, m_z \pm 1\rangle$$

$$J_+ |j, j\rangle = J_- |j, -j\rangle = 0$$

الف) برحسب کتهای $|j, m_z\rangle$ ویژه حالت‌های مشترک J^2 و J_x را، که با $|j, m_x\rangle$ مشخص می‌شوند، به دست آورید.

ب) دستگاهی را به حالت بهنجار شده زیر در نظر بگیرید

$$|\psi\rangle = \alpha |j=1, m_z=1\rangle + \beta |j=1, m_z=0\rangle$$

$$+ \gamma |j=1, m_z=-1\rangle + \delta |j=0, m_z=0\rangle$$

(۱) اگر J^2 و J_x همزمان اندازه‌گیری شوند، احتمال یافتن $2\hbar^2$ و \hbar چقدر است؟

(۲) مقدار میانگین J_z را وقتی دستگاه در حالت ψ است محاسبه کنید، همچنین احتمالات نتایج مختلف ممکن یک اندازه‌گیری را که فقط روی این مشاهده‌پذیر انجام شود، به دست آورید.

(۳) همین سؤالات برای مشاهده‌پذیرهای J_x و J_y .

(۴) اکنون J_z^2 اندازه‌گیری شده است؛ نتایج ممکن، احتمالات و مقدار میانگین آنها را تعیین کنید؟

۳. فرض کنید $\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$ تکانه زاویه‌ای دستگاهی باشد که حالت آن \mathcal{E}_x است. روابط جابه‌جایی زیر را ثابت کنید

$$[L_i, R_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} R_k$$

$$[L_i, P_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} P_k$$

$$[L_i, \mathbf{P}^2] = [L_i, \mathbf{R}^2] = [L_i, \mathbf{R} \cdot \mathbf{P}] = 0$$

که L_i, R_j, P_j و P_j معرف مؤلفه‌های اختیاری $\mathbf{L}, \mathbf{R}, \mathbf{P}$ در یک دستگاه متعامد بهنجار هستند، و ε_{ijk} به صورت زیر تعریف می‌شود

$$\varepsilon_{ijk} \begin{cases} = 0 & \text{اگر دو (یا سه) شاخص } i, j, k \text{ مساوی باشند} \\ = 1 & \text{اگر این شاخصها جایگشت زوج } x, y, z \text{ باشند} \\ = -1 & \text{اگر جایگشت فرد باشد} \end{cases}$$

۴. دوران یک مولکول چنداتمی

دستگاهی مرکب از N ذره مختلف در نظر می‌گیریم که در مکانهای $\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_m, \dots, \mathbf{R}_N$ و با تکانه‌های $\mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_m, \dots, \mathbf{P}_N$ باشند. می‌نویسیم

$$\mathbf{J} = \sum_m \mathbf{L}_m$$

با

$$\mathbf{L}_m = \mathbf{R}_m \times \mathbf{P}_m$$

الف) نشان دهید که عملگر \mathbf{J} در روابط جابه‌جایی، که معرف تکانه زاویه‌ای است، صادق است، و از این نتیجه بگیرید که اگر \mathbf{V} و \mathbf{V}' دو بردار معمولی از فضای سه‌بعدی باشند، داریم

$$[\mathbf{J} \cdot \mathbf{V}, \mathbf{J} \cdot \mathbf{V}'] = i\hbar(\mathbf{V} \times \mathbf{V}') \cdot \mathbf{J}$$

ب) جابه‌جاگرهای \mathbf{J} با سه مؤلفه \mathbf{R}_m و سه مؤلفه \mathbf{P}_m را محاسبه کنید. نشان دهید که

$$[\mathbf{J}, \mathbf{R}_m \cdot \mathbf{R}_p] = 0$$

ج) ثابت کنید که

$$[\mathbf{J}, \mathbf{J} \cdot \mathbf{R}_m] = 0$$

و از روی آن نتیجه بگیرید که

$$[\mathbf{J} \cdot \mathbf{R}_m, \mathbf{J} \cdot \mathbf{R}_{m'}] = i\hbar(\mathbf{R}_{m'} \times \mathbf{R}_m) \cdot \mathbf{J} = i\hbar \mathbf{J} \cdot (\mathbf{R}_{m'} \times \mathbf{R}_m)$$

قرار می‌دهیم

$$\mathbf{W} = \sum_m a_m \mathbf{R}_m$$

$$\mathbf{W}' = \sum_m a'_m \mathbf{R}_m$$

که ضرایب a_m و a'_m داده شده‌اند. نشان دهید که

$$[\mathbf{J} \cdot \mathbf{W}, \mathbf{J} \cdot \mathbf{W}'] = -i\hbar(\mathbf{W} \times \mathbf{W}') \cdot \mathbf{J}$$

نتیجه‌گیری: چه تفاوتی بین روابط جابه‌جایی مؤلفه‌های \mathbf{J} در امتداد محورهای ثابت و مؤلفه‌های \mathbf{J} در امتداد محورهای متحرک دستگاه تحت مطالعه وجود دارد؟
 د) مولکولی را در نظر بگیرید که از N اتم غیرهمراستا، که فواصل نسبی آنها ناوردافرض می‌شوند تشکیل شده باشد (یک چرخنده صلب). \mathbf{J} مجموع تکانه‌های زاویه‌ای آنها نسبت به

مرکز جرم مولکول است که در نقطه ثابت O واقع شده است؛ محورهای $Oxyz$ یک چارچوب متعامد هنجار ثابت تشکیل می‌دهند. سه محور اصلی لختی دستگاه را با $O\alpha$, $O\beta$, و $O\gamma$ نشان می‌دهیم، که بیضیوار لختی به فرض، یک بیضیوار دوران حول $O\gamma$ است (یک چرخنده متقارن). بنابراین، انرژی دورانی مولکول عبارت است از

$$H = \frac{1}{2} \left[\frac{J_\gamma^2}{I_{\parallel}} + \frac{J_\alpha^2 + J_\beta^2}{I_{\perp}} \right]$$

که J_α , J_β , و J_γ عبارت‌اند از مؤلفه‌های \vec{J} در امتداد بردارهای واحد w_α , w_β , و w_γ مربوط به محورهای متحرک $O\alpha$, $O\beta$, و $O\gamma$ متصل به مولکول، و I_{\parallel} و I_{\perp} ، گشتاورهای لختی متناظر هستند، تضمین می‌کنیم که

$$J_\alpha^2 + J_\beta^2 + J_\gamma^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 = J^2$$

(۱) روابط جابه‌جایی J_α , J_β , و J_γ را از نتایج (ج) نتیجه بگیرید.

(۲) عملگرهای $N_{\pm} = J_\alpha \pm iJ_\beta$ را معرفی می‌کنیم. با استفاده از استدلالهای کلی این فصل نشان دهید که می‌توان ویژه‌بردارهای مشترک J^2 و J_γ با ویژه‌مقادیر $J(J+1)\hbar^2$ و $K\hbar$ را به دست آورد، که در آن $J, J-1, \dots, 1, -J, -J-1, \dots$.

(۳) هامیلتونی H این چرخنده را برحسب J^2 و J_γ^2 بیان کنید. ویژه‌مقادیرش را به دست آورید.

(۴) نشان دهید که می‌توان ویژه‌حالتهای مشترک J^2 , J_z , و J_γ را که با $|J, M, K\rangle$ نمایش داده می‌شوند [ویژه‌مقادیر متناظر عبارت‌اند از $J(J+1)\hbar^2$, $M\hbar$, و $K\hbar$] پیدا کرد. نشان دهید که این حالتها نیز ویژه‌حالتهای H هستند.

(۵) جابه‌جاگرهای J_{\pm} با J^2 , J_z , و J_γ را محاسبه کنید. از روی آنها عمل J_{\pm} و N_{\pm} روی $|J, M, K\rangle$ را نتیجه بگیرید. نشان دهید که ویژه‌مقادیر H وقتی $K \neq 0$ حداقل واگن مرتبه $2(2J+1)$ هستند و اگر $K = 0$ واگن مرتبه $2J+1$ هستند.

(۶) نمودار انرژی این چرخنده صلب را رسم کنید (J یک عدد صحیح است زیرا \vec{J} مجموع تکانه‌های زاویه‌ای مداری است؛ فصل ۱۰). وقتی $I_{\parallel} = I_{\perp}$ (چرخنده کروی) در این نمودار چه روی می‌دهد؟

۵. برای تابع موج دستگامی که فضای حالت آن \mathcal{E}_r است داریم

$$\psi(x, y, z) = N(x + y + z)e^{-r/\alpha}$$

که α یک ثابت حقیقی است و N ثابت بهنجارش است.

الف) مشاهده پذیرهای L_z و L^2 اندازه گیری می شوند؛ احتمالات یافتن 0 و $2\hbar^2$ چیست؟ متذکر می شویم که

$$Y_1^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

ب) اگر از این واقعیت نیز استفاده کنیم که

$$Y_1^{\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$$

آیا امکان دارد که به طور مستقیم احتمالات تمام نتایج ممکن اندازه گیریهای L_z و L^2 را برای این دستگاه پیش بینی کنیم؟

۶. دستگاهی با تکانه زاویه ای $l = 1$ در نظر می گیریم. پایه ای از فضای حالتش با سه ویژه بردار L_z یعنی $|+1\rangle$ ، $|0\rangle$ ، و $| -1\rangle$ تشکیل می شود، که ویژه مقادیرشان به ترتیب $+\hbar$ ، 0 ، و $-\hbar$ هستند، و در روابط زیر صادق اند

$$L_{\pm} |m\rangle = \hbar \sqrt{2} |m \pm 1\rangle$$

$$L_+ |1\rangle = L_- | -1\rangle = 0$$

این دستگاه، که دارای گشتاور چهارقطبی الکتریکی است، در یک میدان الکتریکی غیریکنواخت قرار دارد، به طوری که می توان هامیلتونی آن را به صورت زیر نوشت

$$H = \frac{\omega_0}{\hbar} (L_u^2 - L_v^2)$$

که L_u و L_v مؤلفه های L در امتداد دو جهت Ou و Ov از سطح xOz هستند که تشکیل زوایای 45° نسبت به Ox و Oz می دهند؛ ω_0 یک ثابت حقیقی است.

الف) ماتریسی بنویسید که H را در پایه $\{|+1\rangle, |0\rangle, |-1\rangle\}$ نمایش دهد. حالت های پایدار دستگاه چه هستند و انرژی آنها چیست؟ (این حالتها را با $|E_1\rangle$ ، $|E_2\rangle$ ، و $|E_3\rangle$ نمایش می دهیم، که $E_1 < E_2 < E_3$).

ب) در لحظه $t = 0$ ، دستگاه به حالت زیر است

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+1\rangle - |-1\rangle]$$

بردار حالت $|\psi(t)\rangle$ در لحظه t چیست؟ در لحظه t ، L_z اندازه‌گیری می‌شود؛ احتمالات نتایج ممکن مختلف چه هستند؟

ج) مقادیر میانگین $\langle L_x \rangle(t)$ ، $\langle L_y \rangle(t)$ ، و $\langle L_z \rangle(t)$ در لحظه t را محاسبه کنید. بردار $\langle L \rangle$ چه حرکتی انجام می‌دهد؟

د) در لحظه t ، اندازه‌گیری L_z انجام می‌شود.

(۱) آیا لحظاتی وجود دارند که فقط یک نتیجه ممکن باشد؟

(۲) فرض می‌کنیم که این اندازه‌گیری نتیجه \hbar^2 بدهد. حالت دستگاه بلافاصله بعد از اندازه‌گیری چیست؟ بدون محاسبه، تحول بعدی آن را نشان دهید.

۷. دورانهایی در فضای سه‌بعدی معمولی در نظر می‌گیریم که با $\mathcal{R}_u(\alpha)$ مشخص می‌شوند، که در آن u بردار واحدی است که معرف محور دوران است و α زاویه دوران است.

الف) نشان دهید که، اگر M' تبدیل M تحت یک دوران بینهایت کوچک به زاویه ε باشد،

داریم

$$OM' = OM + \varepsilon u \times OM$$

ب) اگر OM با بردار ستونی $\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$ نمایش داده شود، ماتریس وابسته به $\mathcal{R}_u(\varepsilon)$ چیست؟

از روی آن ماتریسهایی به دست آورید که نمایشگر مؤلفه‌های عملگر M هستند که به صورت زیر تعریف می‌شود

$$\mathcal{R}_u(\varepsilon) = 1 + \varepsilon M \cdot u$$

ج) جابه‌جاگرهای زیر را محاسبه کنید

$$[M_x, M_y]; [M_y, M_z]; [M_z, M_x]$$

مشابه‌های کوانتوم مکانیکی روابط صرفاً هندسی به دست آمده چه هستند؟

د) با شروع از ماتریس نمایش \mathcal{M}_z ، ماتریس نمایش $e^{\alpha \mathcal{M}_z}$ را محاسبه کنید؛ نشان دهید که $\mathcal{R}_z(\alpha) = e^{\alpha \mathcal{M}_z}$ ؛ مشابه این رابطه در مکانیک کوانتومی چیست؟

۹. ذره‌ای در فضای سه‌بعدی در نظر می‌گیریم، که بردار حالتش $|\psi\rangle$ و تابع موجش $\psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle$ است. به فرض A مشاهده‌پذیری باشد که با $\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$ ، تکانه زاویه‌ای مداری ذره، جابه‌جاپذیر باشد. فرض می‌کنیم که A ، L_z و L^2 تشکیل یک مجموعه کامل مشاهده‌پذیر جابه‌جایی‌پذیر در \mathcal{E}_τ بدهند، و ویژه‌کتهای مشترک آنها را $|n, l, m\rangle$ می‌نامیم، که ویژه‌مقادیرشان به ترتیب a_n (شاخص n به فرض گسسته است)، $l(l+1)\hbar^2$ و $m\hbar$ هستند. به فرض $U(\varphi)$ عملگر یکانی‌ای است که با

$$U(\varphi) = e^{-i\varphi L_z / \hbar}$$

تعریف می‌شود، که φ یک پارامتر بدون بُعد حقیقی است. برای یک عملگر اختیاری K ، فرض می‌کنیم \tilde{K} تبدیل K توسط عملگر یکانی $U(\varphi)$ باشد

$$\tilde{K} = U(\varphi) K U^\dagger(\varphi)$$

الف) فرار می‌دهیم $L_+ = L_x + iL_y$ ، $L_- = L_x - iL_y$. عبارت $\tilde{L}_+ |n, l, m\rangle$ را محاسبه کنید و نشان دهید که L_+ و \tilde{L}_+ متناسب هستند؛ ثابت تناسب را محاسبه کنید. همین سؤال را برای L_- و \tilde{L}_- جواب دهید.

ب) \tilde{L}_x ، \tilde{L}_y و \tilde{L}_z را برحسب L_x ، L_y و L_z بیان کنید. چه تبدیل هندسی را می‌توان به تبدیل $\tilde{\mathbf{L}}$ به \mathbf{L} وابسته کرد؟

ج) جابه‌جاگرهای $[X \pm iY, L_z]$ و $[Z, L_z]$ را محاسبه کنید. نشان دهید که کتهای $|n, l, m\rangle |X \pm iY\rangle$ و $|n, l, m\rangle Z$ ویژه‌بردارهای L_z هستند و ویژه‌مقادیرشان را محاسبه کنید. چه رابطه‌ای باید بین m و m' موجود باشد تا عنصر ماتریسی $\langle n', l', m' | X \pm iY | n, l, m \rangle$ غیرصفر باشد؟ همین سؤال برای $\langle n', l', m' | Z | n, l, m \rangle$ جواب داده شود.

د) از مقایسه عناصر ماتریسی $\tilde{X} \pm i\tilde{Y}$ و \tilde{Z} با عناصر $X \pm iY$ و Z ، مطلوب است محاسبه \tilde{X} ، \tilde{Y} و \tilde{Z} برحسب X ، Y و Z . یک تعبیر هندسی بدهید.

۹. یک دستگاه فیزیکی با تکانه زاویه‌ای ثابت l در نظر می‌گیریم، که فضای حالت آن \mathcal{E}_l و بردار حالتش $|\psi\rangle$ است؛ تکانه زاویه‌ای مداری آن را با \mathbf{L} نمایش می‌دهیم. فرض می‌کنیم که پایه‌ای در \mathcal{E}_l از $(2l+1)$ ویژه‌بردار $|l, m\rangle$ متعلق به L_z ($-l \leq m \leq +l$) ترکیب یافته باشد، که

L را مقدار میانگین $\langle L \rangle = \langle \psi | L | \psi \rangle$ تابع موجهای وابسته به آنها هستند. می‌نامیم.

الف) با این فرض شروع می‌کنیم که

$$\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$$

در میان کدامیک از تمام حالت‌های ممکن دستگاه، مجموع $(\Delta L_x)^2 + (\Delta L_y)^2 + (\Delta L_z)^2$ مینیموم است؟ نشان دهید که، برای این حالتها، انحراف ریشه میانگین مربعی ΔL_α برای مؤلفه L در امتداد محوری که به زاویه α با محور Oz باشد، از رابطه زیر به دست می‌آید

$$\Delta L_\alpha = \hbar \sqrt{\frac{l}{Y}} \sin \alpha$$

ب) حال فرض می‌کنیم که $\langle L \rangle$ یک جهت اختیاری نسبت به محورهای $Oxyz$ داشته باشد. $OXYZ$ را چارچوبی در نظر می‌گیریم که محور OZ آن در امتداد $\langle L \rangle$ و محور OY آن در سطح xOy باشد.

(۱) نشان دهید که حالت $|\psi_0\rangle$ دستگاه که برای آن $(\Delta L_x)^2 + (\Delta L_y)^2 + (\Delta L_z)^2$ مینیموم است طوری است که

$$(L_x + iL_y) |\psi_0\rangle = 0$$

$$L_z |\psi_0\rangle = l\hbar |\psi_0\rangle$$

(۲) اگر θ_0 زاویه بین Oz و OZ ، و φ_0 زاویه بین Oy و OY باشد، روابط زیر را ثابت کنید

$$L_x + iL_y = \cos^2 \frac{\theta_0}{Y} e^{-i\varphi_0} L_+ - \sin^2 \frac{\theta_0}{Y} e^{i\varphi_0} L_- - \sin \theta_0 L_z$$

$$L_z = \sin \frac{\theta_0}{Y} \cos \frac{\theta_0}{Y} e^{i\varphi_0} L_+ + \sin \frac{\theta_0}{Y} \cos \frac{\theta_0}{Y} e^{-i\varphi_0} L_- + \cos \theta_0 L_z$$

اگر قرار دهیم

$$|\psi_0\rangle = \sum_m d_m |l, m\rangle$$

$$d_m = \tan \frac{\theta_0}{\gamma} e^{i\varphi_0} \sqrt{\frac{l+m+1}{l-m}} d_{m+1}$$

d_m را برحسب d_l ، θ_0 ، φ_0 ، و l بیان کنید.

(۳) برای محاسبه d_l ، نشان دهید که تابع موج وابسته به $\langle \psi_0 |$ عبارت است از موج وابسته به $|l, l\rangle$ عبارت است از $c_l (x + iy)^l / r^l f(r)$ با گذاردن مقادیر X ، Y ، و Z برحسب x ، y ، و z در عبارت $\psi_0(X, Y, Z)$ ، مقدار d_l و رابطه زیر را پیدا کنید

$$d_m = \left(\sin \frac{\theta_0}{\gamma} \right)^{l-m} \left(\cos \frac{\theta_0}{\gamma} \right)^{l+m} e^{-im\varphi_0} \sqrt{\frac{(2l)!}{(l+m)!(l-m)!}}$$

(۴) وقتی دستگاه به حالت $\langle \psi_0 |$ است، L_z اندازه گرفته می شود. احتمالات نتایج ممکن مختلف چه هستند؟ محتملترین نتیجه چیست؟ نشان دهید که، اگر l خیلی بیشتر از ۱ باشد، نتایج با حد کلاسیک منطبق اند.

۱۰. فرض کنید \mathcal{J} عملگر تکانه زاویه ای یک دستگاه فیزیکی اختیاری باشد که بردار حالتش $\langle \psi |$ است.

الف) آیا حالتی از دستگاه را می توان یافت که برای آنها انحرافات ریشه میانگین مربعی ΔJ_x ، ΔJ_y ، و ΔJ_z همزمان صفر باشند؟

ب) رابطه زیر و همچنین روابط به دست آمده از جایگشت چرخه ای x, y, z را ثابت کنید

$$\Delta J_x \times \Delta J_y \geq \frac{\hbar}{\gamma} | \langle J_z \rangle |$$

فرض کنید $\langle \mathcal{J} \rangle$ مقدار میانگین تکانه زاویه ای دستگاه باشد. محورهای $Oxyz$ به فرض طوری انتخاب می شوند که $\langle J_x \rangle = \langle J_y \rangle = 0$ شود. نشان دهید که

$$(\Delta J_x)^2 + (\Delta J_y)^2 \geq \hbar | \langle J_z \rangle |$$

ج) نشان دهید که دو نامساوی ثابت شده در قسمت (ب) تبدیل به تساوی می شوند اگر و تنها اگر $\langle \psi | J_+ = 0$ یا $\langle \psi | J_- = 0$.

(د) دستگاه تحت بررسی، یک ذره بدون اسپین است که برای آن $\mathbf{J} = \mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$ نشان دهید که غیرممکن است دو رابطه $|\langle L_z \rangle| = \hbar/2$ و $\Delta L_x \Delta L_y = \hbar/2$ با هم برقرار باشند مگر آنکه تابع موج دستگاه به شکل زیر باشد

$$\psi(r, \theta, \varphi) = F(r, \sin \theta e^{\pm i\varphi})$$

۱۱. یک نوسانگر هماهنگ سه بعدی در نظر می‌گیریم که بردار حالت $|\psi\rangle$ آن به صورت زیر است

$$|\psi\rangle = |\alpha_x\rangle \otimes |\alpha_y\rangle \otimes |\alpha_z\rangle$$

که $|\alpha_x\rangle, |\alpha_y\rangle, |\alpha_z\rangle$ و حالت‌های شبه کلاسیکی (مکمل ۷ فصل ۵) برای نوسانگرهای هماهنگ یک بعدی هستند که به ترتیب در امتداد Ox, Oy, Oz حرکت می‌کنند. فرض کنید $\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$ نکانه زاویه‌ای مداری نوسانگر سه بعدی باشد. الف) ثابت کنید که

$$\langle L_z \rangle = i\hbar(\alpha_x \alpha_y^* - \alpha_x^* \alpha_y)$$

$$\Delta L_z = \hbar \sqrt{|\alpha_x|^2 + |\alpha_y|^2}$$

همچنین عبارتهای مشابهی برای مؤلفه‌های L_x در امتداد Ox و Oy به دست آورید. ب) حال فرض می‌کنیم که

$$\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0, \quad \langle L_z \rangle = \lambda \hbar > 0$$

نشان دهید که α_z باید صفر باشد. اکنون مقدار λ را ثابت می‌گیریم. نشان دهید، برای اینکه $\Delta L_x + \Delta L_y$ مینیموم باشند، باید انتخاب زیر صورت گیرد

$$\alpha_x = -i\alpha_y = \sqrt{\frac{\lambda}{2}} e^{i\varphi}$$

(که φ یک عدد حقیقی اختیاری است). آیا عبارتهای $\Delta L_x \times \Delta L_y$ و $(\Delta L_x)^2 + (\Delta L_y)^2$ در این مورد مقادیر مینیمومی دارند که با نامساویهای به دست آمده در قسمت (ب) تمرین قبلی سازگار باشند؟

ج) نشان دهید حالت دستگاهی که برای آن شرایط قبلی صادق باشند لزوماً به شکل زیرند

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k(\alpha_d) |\chi_{n_d=k, n_y=0, n_x=0}\rangle$$

با

$$|\chi_{n_d=k, n_y=0, n_x=0}\rangle = \frac{(a_x^\dagger + ia_y^\dagger)^k}{\sqrt{2^k k!}} |\varphi_{n_x=0, n_y=0, n_z=0}\rangle$$

$$c_k(\alpha) = \frac{\alpha^k}{\sqrt{k!}} e^{-|\alpha|^2/2}; \quad \alpha_d = e^{i\varphi_0} \sqrt{\lambda}$$

از نتایج مکمل ۷ فصل ۵ و بخش ۴ از مکمل ۴ همین فصل می‌توانید استفاده کنید). نشان دهید که بستگی زاویه‌ای $|\chi_{n_d=k, n_y=0, n_x=0}\rangle$ به صورت $(\sin \theta e^{i\varphi})^k$ است.

L^2 روی دستگاهی به حالت $|\psi\rangle$ اندازه‌گیری می‌شود. نشان دهید که احتمالات نتایج مختلف ممکن با توزیع پواسون داده می‌شوند. از اندازه‌گیری L_z به دنبال اندازه‌گیری L^2 که نتیجه آن $l(l+1)\hbar^2$ بوده است، چه نتایجی می‌توانند به دست آیند؟

مراجع

تمرین ۴ کتابهای زیر را ببینید

Landau and Lifshitz (1.19), §101; Ter Haar (1.23), §§8.13 and 8.14.



ذره در پتانسیل مرکزی. اتم هیدروژن

۱-۱-۷ طرح کلی مسئله	۱-۷ حالت‌های مانای یک ذره در پتانسیل مرکزی
الف) مروری بر برخی نتایج کلاسیک	
ب) هامیلتونی مکانیک کوانتومی	
۲-۱-۷ جداسازی متغیرها	
الف) بستگی زاویه‌ای ویژه‌تابعها	
ب) معادله شعاعی	
ج) رفتار جوابهای معادله شعاعی در مبدأ	
۳-۱-۷ حالت‌های مانای یک ذره در پتانسیل مرکزی	
الف) اعداد کوانتومی	
ب) واگنی ترازهای انرژی	

۱-۲-۷ حرکت مرکز جرم و حرکت نسبی در مکانیک کلاسیک	۲-۷ حرکت مرکز جرم و حرکت نسبی برای دستگاهی از دو ذره برهم‌کنش‌دار
۲-۲-۷ جداسازی متغیرها در مکانیک کوانتومی	
الف) مشاهده‌پذیرهای وابسته به مرکز جرم و ذره نسبی	
ب) ویژه‌مقادیر و ویژه‌تابعهای هامیلتونی	

۱-۳-۷ مقدمه	۳-۷ اتم هیدروژن
۲-۳-۷ مدل بور	
۳-۳-۷ نظریه مکانیک کوانتومی اتم هیدروژن	
الف) تعویض متغیرها	
ب) حل معادله شعاعی	
ج) کوانتس انرژی. توابع شعاعی	
۴-۳-۷ بحث نتایج	
الف) مرتبه بزرگی پارامترهای اتمی	
ب) ترازهای انرژی	
ج) تابع موجها	

در این فصل، خواص کوانتوم مکانیکی ذره واقع در یک پتانسیل مرکزی را در نظر می‌گیریم [یعنی، پتانسیل $V(r)$ ای که فقط به فاصله r از مبدأ بستگی دارد]. این مسئله رابطه نزدیکی با مطالعه تکانه زاویه‌ای که در فصل قبل ارائه شد دارد. همان‌طور که در بخش ۷-۱ خواهیم دید، این واقعیت که $V(r)$ تحت هر دورانی حول مبدأ ناورداست می‌رساند که هامیلتون H ذره با سه مؤلفه عملگر تکانه زاویه‌ای مداری L جابه‌جاپذیر است. این امر به‌طور قابل ملاحظه‌ای تعیین ویژه‌تابعها و ویژه‌مقدارهای H را ساده می‌کند، زیرا می‌توان این توابع را طوری در نظر گرفت که ویژه‌تابعهای L^2 و L_z نیز باشند. از این‌رو، بستگی زاویه‌ای آنها سریعاً تعریف می‌شود و معادله ویژه‌مقدار H می‌تواند توسط یک معادله دیفرانسیل شامل تنها متغیر r جانشین شود.

اهمیت این مسئله از خاصیتی ناشی می‌شود که در بخش ۷-۲ اثبات می‌کنیم: یک دستگاه دو ذره‌ای را، که در آن برهم‌کنش با انرژی پتانسیلی توصیف می‌شود که فقط به مکانهای نسبی آنها بستگی دارد، می‌توان تبدیل به مسئله ساده‌تری کرد که شامل فقط یک ذره فرضی است. به‌علاوه، وقتی پتانسیل برهم‌کنش دو ذره فقط بستگی به فاصله بین آنها دارد حرکت این ذره فرضی از یک پتانسیل مرکزی تبعیت می‌کند. این امر توضیح می‌دهد چرا مسئله مورد نظر در این فصل از چنین اهمیت جامعی برخوردار است: با این مورد در مکانیک کوانتومی، هرگاه رفتار یک دستگاه منفرد مرکب از دو ذره برهم‌کنش‌دار مورد بررسی باشد، مواجه می‌شویم.

در بخش ۷-۳، روشهای عمومی که تاکنون توصیف شده‌اند را در یک مورد ویژه به‌کار خواهیم برد: موردی که $V(r)$ یک پتانسیل کولتی است. اتم هیدروژن، که از یک الکترون و یک پروتون که به‌طور الکتروستاتیک یکدیگر را جذب می‌کنند تشکیل شده است، ساده‌ترین نمونه از دستگاهی از این نوع را به‌دست می‌دهد. این تنها نمونه نیست: علاوه بر ایزوتوپهای هیدروژن (دوتریم، تریتم)، یونهای هیدروژن‌گونه‌ای وجود دارند که دستگاههایی مرکب از یک الکترون منفرد و یک هسته‌اند، نظیر یونهای He^+ ، Li^{++} ، و غیره. (نمونه‌های دیگر در مکمل ۱ این فصل داده خواهند شد). برای این دستگاهها، به‌طور مفصل انرژیهای حالتیهای مقید و ویژه‌تابعهای متناظر آن‌را محاسبه خواهیم کرد. همچنین این واقعیت را متذکر می‌شویم که، از نظر تاریخی، مکانیک کوانتومی برای توضیح خواص اتمی‌ای معرفی شد (به‌ویژه، خواص ساده‌ترین اتم، یعنی هیدروژن)، که مکانیک کلاسیک نمی‌توانست آنها را توضیح دهد. سازگاری قابل ملاحظه بین پیش‌بینیهای نظری و مشاهدات تجربی، متضمن یکی از چشمگیرترین موفقیت‌های این شاخه از فیزیک است. بالاخره، باید متذکر شویم که نتایج دقیق مربوط به اتم هیدروژن به‌عنوان پایه تمام محاسبات تقریبی در ارتباط با اتمهای پیچیده‌تر (دارای الکترونهای متعدد) به‌کار می‌رود.

۱-۷ حالت‌های مانای یک ذره در پتانسیل مرکزی

در این بخش، یک ذره (بدون اسپین) به جرم μ را در نظر می‌گیریم که تحت نیروی مرکزی حاصل از پتانسیل $V(r)$ باشد (مرکز نیرو به عنوان مبدأ انتخاب می‌شود).

۱-۱-۷ طرح کلی مسئله

الف) مروری بر برخی نتایج کلاسیک

نیروی وارد بر ذره کلاسیک مستقر در نقطه M (با $OM = r$) برابر است با

$$\mathbf{F} = -\nabla V(r) = -\frac{dV}{dr} \frac{\mathbf{r}}{r} \quad (1-7)$$

بنابراین، جهت \mathbf{F} همیشه به سمت O است و از این رو گشتاور آن نسبت به این نقطه همیشه صفر است. اگر

$$\mathcal{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (2-7)$$

تکانه زاویه‌ای ذره نسبت به O باشد، پس قضیهٔ تکانهٔ زاویه‌ای می‌رساند که

$$\frac{d\mathcal{L}}{dt} = 0 \quad (3-7)$$

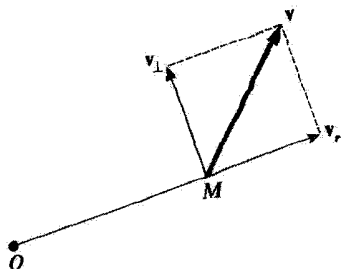
بنابراین \mathcal{L} یک ثابت حرکت است، و از این رو مسیر ذره لزوماً در صفحه‌ای که از O می‌گذرد و عمود بر \mathcal{L} است واقع می‌شود.

حال، مکان (که با $OM = r$ مشخص می‌شود) و سرعت \mathbf{v} ذره را در لحظهٔ t در نظر بگیرید (شکل ۱-۷). دو بردار \mathbf{r} و \mathbf{v} در صفحهٔ مسیر قرار دارند و سرعت \mathbf{v} می‌تواند به مؤلفهٔ شعاعی v_r (در امتداد محور منطبق بر \mathbf{r}) و مؤلفهٔ مماسی v_\perp (در امتداد محور عمود بر \mathbf{r}) تجزیه شود. سرعت شعاعی، مقدار جبری v_r ، مشتق زمانی فاصلهٔ ذره از نقطهٔ O است:

$$v_r = \frac{dr}{dt} \quad (4-7)$$

سرعت مماسی را می‌توان برحسب r و تکانهٔ زاویه‌ای \mathcal{L} بیان کرد، زیرا

$$|\mathbf{r} \times \mathbf{v}| = r |v_\perp| \quad (5-7)$$



شکل ۷-۱. مؤلفه شعاعی v_r و مؤلفه مماسی v_{\perp} سرعت یک ذره.

به طوری که قدرمطلق تکانه زاویه‌ای \mathcal{L} برابر می‌شود با

$$|\mathcal{L}| = |\mathbf{r} \times \mu \mathbf{v}| = \mu r |v_{\perp}| \quad (6-7)$$

پس انرژی کل ذره

$$E = \frac{1}{2} \mu v^2 + V(r) = \frac{1}{2} \mu v_r^2 + \frac{1}{2} \mu v_{\perp}^2 + V(r) \quad (7-7)$$

را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$E = \frac{1}{2} \mu v_r^2 + \frac{\mathcal{L}^2}{2\mu r^2} + V(r) \quad (8-7)$$

همایلتونی کلاسیک دست‌گام می‌شود

$$\mathcal{H} = \frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{\mathcal{L}^2}{2\mu r^2} + V(r) \quad (9-7)$$

که

$$p_r = \mu \frac{dr}{dt} \quad (10-7)$$

تکانه مزدوج r است و \mathcal{L}^2 باید بر حسب متغیرهای r, θ, φ و تکانه‌های مزدوج p_r, p_{θ} و p_{φ} بیان شود. می‌توان نوشت (پیوست ۳ بخش ۴-الف):

$$\mathcal{L}^2 = p_{\theta}^2 + \frac{1}{\sin^2 \theta} p_{\varphi}^2 \quad (11-7)$$

در عبارت (۷-۹)، انرژی جنبشی به دو جمله تجزیه شده است: انرژی جنبشی شعاعی و انرژی جنبشی دوران حول نقطه O . علت آن است که، چون در این مورد $V(r)$ مستقل از θ و φ است، متغیرهای زاویه‌ای و تکانه‌های مزدوج آنها فقط در جمله \mathcal{L}^2 ظاهر می‌شوند. در واقع، اگر تحول r مورد نظر باشد می‌توانیم از این واقعیت استفاده کنیم که \mathcal{L} ثابت حرکت است، و به جای \mathcal{L}^2 ، یک عدد ثابت در عبارت (۷-۹) قرار می‌دهیم. بنابراین هامیلتونی \mathcal{H} به صورت تابعی فقط از متغیرهای شعاعی r و p_r ظاهر می‌شود (\mathcal{L}^2 به منزله یک پارامتر است)، و نتیجه یک معادله دیفرانسیل شامل فقط متغیر r است

$$\frac{dp_r}{dt} = \mu \frac{d^2 r}{dt^2} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial r} = \frac{\mathcal{L}^2}{\mu r^3} - \frac{dV}{dr} \quad (12-7)$$

این درست مانند این است که یک مسئله یک‌بعدی داشته باشیم (با r که فقط بین 0 و $+\infty$ تغییر می‌کند)، با یک ذره به جرم μ تحت "پتانسیل مؤثر"

$$V_{\text{مؤثر}}(r) = V(r) + \frac{\mathcal{L}^2}{2\mu r^2} \quad (13-7)$$

خواهیم دید که در مکانیک کوانتومی وضعیت مشابهی وجود دارد.

ب) هامیلتونی مکانیک کوانتومی

در مکانیک کوانتومی، می‌خواهیم معادله ویژه‌مقدار هامیلتونی H ، مشاهده‌پذیر وابسته به انرژی کل، را حل کنیم. این معادله، در نمایش $\{ |r\rangle \}$ ، به صورت زیر نوشته می‌شود

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(r) \right] \varphi(r) = E\varphi(r) \quad (14-7)$$

چون پتانسیل V فقط به فاصله r ذره از مبدأ بستگی دارد، مختصات کروی (قسمت الف بخش ۶-۴-۱ فصل ۶) به بهترین وجه با مسئله سازگار است. بنابراین لاپلاسی Δ را در مختصات کروی بیان می‌کنیم^۱

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r} \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \quad (15-7)$$

۱. عبارت (۱۵-۷)، لاپلاسی را فقط برای r غیرصفر می‌دهد. این به علت موقعیت ممتاز مبدأ در مختصات کروی است؛ به علاوه می‌توان دید که عبارت (۱۵-۷) برای $r = 0$ تعریف نمی‌شود.

و ویژه‌تابع‌های $\varphi(\mathbf{r})$ را که توابعی از متغیرهای r, θ, φ هستند جستجو می‌کنیم. اگر عبارت (۱۵-۷) را با عبارت عملگر L^2 [فرمول (۶-۷۷ الف) فصل ۶] مقایسه کنیم، ملاحظه می‌کنیم که هامیلتونی مکانیک کوانتومی H را می‌توان به شکل کاملاً مشابه (۹-۷) نوشت

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{2\mu r^2} L^2 + V(r) \quad (۱۶-۷)$$

بستگی زاویه‌ای هامیلتونی تماماً در جمله L^2 که در اینجا یک عملگر است، وجود دارد. در واقع، می‌توانیم این شباهت را با تعریف یک عملگر P_r کامل کنیم، و اولین جمله (۱۶-۷) را به مانند جمله اول (۹-۷) بنویسیم.

حال نشان خواهیم داد که چگونه می‌توان معادله ویژه مقدار زیر را حل کرد

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{2\mu r^2} L^2 + V(r) \right] \varphi(r, \theta, \varphi) = E\varphi(r, \theta, \varphi) \quad (۱۷-۷)$$

۷-۱-۲ جداسازی متغیرها

الف) بستگی زاویه‌ای ویژه‌تابعها

می‌دانیم که [فرمول (۶-۸۱) فصل ۶] سه مؤلفه عملگر تکانه زاویه‌ای L فقط روی متغیرهای زاویه‌ای θ و φ عمل می‌کنند؛ در نتیجه، با تمام عملگرهایی که فقط روی بستگی به r عمل می‌کنند، جابه‌جاپذیرند. به علاوه، با L^2 جابه‌جاپذیرند. بنابراین، بر طبق عبارت (۶-۷) برای هامیلتونی، سه مؤلفه L ثابت حرکت هستند^۱ (به مفهوم مکانیک کوانتومی)

$$[H, L] = 0 \quad (۱۸-۷)$$

به وضوح، H با L^2 جابه‌جاپذیر است.

اگر چه چهار ثابت حرکت (L_x, L_y, L_z و L^2) در اختیار داریم نمی‌توانیم از تمام چهارتای آنها در حل معادله (۱۷-۷) استفاده کنیم، زیرا با یکدیگر جابه‌جاپذیر نیستند؛ فقط می‌توانیم L^2 و L_z را به کار ببریم. چون سه مشاهده‌پذیر H, L^2 و L_z جابه‌جاپذیرند، می‌توانیم پایه‌ای از فضای حالت \mathcal{H} ذره پیدا کنیم که مرکب از ویژه‌تابع‌های مشترک این سه مشاهده‌پذیر باشد. بنابراین، می‌توانیم بدون آنکه در تعمیم مسئله مطرح شده در بخش ۱ محدودیتی قائل شویم، بخواهیم که

۱. معادله (۱۸-۷) این واقعیت را می‌رساند که H نسبت به دورانهای حول نقطه O یک عملگر نرده‌ای است (مکمل فصل ۶). این واقعیت دارد زیرا انرژی پتانسیل تحت دورانهای حول O ناورداست.

توابع $\varphi(r, \theta, \varphi)$ یعنی جوابهای معادله (۱۷-۷)، ویژه‌تابعهای L_z و L^2 نیز باشند. بنابراین باید دستگاه معادلات دیفرانسیل زیر را حل کنیم

$$H\varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}) \quad (۱۹-۷ \text{ الف})$$

$$L^2\varphi(\mathbf{r}) = l(l+1)\hbar^2\varphi(\mathbf{r}) \quad (۱۹-۷ \text{ ب})$$

$$L_z\varphi(\mathbf{r}) = m\hbar\varphi(\mathbf{r}) \quad (۱۹-۷ \text{ ج})$$

اما تاکنون شکل عمومی ویژه‌تابعهای مشترک L_z و L^2 را شناخته‌ایم (فصل ۶، قسمت ب-۲ بخش ۴-۶-۱) جوابهای $\varphi(\mathbf{r})$ معادلات (۱۹-۷)، متناظر با مقادیر ثابت l و m ، لزوماً برابر حاصلضرب تابع r به‌تنهایی و هماهنگهای کروی $Y_l^m(\theta, \varphi)$ هستند

$$\varphi(\mathbf{r}) = R(r)Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (۲۰-۷)$$

$R(r)$ هرچه که باشد $\varphi(\mathbf{r})$ جواب معادلات (۱۹-۷ ب) و (۱۹-۷ ج) است. پس تنها مسئله‌ای که باقی می‌ماند، چگونگی تعیین $R(r)$ است به‌طوری که $\varphi(\mathbf{r})$ ویژه‌تابع H [معادله (۱۹-۷ الف)] نیز باشد.

ب) معادله شعاعی

حال عبارتهای (۱۶-۷) و (۲۰-۷) را در معادله (۱۹-۷ الف) قرار می‌دهیم. چون $\varphi(\mathbf{r})$ ویژه‌تابع L^2 با ویژه‌مقدار $l(l+1)\hbar^2$ است، ملاحظه می‌کنیم که $Y_l^m(\theta, \varphi)$ یک عامل مشترک در دو طرف است. پس از ساده‌کردن، معادله شعاعی به‌دست می‌آید

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] R(r) = E R(r) \quad (۲۱-۷)$$

در واقع، اگر جواب (۲۱-۷) را در (۲۰-۷) بگذاریم، لزوماً جواب معادله ویژه‌مقدار هامیلتونی (۱۴-۷) به‌دست نمی‌آید. همان‌طور که قبلاً متذکر شدیم (پانوشت صفحه ۵۲۴) عبارت لاپلاسی (۱۵-۷) لزوماً در $r=0$ معتبر نیست. بنابراین باید مطمئن شویم که رفتار جوابهای $R(r)$ از (۲۱-۷) در مبدأ به‌قدر کافی منظم است تا (۲۰-۷) واقعاً جواب (۱۴-۷) باشد.

به‌جای حل معادله دیفرانسیل جزئی (۱۷-۷) برحسب سه متغیر r ، θ ، و φ ، باید اکنون یک معادله دیفرانسیل شامل فقط متغیر r ، ولی وابسته به پارامتر l ، حل کنیم: ویژه‌مقادیر و ویژه‌توابع عملگر H_l را جستجو می‌کنیم که برای هر مقدار از l متفاوت است.

به بیان دیگر، به طور مجزا، در فضای حالت \mathcal{E}_r ، زیرفضاهای $\mathcal{E}(l, m)$ متناظر با مقادیر ثابت l و m (فصل ۶، بخش ۳-۳-۳ الف) را در نظر می‌گیریم و معادله ویژه مقدار H را در هر کدام از این زیرفضاها مطالعه می‌کنیم (که امکانپذیر است زیرا H با L^2 و L_z جابه‌جاپذیر است). معادله‌ای که باید حل شود بستگی به l دارد اما بستگی به m ندارد؛ بنابراین در $(2l+1)$ زیرفضای $\mathcal{E}(l, m)$ وابسته به یک مقدار معین l ، یکسان است. ویژه‌مقادیر H_1 ، یعنی، ویژه‌مقادیر هامیلتونی H داخل یک زیرفضای معین $\mathcal{E}(l, m)$ ، را با $E_{k,l}$ نشان می‌دهیم. شاخص k ، که می‌تواند گسسته یا پیوسته باشد، بیانگر ویژه‌مقدارهای مختلف وابسته به یک مقدار l است. راجع به ویژه‌تابعهای H_1 ، آنها را با همان دو شاخص مربوط به ویژه‌مقدارها مشخص می‌کنیم: $R_{k,l}(r)$. واضح نیست که این کار کافی باشد؛ تابعهای شعاعی متعددی ممکن است وجود داشته باشند که ویژه‌تابعهای یک عملگر H_1 با همان ویژه‌مقدار $E_{k,l}$ باشند؛ در بخش ۳-ب خواهیم دید که این طور نیست، و در نتیجه، دو شاخص k و l برای مشخص کردن تابعهای شعاعی مختلف کافی هستند. بنابراین، معادله (۲۱-۷) را به شکل زیر مجدداً می‌نویسیم

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] R_{k,l}(r) = E_{k,l} R_{k,l}(r) \quad (22-7)$$

می‌توانیم عملگر دیفرانسیلی تحت مطالعه را با تغییری در تابعها ساده کنیم. قرار می‌دهیم

$$R_{k,l}(r) = \frac{1}{r} u_{k,l}(r) \quad (23-7)$$

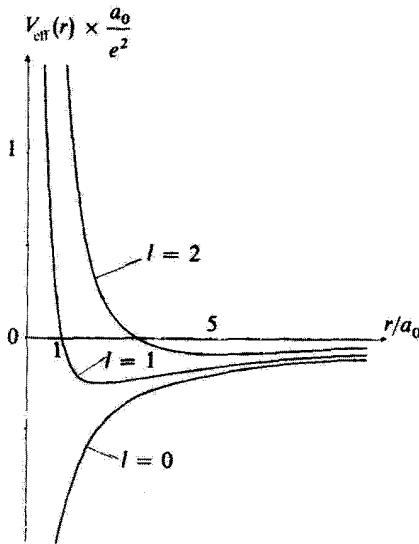
با ضرب هر دو طرف (۲۲-۷) در r ، معادله دیفرانسیل زیر را برای $u_{k,l}(r)$ به دست می‌آوریم

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] u_{k,l}(r) = E_{k,l} u_{k,l}(r) \quad (24-7)$$

این معادله شبیه معادله‌ای است که باید حل کنیم اگر مسئله یک‌بعدی ذره‌ای به جرم μ تحت پتانسیل موثر $V_{\text{موثر}}(r)$ حرکت کند، به طوری که

$$V_{\text{موثر}}(r) = V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \quad (25-7)$$

با وجود این، نباید از این واقعیت غافل شد که متغیر r می‌تواند فقط مقادیر حقیقی غیرمنفی بگیرد. جمله $l(l+1)\hbar^2/2\mu r^2$ که به پتانسیل $V(r)$ اضافه شده است همیشه مثبت



شکل ۲-۷ نحوه تغییرات پتانسیل مؤثر $V_{\text{eff}}(r)$ برای مقادیر اول l در موردی که $V(r) = -e^2/r$ وقتی $l = 0$ است، $V_{\text{eff}}(r)$ همان $V(r)$ است. وقتی l مقادیر ۱، ۲، و غیره را می‌گیرد، $V_{\text{eff}}(r)$ از اضافه کردن پتانسیل مرکزگریزی $l(l+1)\hbar^2/2\mu r^2$ به $V(r)$ به دست می‌آید، که وقتی r به صفر نزدیک می‌شود به $+\infty$ میل می‌کند.

یا صفر است؛ نیروی متناظر (برابر منفی گرادیان این جمله) همیشه تمایل دارد ذره را از مرکز نیروی O دور کند؛ از این جهت آن را پتانسیل مرکزگریزی (یا سد مرکزگریزی) می‌گویند. شکل ۲-۷ نمایشگر نحوه تغییرات پتانسیل مؤثر $V_{\text{eff}}(r)$ برای مقادیر مختلف l در موردی است که $V(r)$ یک پتانسیل کولنی جاذبه $[V(r) = -e^2/r]$ باشد؛ برای $l \geq 1$ حضور جمله مرکزگریزی، که به‌ازای مقادیر l کوچک غالب است، باعث می‌شود $V_{\text{eff}}(r)$ برای فواصل کوتاه دافعه باشد.

ج) رفتار جوابهای معادله شعاعی در مبدأ

قبلاً متذکر شدیم که لازم است رفتار جوابهای $R(r)$ معادله شعاعی (۲۱-۷) را در مبدأ امتحان کنیم تا مطمئن شویم که واقعاً جوابهای (۱۴-۷) هستند.

فرض می‌کنیم وقتی r به صفر می‌رود، پتانسیل $V(r)$ متناهی می‌ماند، یا حداقل با سرعت کمتر از $1/r$ به بینهایت نزدیک می‌شود (این فرض در اغلب مواردی که در فیزیک پیش می‌آیند صادق است، به‌ویژه در مورد پتانسیل کولنی، که در بخش ۳-۷ مطالعه می‌شود). فرض می‌کنیم

جواب (۲۲-۷) در مبدأ به صورت r^s تغییر کند

$$R_{k,l}(r) \underset{r \rightarrow 0}{\sim} C r^s \quad (26-7)$$

با جاگذاری (۲۶-۷) در (۲۲-۷)، و با برابر صفر قرار دادن ضریب جمله غالب، معادله زیر به دست می‌آید

$$-s(s+1) + l(l+1) = 0 \quad (27-7)$$

و در نتیجه

$$\begin{cases} s = 1 & \text{(الف) (۲۸-۷)} \\ s = -(l+1) & \text{(ب) (۲۸-۷)} \end{cases}$$

بنابراین، به ازای یک مقدار معین $E_{k,l}$ دو جواب مستقل خطی برای معادله مرتبه دوم (۲۲-۷) داریم، که در مبدأ به ترتیب به صورت r^l و $1/r^{l+1}$ رفتار می‌کنند. اما جوابهایی که به صورت $1/r^{l+1}$ رفتار می‌کنند باید حذف شوند، زیرا می‌توان نشان داد که $(1/r^{l+1})Y_l^m(\theta, \varphi)$ جواب معادله ویژه مقدار (۱۴-۷) در $r = 0$ نیست. ^۱ از اینجا، ملاحظه می‌کنیم که جوابهای قابل قبول (۲۴-۷) در مبدأ برای تمام l ها صفر می‌شوند، زیرا

$$u_{k,l}(r) \underset{r \rightarrow 0}{\sim} C r^{l+1} \quad (29-7)$$

در نتیجه، باید شرط زیر به معادله (۲۴-۷) اضافه شود

$$\boxed{u_{k,l}(0) = 0} \quad (30-7)$$

یادداشت:

در معادله (۲۴-۷)، r ، فاصله ذره از مبدأ، فقط بین 0 و $+\infty$ تغییر می‌کند. اما، با توجه به شرط (۳۰-۷)، می‌توانیم فرض کنیم که عملاً با مسئله‌ای یک‌بعدی سروکار داریم، که در آن ذره می‌تواند به‌طور نظری در امتداد تمام محور حرکت کند، اما پتانسیل مؤثر برای تمام مقادیر منفی این متغیر بینهایت است. می‌دانیم که، در چنین موردی، تابع موج باید روی نیم‌محور منفی متحد با صفر باشد؛ شرط (۳۰-۷) پیوستگی تابع موج را در $r = 0$ تضمین می‌کند.

۱. زیرا لاپلاسی $(1/r^{l+1})Y_l^m(\theta, \varphi)$ حاوی مشتق مرتبه l ام $\delta(r)$ است (پیوست ۲، انتهای بخش ۴).

۳-۱-۷ حالت‌های مانای یک ذره در پتانسیل مرکزی

الف) اعداد کوانتومی

می‌توانیم نتایج بخش ۷-۲-۱ را به صورت زیر خلاصه کنیم: این واقعیت که پتانسیل $V(r)$ مستقل از θ و φ است امکان می‌دهد که:

۱. بخواهیم ویژه‌تابع‌های H ویژه‌تابع‌های همزمان L^2 و L_z باشند، تا بستگی زاویه‌ای آنها را تعیین کنیم:

$$\varphi_{k,l,m}(r) = R_{k,l}(r)Y_l^m(\theta, \varphi) = \frac{1}{r}u_{k,l}(r)Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (۳۱-۷)$$

۲. معادله ویژه مقدار H را، که معادله‌ای حاوی مشتقات جزئی نسبت به r ، θ ، و φ است، توسط یک معادله دیفرانسیلی شامل فقط متغیر r و وابسته به پارامتر l [معادله (۷-۲۴)]، با در نظر گرفتن شرط (۷-۳۰)، جانشین کنیم.

می‌توان این نتایج را با نتایج یادآوری شده در بخش ۷-۱-۱ الف مقایسه کرد که مشابه مکانیک کوانتومی آنها هستند.

اصولاً، توابع $\varphi_{k,l,m}(r, \theta, \varphi)$ باید انتگرال پذیر مجذوری باشند، یعنی بهنجار پذیر باشند:

$$\int |\varphi_{k,l,m}(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 dr d\Omega = 1 \quad (۳۲-۷)$$

این شکل (۳۱-۷) به ما امکان می‌دهد که انتگرال گیرهای زاویه‌ای را از شعاعی مجزا کنیم

$$\int |\varphi_{k,l,m}(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 dr d\Omega = \int_0^\infty r^2 dr |R_{k,l}(r)|^2 \int d\Omega |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2 \quad (۳۳-۷)$$

اما هماهنگی‌های گروه $Y_l^m(\theta, \varphi)$ نسبت به θ و φ بهنجار شده‌اند؛ پس شرط (۳۲-۷) تبدیل می‌شود به

$$\int_0^\infty r^2 dr |R_{k,l}(r)|^2 = \int_0^\infty dr |u_{k,l}(r)|^2 = 1 \quad (۳۴-۷)$$

در واقع، می‌دانیم که اغلب راحت‌تر است ویژه‌تابع‌هایی از هامیلتونی را بپذیریم که انتگرال پذیر مجذوری نیستند. اگر طیف H قسمت پیوسته داشته باشد، فقط لازم خواهیم داشت که

ویژه‌تاب‌های متناظر به مفهوم تعمیم‌یافته راست‌هنجار باشند، یعنی، در شرطی به شکل زیر صادق باشند

$$\int_0^{\infty} r^2 dr R_{k',l}^*(r) R_{k,l}(r) = \int_0^{\infty} dr u_{k',l}^*(r) u_{k,l}(r) = \delta(k' - k) \quad (35-7)$$

که k یک شاخص پیوسته است.

در (۳۴-۷) و (۳۵-۷)، انتگرالها در حد پایین خود، $r = 0$ [شرط (۳۰-۷)] همگرا هستند. این از نظر فیزیکی صادق است زیرا احتمال یافتن ذره در هر حجم به ابعاد معین همیشه متناهی می‌ماند. پس این فقط به علت رفتار تابع موجها برای $r \rightarrow \infty$ است، که در مورد یک طیف پیوسته، انتگرالهای بهنجارش (۳۵-۷)، اگر $k = k'$ ، واگرا می‌شوند.

بالاخره، ویژه‌تاب‌های هامیلتونی H ذره‌ای واقع در پتانسیل مرکزی $V(r)$ ، بستگی به حداقل سه شاخص [فرمول (۳۱-۷)] دارد: $R_{k,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) = \varphi_{k,l,m}(r, \theta, \varphi)$ یک ویژه‌تابع همزمان H ، L_z و L^2 ، با ویژه‌مقادیر، به ترتیب، $E_{k,l}$ ، $l(l+1)\hbar^2$ و $m\hbar$ است. k را عدد کوانتومی شعاعی؛ l را عدد کوانتومی سمتی؛ و m را عدد کوانتومی مغناطیسی گویند. قسمت شعاعی $R_{k,l}(r) = 1/\sqrt{2} u_{k,l}(r)$ ویژه‌تابع و ویژه‌مقدار $E_{k,l}$ از H ، مستقل از عدد کوانتومی مغناطیسی هستند و توسط معادله شعاعی (۲۴-۷) داده می‌شوند. قسمت زاویه‌ای ویژه‌تابع بستگی به فقط l و m دارد نه k و به شکل پتانسیل $V(r)$ بستگی ندارد.

ب) واگنی ترازهای انرژی

بالاخره، واگنی ترازهای انرژی یعنی ویژه‌مقدارهای هامیلتونی H را بررسی می‌کنیم. تعداد $(2l+1)$ تابع $\varphi_{k,l,m}(r, \theta, \varphi)$ که در آنها k و l ثابت‌اند و m از $-l$ تا $+l$ تغییر می‌کند، ویژه‌تابعهای H با یک ویژه‌مقدار $E_{k,l}$ هستند [این $(2l+1)$ تابع به‌وضوح متعامدند، چون مربوط به ویژه‌مقدارهای مختلف L_z هستند]. بنابراین، تراز $E_{k,l}$ حداقل واگن مرتبه $(2l+1)$ است. این واگنی، که برای تمام پتانسیلهای $V(r)$ وجود دارد را واگنی اساسی گویند: این واگنی ناشی از این واقعیت است که هامیلتونی H حاوی L^2 است ولی حاوی L_z نیست، این می‌رساند که m در معادله شعاعی ظاهر نمی‌شود. همچنین امکان دارد یکی از ویژه‌مقدارهای $E_{k,l}$ ، از معادله شعاعی متناظر مربوط به یک مقدار معین l ، با یک ویژه‌مقدار $E_{k',l'}$ وابسته به تابع شعاعی دیگری که با $l' \neq l$ مشخص می‌شود، یکسان باشد. این امکان برای فقط برخی پتانسیلهای $V(r)$ رخ می‌دهد. واگنیهای حاصل

۱. این واگنی اساسی، هرگاه که هامیلتونی ناوردای دوزانی باشد، ظاهر می‌شود (مکمل ۲ فصل ۶). به این علت است که در مسائل فیزیکی متعددی با آن مواجه می‌شویم.

را اتفاقی گویند (در بخش ۷-۳ خواهیم دید که حالت‌های انرژی اتم هیدروژن واگنیه‌ای اتفاقی دارند).

اکنون باید نشان دهیم که، برای یک مقدار ثابت l ، معادله شعاعی حداکثر یک جواب فیزیکی قابل قبول برای هر ویژه مقدار $E_{k,l}$ دارد. این عملاً از شرط (۷-۳) نتیجه می‌شود. معادله شعاعی، چون یک معادله دیفرانسیل مرتبه دوم است، بدیهی است دو جواب مستقل برای هر مقدار $E_{k,l}$ دارد. شرط (۷-۳) یکی از آنها را حذف می‌کند، بنابراین حداکثر یک جواب قابل قبول برای هر مقدار $E_{k,l}$ وجود دارد. ما باید همچنین رفتار جوابها را برای r نزدیک به بینهایت، بررسی کنیم؛ اگر وقتی $r \rightarrow \infty$ داشته باشیم $V(r) \rightarrow 0$ ، آنگاه مقادیر منفی $E_{k,l}$ ، که برای آن جوابی که هم‌اکنون انتخاب کرده‌ایم نیز در بینهایت قابل قبول است (یعنی کراندار است)، تشکیل یک مجموعه گسسته می‌دهند (مثال بخش ۷-۳ و مکمل ۲ این فصل را ببینید).

از ملاحظات قبلی نتیجه می‌شود که H ، L^2 ، و L_z تشکیل یک مجموعه قابل مشاهده‌پذیر جابه‌جایی‌پذیر را می‌دهند.^۱ اگر سه ویژه مقدار $E_{k,l}$ ، $\hbar^2 l(l+1)$ ، و $m\hbar$ را ثابت نگه‌داریم، به آنها یک تابع منفرد $\varphi_{k,l,m}(r)$ مربوط می‌شود. ویژه مقدار L^2 نشان می‌دهد که چه معادله‌ای تابع شعاعی را می‌دهد؛ ویژه مقدار H این تابع شعاعی $R_{k,l}(r)$ را، همان‌طور که در بالا اشاره شد، به‌طور یکتا تعیین می‌کند؛ بالاخره، فقط یک هماهنگ‌کروی $Y_l^m(\theta, \varphi)$ برای یک l و m معین وجود دارد.

۷-۲ حرکت مرکز جرم و حرکت نسبی برای دستگاهی از دو ذره

برهم‌کنش‌دار

دستگاهی از دو ذره بدون اسپین به جرمهای m_1 و m_2 و مکانهای \mathbf{r}_1 و \mathbf{r}_2 را در نظر می‌گیریم. فرض می‌کنیم که نیروهای وارد بر این ذرات از انرژی پتانسیل $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ که فقط بستگی به $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ دارد مشتق شوند. این در صورتی واقعیت دارد که نیروهایی با منشأ خارج از دستگاه وجود نداشته باشند (یعنی، دستگاه منزوی باشد)، و برهم‌کنشهای بین دو ذره مشتق از پتانسیل باشند. این پتانسیل باید فقط بستگی به $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ داشته باشد، زیرا فقط مکانهای نسبی دو ذره دخالت دارند. نشان خواهیم داد که مطالعه چنین دستگاهی می‌تواند به مطالعه یک ذره منفرد واقع در پتانسیل $V(\mathbf{r})$ تبدیل شود.

۱. در واقع، ثابت نکرده‌ایم که این عملگرها مشاهده‌پذیرند، یعنی اینکه مجموعه $\varphi_{k,l,m}(r)$ تشکیل پایه‌ای در فضای حالت \mathcal{H} می‌دهد.

۱-۲-۷ حرکت مرکز جرم و حرکت نسبی در مکانیک کلاسیک

در مکانیک کلاسیک، دستگاه دودره‌ای توسط لاگرانژی زیر (پیوست ۳ را ببینید) توصیف می‌شود

$$\mathcal{L}(\mathbf{r}_1, \dot{\mathbf{r}}_1; \mathbf{r}_2, \dot{\mathbf{r}}_2) = T - V = \frac{1}{2} m_1 \dot{\mathbf{r}}_1^2 + \frac{1}{2} m_2 \dot{\mathbf{r}}_2^2 - V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (۳۶-۷)$$

و تکانه‌های مزدوج شش مختصه دو ذره، مؤلفه‌های تکانه‌های مکانیکی هستند

$$p_1 = m_1 \dot{\mathbf{r}}_1 \quad (۳۷-۷)$$

$$p_2 = m_2 \dot{\mathbf{r}}_2$$

مطالعه حرکت دو ذره با جانشینی مکانهای \mathbf{r}_i توسط سه مختصه مرکز جرم (یا مرکزگرانی)

$$\mathbf{r}_G = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2} \quad (۳۸-۷)$$

و سه مختصه نسبی^۱

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \quad (۳۹-۷)$$

ساده می‌شود

فرمولهای (۳۸-۷) و (۳۹-۷) را می‌توان وارون کرد و به‌دست آورد

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_G + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \mathbf{r} \quad (۴۰-۷)$$

$$\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_G - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \mathbf{r}$$

بنابراین می‌توان لاگرانژی را برحسب متغیرهای جدید \mathbf{r}_G و \mathbf{r} نوشت

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\mathbf{r}_G, \dot{\mathbf{r}}_G; \mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) &= \frac{1}{2} m_1 \left[\dot{\mathbf{r}}_G + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \dot{\mathbf{r}} \right]^2 + \frac{1}{2} m_2 \left[\dot{\mathbf{r}}_G - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \dot{\mathbf{r}} \right]^2 - V(\mathbf{r}) \\ &= \frac{1}{2} M \dot{\mathbf{r}}_G^2 + \frac{1}{2} \mu \dot{\mathbf{r}}^2 - V(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (۴۱-۷)$$

۱. تعریف (۳۹-۷) یک بی‌تقارنی جزئی بین دو ذره وارد می‌کند.

که

$$M = m_1 + m_2 \quad (۴۲-۷)$$

جرم کل دستگاه است، و

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (۴۳-۷ \text{ الف})$$

عبارت است از جرم کاهش یافته (میانگین هندسی دو جرم m_1 و m_2)، که همچنین توسط فرمول زیر داده می شود

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \quad (۴۳-۷ \text{ ب})$$

تکانه های مزدوج متغیرهای r_G و r با مشتق گیری از عبارت (۴۱-۷) نسبت به مؤلفه های \dot{r}_G و \dot{r} به دست می آیند. با استفاده از (۳۸-۷)، (۳۹-۷) و (۳۷-۷)، داریم

$$p_G = M \dot{r}_G = m_1 \dot{r}_1 + m_2 \dot{r}_2 = p_1 + p_2 \quad (۴۴-۷ \text{ الف})$$

$$p = \mu \dot{r} = \frac{m_2 p_1 - m_1 p_2}{m_1 + m_2} \quad (۴۴-۷ \text{ ب})$$

یا

$$\frac{p}{\mu} = \frac{p_1}{m_1} - \frac{p_2}{m_2} \quad (۴۴-۷ \text{ ج})$$

p_G تکانه کل دستگاه است، و p را تکانه نسبی دو ذره گویند.

اکنون می توانیم هامیلتونی کلاسیک دستگاه را بر حسب متغیرهای دینامیکی جدید که فوقاً معرفی کردیم بیان کنیم

$$\mathcal{H}(r_G, p_G; r, p) = \frac{p_G^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu} + V(r) \quad (۴۵-۷)$$

از اینجا، معادلات حرکت را می توان بلافاصله به دست آورد [فرمولهای (۲۷) از پیوست ۳]

$$\dot{p}_G = 0 \quad (۴۶-۷)$$

$$\dot{p} = -\nabla V(r) \quad (۴۷-۷)$$

اولین جمله عبارت (۷-۴۵) بیانگر انرژی جنبشی یک ذره فرضی است که جرم M آن برابر مجموع $m_1 + m_2$ جرمهای دو ذره واقعی، مکان آن در مرکز جرم دستگاه [فرمول (۷-۳۸)] و تکانه آن p_G برابر تکانه کل $p_1 + p_2$ دستگاه است. معادله (۷-۴۶) نشان می‌دهد که این ذره فرضی در حرکت مستقیم‌الخط یکنواخت است (ذره آزاد). این نتیجه به‌خوبی در مکانیک کلاسیک شناخته شده است: مرکز جرم دستگاه ذرات به‌صورت ذره منفردی حرکت می‌کند که جرم آن برابر جرم کل دستگاه است، و تحت تأثیر برآیند تمام نیروهای وارد روی ذرات مختلف قرار دارد. در اینجا، این برآیند صفر است زیرا تنها نیروهای موجود نیروهای داخلی هستند که از اصل عمل و عکس‌العمل تبعیت می‌کنند.

چون مرکز جرم نسبت به چارچوب از پیش انتخاب‌شده دارای حرکت مستقیم‌الخط یکنواخت است، چارچوبی را که دستگاه نسبت به آن در حال سکون است ($p_G = 0$) نیز یک چارچوب لخت است. در این چارچوب مرکز جرم، اولین جمله (۷-۴۵) صفر است. پس هامیلتونی کلاسیک، یعنی انرژی کل دستگاه تبدیل می‌شود به

$$\mathcal{H}_r = \frac{p^2}{2\mu} + V(r) \quad (۷-۴۸)$$

\mathcal{H}_r انرژی وابسته به حرکت نسبی دو ذره است. واضح است که این حرکت نسبی جالبترین مورد در مطالعه دو ذره برهم‌کنش‌دار است. می‌توان آن را با معرفی یک ذره فرضی به‌نام ذره نسبی توصیف کرد: جرم آن جرم کاهش‌یافته μ دو ذره واقعی است، و مکان آن با مختصات نسبی r مشخص می‌شود، و تکانه آن تکانه نسبی p است. چون حرکت آن از رابطه (۷-۴۷) پیروی می‌کند، طوری رفتار می‌کند که انگار تحت تأثیر پتانسیل $V(r)$ برای انرژی پتانسیل برهم‌کنش بین دو ذره حقیقی است.

بنابراین مطالعه حرکت نسبی دو ذره برهم‌کنش‌دار به مسئله حرکت یک ذره فرضی منفرد تبدیل می‌شود که توسط فرمولهای (۷-۳۹)، (۷-۴۳) و (۷-۴۴) مشخص می‌شود. این معادله آخر بیانگر واقعیت است که سرعت p/μ ذره نسبی در واقع عبارت است از تفاضل سرعتهای دو ذره، یعنی، سرعت نسبی آنها.

۷-۲-۲ جداسازی متغیرها در مکانیک کوانتومی

ملاحظات قسمت قبل را می‌توان، همان‌طور که نشان خواهیم داد، به‌سهولت به مکانیک کوانتومی منتقل کرد.

الف) مشاهده‌پذیرهای وابسته به مرکز جرم و ذره نسبی

عملگرهای P_1, R_1 و P_2, R_2 که مکانها و تکانه‌های دو ذره دستگاه را توصیف می‌کنند، در روابط جابه‌جایی بتدای صدق می‌کنند.

$$[X_1, P_{1x}] = i\hbar \quad (۴۹-۷)$$

$$[X_2, P_{2x}] = i\hbar$$

با عبارتهای مشابهی برای مؤلفه‌ها در امتداد Oy و Oz . تمام مشاهده‌پذیرهایی که با شاخص ۱ مشخص شده‌اند با تمام مشاهده‌پذیرهای دارای شاخص ۲ جابه‌جاپذیرند، و تمام مشاهده‌پذیرهای مربوط به یکی از محورهای Ox, Oy, Oz با مشاهده‌پذیرهایی متناظر با یکی دیگر از این محورها جابه‌جاپذیرند.

حال مشاهده‌پذیرهای R_G و R را با فرمولهای مشابه با (۷-۳۸) و (۷-۳۹) معرفی می‌کنیم

$$R_G = \frac{m_1 R_1 + m_2 R_2}{m_1 + m_2} \quad (الف ۵۰-۷)$$

$$R = R_1 - R_2 \quad (ب ۵۰-۷)$$

و مشاهده‌پذیرهای P_G و P را توسط فرمول مشابه (۷-۴۴) تعریف می‌کنیم

$$P_G = P_1 + P_2 \quad (الف ۵۱-۷)$$

$$P = \frac{m_2 P_1 - m_1 P_2}{m_1 + m_2} \quad (ب ۵۱-۷)$$

به‌سادگی می‌توان جابه‌جاگرهای مختلف این مشاهده‌پذیرهای جدید را محاسبه کرد. نتایج به‌صورت زیرند

$$[X_G, P_{Gx}] = i\hbar \quad (الف ۵۲-۷)$$

$$[X, P_x] = i\hbar \quad (ب ۵۲-۷)$$

با عبارتهای مشابهی برای مؤلفه‌ها در امتداد Oy و Oz ! تمام جابه‌جاگرهای دیگر صفرند. در نتیجه، R و P ، مثل R_G و P_G در روابط جابه‌جایی بتدای صدق می‌کنند. به‌علاوه، هر مشاهده‌پذیر از مجموعه $\{R, P\}$ با هر مشاهده‌پذیر از مجموعه $\{R_G, P_G\}$ جابه‌جاپذیر است.

حرکت مرکز جرم و حرکت نسبی برای ... ۵۳۷

همچنین می‌توانیم P و R را، از یک طرف، و R_G و P_G را، از طرف دیگر، به‌عنوان مشاهده‌پذیرهای مکان و تکانهٔ دو ذرهٔ فرضی متمایز تعبیر کنیم.

(ب) ویژه‌مقادیر و ویژه‌تابعهای هامیلتونی

عملگر هامیلتونی دستگاه از فرمولهای (۳۶-۷) و (۳۷-۷) و قواعد کوانتس فصل سوم به‌دست می‌آید

$$H = \frac{P_1^2}{2m_1} + \frac{P_2^2}{2m_2} + V(R_1 - R_2) \quad (۵۳-۷)$$

چون تعاریف (۵۰-۷) و (۵۱-۷) با (۳۸-۷)، (۳۹-۷)، و (۴۵-۷) از لحاظ شکل یکسان هستند، و چون تمام عملگرهای تکانه جابه‌جاپذیرند، یک محاسبهٔ جبری ساده، هم‌ارز عبارت (۴۶-۷) را به‌دست می‌دهد

$$H = \frac{P_G^2}{2M} + \frac{P^2}{2\mu} + V(R) \quad (۵۴-۷)$$

بنابراین، هامیلتونی H به‌صورت مجموع دو جمله ظاهر می‌شود

$$H = H_G + H_r \quad (۵۵-۷)$$

با

$$H_G = \frac{P_G^2}{2M} \quad (الف ۵۶-۷)$$

$$H_r = \frac{P^2}{2\mu} + V(R) \quad (ب ۵۶-۷)$$

که بر طبق نتایج قسمت الف بخش ۷-۲-۲ با هم جابه‌جا می‌شوند

$$[H_G, H_r] = 0 \quad (۵۷-۷)$$

بنابراین H_G و H_r با H جابه‌جاپذیرند. نتیجه می‌شود که پایه‌ای از ویژه‌بردارهای H که ویژه‌بردارهای H_G و H_r نیز هستند وجود دارد؛ بنابراین جوابهای دستگاه معادلات

$$H_G | \varphi \rangle = E_G | \varphi \rangle \quad (58-7)$$

$$H_r | \varphi \rangle = E_r | \varphi \rangle$$

را جستجو خواهیم کرد که بر طبق (55-7) بلافاصله ایجاب می‌کند که

$$H | \varphi \rangle = E | \varphi \rangle \quad (59-7)$$

با

$$E = E_G + E_r \quad (60-7)$$

نمایش $\{ | \Gamma_G, \Gamma \rangle \}$ را در نظر بگیرید که بردارهای پایه‌ای آن ویژه‌بردارهای مشترک مشاهده‌پذیرهای \mathbf{R} و \mathbf{R}_G هستند. در این نمایش، یک حالت توسط تابع موج $\varphi(\Gamma_G, \Gamma)$ مشخص می‌شود که تابعی از شش متغیر است. اثر عملگرهای \mathbf{R} و \mathbf{R}_G یا ضرب تابع موجها، به ترتیب، در متغیرهای Γ_G و Γ ، بیان می‌شود. \mathbf{P} و \mathbf{P}_G عملگرهای دیفرانسیلی $\hbar/i \nabla$ و $\hbar/i \nabla_G$ می‌شوند (که ∇_G معرف مجموعه سه عملگر $\partial/\partial x_G, \partial/\partial y_G, \partial/\partial z_G$ است). پس فضای حالت \mathcal{E} دستگاه را می‌توان برابر حاصلضرب تانسوری $\mathcal{E}_r \otimes \mathcal{E}_{rG}$ ، از فضای حالت \mathcal{E}_{rG} وابسته به مشاهده‌پذیر \mathbf{R}_G و فضای \mathcal{E}_r وابسته به \mathbf{R} ، گرفت. بنابراین، H_r و H_G به صورت گسترش به \mathcal{E} عملگرهایی ظاهر می‌شوند که در واقع به ترتیب، فقط در \mathcal{E}_r و \mathcal{E}_{rG} عمل می‌کنند. در نتیجه، همان‌طور که در بخش F از فصل دوم دیدیم، می‌توانیم پایه‌ای از ویژه‌بردارهای $| \varphi \rangle$ که در (58-7) صادق‌اند به شکل زیر پیدا کنیم

$$| \varphi \rangle = | \chi_G \rangle \otimes | \omega_r \rangle \quad (61-7)$$

با

$$\begin{cases} H_G | \chi_G \rangle = E_G | \chi_G \rangle \\ | \chi_G \rangle \in \mathcal{E}_{rG} \end{cases} \quad (62-7 \text{ الف})$$

$$\begin{cases} H_r | \omega_r \rangle = E_r | \omega_r \rangle \\ | \omega_r \rangle \in \mathcal{E}_r \end{cases} \quad (62-7 \text{ ب})$$

این معادلات را به ترتیب در، نمایشهای $\{ |r_G\rangle\}$ و $\{ |r\rangle\}$ می‌نویسیم و به دست می‌آوریم

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_G \chi_G(r_G) = E_G \chi_G(r_G) \quad (الف\ ۶۳-۷)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + V(r) \right] \omega_r(r) = E_r \omega_r(r) \quad (ب\ ۶۳-۷)$$

اولین معادله، یعنی (۶۳-۷ الف)، نشان می‌دهد که، به مانند مکانیک کلاسیک، ذره وابسته به مرکز جرم دستگاه، آزاد است. جوابهای آن را می‌دانیم: این جوابها، به عنوان مثال، امواج تخت

$$\chi_G(r_G) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{(i/\hbar)p_G \cdot r_G} \quad (۶۴-۷)$$

هستند و انرژی آن برابر است با

$$E_G = \frac{p_G^2}{2M} \quad (۶۵-۷)$$

E_G می‌تواند هر مقدار مثبت یا صفر را بگیرد، و عبارت است از انرژی جنبشی مربوط به انتقال دستگاه به طور کلی.

جالبترین معادله از نقطه نظر فیزیکی، معادله دوم (۶۳-۷ ب) است که به ذره نسبی مربوط است. این معادله رفتار دستگاه دو ذره برهم‌کنش‌دار را در چارچوب مرکز جرم توصیف می‌کند. اگر پتانسیل برهم‌کنش دو ذره واقعی فقط بستگی به فاصله بین آنها، $|r_1 - r_2|$ ، داشته باشد و بستگی به راستای بردار $r_1 - r_2$ نداشته باشد، ذره نسبی تحت یک پتانسیل مرکزی $V(r)$ قرار دارد؛ پس این مسئله به مسئله‌ای تبدیل می‌شود که در بخش ۷-۱ بررسی شد.

یادداشت:

تکانه زاویه‌ای کل دستگاه دو ذره واقعی عبارت است از

$$\mathbf{J} = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2 \quad (۶۶-۷)$$

با

$$\mathbf{L}_1 = \mathbf{R}_1 \times \mathbf{P}_1$$

$$\mathbf{L}_2 = \mathbf{R}_2 \times \mathbf{P}_2 \quad (۶۷-۷)$$

به سادگی می توان نشان داد که می شود آن را به صورت زیر نوشت

$$J = L_G + L \quad (۶۸-۷)$$

که در آن

$$L_G = R_G \times P_G \quad (۶۹-۷)$$

$$L = R \times P$$

عبارت‌اند از تکانه‌های زاویه‌ای ذره‌های فرضی (برطبق نتایج قسمت الف، L_G و L در روابط جابه‌جایی، که مشخص‌کننده تکانه‌های زاویه‌ای هستند، صدق می‌کنند، و مؤلفه‌های L با مؤلفه‌های L_G جابه‌جاپذیرند). ■

۳-۷ اتم هیدروژن

۱-۳-۷ مقدمه

اتم هیدروژن از یک پروتون به جرم

$$m_p = ۱.۷ \times ۱۰^{-۲۷} \text{kg} \quad (۷۰-۷)$$

و بار

$$q = ۱.۶ \times ۱۰^{-۱۹} \text{C} \quad (۷۱-۷)$$

و یک الکترون به جرم

$$m_e = ۰.۹۱ \times ۱۰^{-۳۱} \text{kg} \quad (۷۲-۷)$$

و بار $-q$ تشکیل می‌شود. برهم‌کنش بین این دو ذره اساساً الکتروستاتیکی است. انرژی پتانسیل مربوط عبارت است از

$$V(r) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{e^2}{r} \quad (۷۳-۷)$$

که r نشاندهنده فاصله بین دو ذره است، و

$$\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} = e^2 \quad (۷۴-۷)$$

ما، با استفاده از نتایج بخش ۷-۲، فقط به مطالعه این دستگاه در چارچوب مرکز جرم می‌پردازیم. پس هامیلتونی کلاسیک که حرکت نسبی دو ذره را توصیف می‌کند می‌شود^۱

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r} \quad (۷۵-۷)$$

چون $m_p \gg m_e$ [فرمولهای (۷۵-۷) و (۷۲-۷)]، جرم کاهش یافته μ دستگاه بسیار نزدیک به m_e است:

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \simeq m_e \left(1 - \frac{m_e}{m_p}\right) \quad (۷۶-۷)$$

(جمله تصحیحی m_e/m_p حدود $1/1800$ است). این می‌رساند که مرکز جرم دستگاه عملاً در همان مکانی است که پروتون قرار دارد، و اینکه ذره نسبی می‌تواند، با تقریب بسیار خوب با الکترون یکسان گرفته شود. به این دلیل است که این قرارداد اندک نادقیق را می‌پذیریم که ذره نسبی را الکترون و مرکز جرم را پروتون بنامیم.

۷-۳-۲ مدل بور

ما به‌طور مختصر نتایج مدل بور را که به اتم هیدروژن مربوط می‌شود مرور خواهیم کرد. این مدل، که بر مبنای مفهوم مسیر استوار است، با ایده‌های مکانیک کوانتومی ناسازگار است. اما، به ما امکان می‌دهد، به‌طریق بسیار ساده، کمیات بنیادی، مانند انرژی یونش E_I اتم هیدروژن، و پارامتری که ابعاد اتمی را مشخص می‌کند (شعاع بور a_0) را معرفی کنیم. به‌علاوه، به‌طور اتفاقی، انرژیهای E_n که از نظریه بور به‌دست می‌آیند، همان ویژه‌مقدارهای هامیلتونی که در بخش ۷-۳-۳ محاسبه خواهیم کرد، هستند. بالاخره، نظریه کوانتوم مکانیکی با برخی تصورات شهودی از مدل بور (قسمت ج-۲ بخش ۷-۳-۴ را ببینید) سازگار است.

۱. از این پس، شاخص r را که در بخش ۷-۲ برای مشخص کردن کمیات مربوط به حرکت نسبی به‌کار رفت حذف خواهیم کرد.

این مدل نیمه کلاسیک بر مبنای این فرض استوار است که الکترون یک مدار دایره‌ای به شعاع r حول پروتون می‌پیماید، به طوری که معادلات زیر برقرارند

$$E = \frac{1}{2} \mu v^2 - \frac{e^2}{r} \quad (۷۷-۷)$$

$$\frac{\mu v^2}{r} = \frac{e^2}{r^2} \quad (۷۸-۷)$$

$$\mu v r = n \hbar \quad \text{یک عدد صحیح مثبت است؛} \quad (۷۹-۷)$$

دو معادله اول کلاسیکی هستند. (۷۷-۷) این واقعیت را بیان می‌کند که انرژی کل E الکترون برابر است با مجموع انرژی جنبشی آن $\mu v^2/2$ و انرژی پتانسیل آن $-e^2/r$. (۷۸-۷) چیزی غیر از معادله بنیادی دینامیک نیوتونی نیست (e^2/r^2 نیروی کولونی وارد بر الکترون و v^2/r شتاب حرکت دایره‌ای یکنواخت آن است). معادله سوم بیانگر شرط کوانتس است که به طور اختیاری، توسط بور پیشنهاد شد تا بتواند وجود ترازهای انرژی گسسته را توضیح دهد؛ او فرض کرد که فقط مدارهای دایره‌ای صادق در این شرط مسیره‌های ممکن برای الکترون هستند. مدارهای متفاوت، همچنین مقادیر کمیات مختلف فیزیکی متناظر، توسط عدد صحیح n که به آن وابسته‌اند مشخص می‌شوند.

یک محاسبه جبری بسیار ساده عبارتهای زیر را برای E_n ، r_n ، و v_n می‌دهد

$$E_n = -\frac{1}{n^2} E_I \quad (\text{الف } ۸۰-۷)$$

$$r_n = n^2 a_0 \quad (\text{ب } ۸۰-۷)$$

$$v_n = \frac{1}{n} v_0 \quad (\text{ج } ۸۰-۷)$$

با

$$E_I = \frac{\mu e^4}{2 \hbar^2} \quad (\text{الف } ۸۱-۷)$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \quad (\text{ب } ۸۱-۷)$$

$$v_0 = \frac{e^2}{\hbar} \quad (\text{ج } ۸۱-۷)$$

وقتی این مدل توسط بور پیشنهاد شد، یک قدم مهم در جهت درک پدیده‌های اتمی برداشته شد، زیرا برای ترازهای انرژی اتم هیدروژن مقادیر صحیح به دست داد. این مقادیر در واقع از قانون

$1/n^2$ (فرمول بالمر) که با عبارت (۷-۸۰ الف) نشان داده شده است تبعیت می‌کنند. به علاوه، مقدار تجربی انرژی یونش (انرژی‌ای که باید به اتم هیدروژن در حالت پایه‌اش داده شود تا الکترون کنده شود) برابر مقدار عددی E_I است

$$E_I \simeq 13.6 \text{ eV} \quad (82-7)$$

بالاخره، شعاع بور a_0 واقعاً اندازه‌ای که اتم را مشخص می‌کند

$$a_0 \simeq 0.529 \text{ \AA} \quad (83-7)$$

یادداشت:

مکمل C_I از فصل یک نشان می‌دهد که چگونه کاربرد اصل عدم قطعیت، در اتم هیدروژن، وجود یک حالت پایه پایدار را توضیح می‌دهد و امکان می‌دهد مرتبه بزرگی انرژی آن و گسترش فضایی‌اش را محاسبه کنیم. ■

۷-۳-۳ نظریه مکانیک کوانتومی اتم هیدروژن

اکنون به مسئله تعیین ویژه‌مقدارها و ویژه‌تابعهای هامیلتونی H ‌ای که حرکت نسبی پروتون و الکترون را در چارچوب مرکز جرم توصیف می‌کند [فرمول (۷-۷۵)] می‌پردازیم. در نمایش $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ ، معادله ویژه‌مقدار هامیلتونی H به صورت زیر نوشته می‌شود

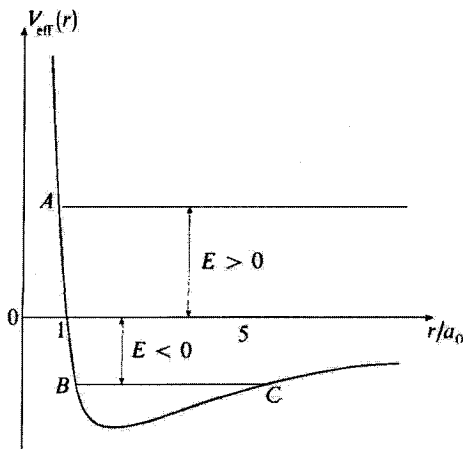
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - \frac{e^2}{r} \right] \varphi(\mathbf{r}) = E \varphi(\mathbf{r}) \quad (84-7)$$

چون پتانسیل $-e^2/r$ مرکزی است، نتایج بخش ۷-۱ را می‌توانیم به کار ببریم؛ ویژه‌تابعهای $\varphi(r)$ به شکل زیرند

$$\varphi_{k,l,m}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} u_{k,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (85-7)$$

$u_{k,l}(r)$ توسط معادله شعاعی، (۷-۲۴)، داده می‌شود یعنی

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r} \right] u_{k,l}(r) = E_{k,l} u_{k,l}(r) \quad (86-7)$$



شکل ۳-۷ برای یک مقدار مثبت انرژی E ، حرکت کلاسیک مقید نیست. پس طیف هامیلتونی مکانیک کوانتومی H برای $E > 0$ پیوسته است، و ویژه‌تابعهای متناظر بهنجارپذیر نیستند. از طرف دیگر، برای E منفی، حرکت کلاسیک به بازه BC محدود می‌شود. بنابراین، طیف H برای $E < 0$ گسسته است، و ویژه‌تابعهای متناظر بهنجارپذیر هستند.

شرط (۳-۷) را به این معادله اضافه می‌کنیم

$$u_{k,l}(\infty) = 0 \quad (۸۷-۷)$$

می‌توان نشان داد که طیف H شامل یک قسمت گسسته (ویژه‌مقدارهای منفی) و یک قسمت پیوسته (ویژه‌مقدارهای مثبت) است. شکل ۳-۷ را در نظر بگیرید که پتانسیل مؤثر را برای یک مقدار معین l نشان می‌دهد (شکل برای $l \neq 0$ رسم شده است، ولی استدلال برای $l = 0$ معتبر می‌ماند).

برای یک مقدار مثبت E ، حرکت کلاسیک در فضا مقید نیست: برای مقدار $E > 0$ که در شکل ۳-۷ انتخاب شده است، در طرف چپ به نقطه A محدود می‌شود، ولی از طرف راست محدود نیست.^۱ در نتیجه (مکمل MIII فصل سوم) معادله (۸۶-۷) به‌آزای $E > 0$ جوابهای قابل قبول دارد. بنابراین، طیف H برای $E > 0$ پیوسته است، و ویژه‌تابعهای متناظر انتگرال‌پذیر مجذوری نیستند.

از طرف دیگر، برای $E < 0$ ، حرکت کلاسیک کراندار است: این حرکت به ناحیه بین دو نقطه B و C محدود می‌شود.^۲ بعداً خواهیم دید که معادله (۸۶-۷)، فقط برای برخی مقادیر گسسته E ، جوابهای قابل قبول دارد. بنابراین، طیف H برای $E < 0$ گسسته است، و ویژه‌تابعهای متناظر انتگرال‌پذیر مجذوری هستند.

۱. برای پتانسیل $1/r$ - مسیرهای کلاسیک مقاطع مخروطی هستند؛ حرکت نامقید یک هذلولی یا یک سهمی طی می‌کند.

۲. از این رو، مسیر کلاسیک یک بیضی یا یک دایره است.

الف) تعویض متغیرها

برای ساده کردن استدلال، a_0 و E_I را [فرمولهای (۷-۸۱)] به عنوان واحدهای طول و انرژی انتخاب می‌کنیم. یعنی، کمیات بدون بُعد زیر را معرفی خواهیم کرد

$$\rho = r/a_0 \quad (۸۸-۷)$$

$$\lambda_{k,l} = \sqrt{-E_{k,l}/E_I} \quad (۸۹-۷)$$

(کمیت زیر رادیکال مثبت است، چون حالت‌های مقید را جستجو می‌کنیم).

با توجه به عبارتهای (۷-۸۱) الف) و (۷-۸۱) ب) برای E_I و a_0 ، معادله شعاعی (۷-۸۶) به صورت زیر درمی‌آید

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\gamma}{\rho} - \lambda_{k,l}^2 \right] u_{k,l}(\rho) = 0 \quad (۹۰-۷)$$

ب) حل معادله شعاعی

به منظور حل معادله (۷-۹۰)، از روشی که در ماکمل ۳ فصل ۵ بیان شد استفاده می‌کنیم و $u_{k,l}(\rho)$ را به صورت سری توانی بسط می‌دهیم.

۱. رفتار مجانبی

اکنون رفتار مجانبی $u_{k,l}(\rho)$ را به طور کیفی بررسی می‌کنیم. وقتی ρ به بینهایت میل می‌کند، جمله‌های $1/\rho$ و $1/\rho^2$ در مقابل جمله ثابت $\lambda_{k,l}^2$ قابل صرف نظر می‌شوند، به طوری که معادله (۷-۹۰) عملاً به صورت زیر درمی‌آید

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \lambda_{k,l}^2 \right] u_{k,l}(\rho) = 0 \quad (۹۱-۷)$$

که جوابهای آن عبارت‌اند از $e^{\pm\rho\lambda_{k,l}}$. این استدلال دقیق نیست، زیرا ما از جمله‌های بر حسب $1/\rho$ و $1/\rho^2$ کاملاً صرف نظر کرده‌ایم؛ در واقع، می‌توان نشان داد که $u_{k,l}(\rho)$ برابر با $e^{\pm\rho\lambda_{k,l}}$ ضربدر توانی از ρ است.

بعداً، از ملاحظات فیزیکی، به این نتیجه می‌رسیم که لازم است تابع $u_{k,l}(\rho)$ در بینهایت کراندار بماند، و از این رو، جوابهای (۷-۹۰)، که رفتار مجانبی آنها توسط $e^{+\rho\lambda_{k,l}}$ تعیین می‌شود،

حذف شوند. به این علت است که تعویض تابع زیر را انجام می‌دهیم

$$u_{k,l}(\rho) = e^{-\rho\lambda_{k,l}} y_{k,l}(\rho) \quad (۹۲-۷)$$

این تعویض تابع گرچه $e^{-\rho\lambda_{k,l}}$ را متمایز می‌سازد، ولی به‌وضوح جوابهای برحسب $e^{+\rho\lambda_{k,l}}$ را، که باید مشخص شوند و در پایان محاسبه کنار گذاشته شوند، حذف نمی‌کند. معادلهٔ دیفرانسیلی که $y_{k,l}(\rho)$ باید در آن صادق باشد را می‌توان به‌سادگی از (۷-۹۰) به‌دست آورد

$$\left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} - 2\lambda_{k,l} \frac{d}{d\rho} + \left[\frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] \right\} y_{k,l}(\rho) = 0 \quad (۹۳-۷)$$

شرط (۷-۸۷) باید با این معادله وابسته باشد، یعنی

$$y_{k,l}(0) = 0 \quad (۹۴-۷)$$

۲. جوابها به‌شکل سری توانی

بسط $y_{k,l}(\rho)$ را به‌صورت توانهایی از ρ در نظر بگیرید

$$y_{k,l}(\rho) = \rho^s \sum_{q=0}^{\infty} c_q \rho^q \quad (۹۵-۷)$$

بنا به تعریف، c_0 اولین ضریب غیرصفر این بسط است

$$c_0 \neq 0 \quad (۹۶-۷)$$

شرط (۷-۹۴) می‌رساند که s منحصراً مثبت است.

از (۷-۹۵)، مقادیر $d/d\rho y_{k,l}(\rho)$ و $\rho d^2/d\rho^2 y_{k,l}(\rho)$ را محاسبه می‌کنیم

$$\frac{d}{d\rho} y_{k,l}(\rho) = \sum_{q=0}^{\infty} (q+s) c_q \rho^{q+s-1} \quad (الف ۹۷-۷)$$

$$\frac{d^2}{d\rho^2} y_{k,l}(\rho) = \sum_{q=0}^{\infty} (q+s)(q+s-1) c_q \rho^{q+s-2} \quad (ب ۹۷-۷)$$

برای به دست آوردن طرف چپ (۹۳-۷)، عبارتهای (۹۵-۷)، و (۹۷-۷ الف)، و (۹۷-۷ ب) را به ترتیب در $[2/\rho - l(l+1)/\rho^2]$ ، $-2\lambda_{k,l}$ ، و ۱ ضرب می‌کنیم. بر طبق (۹۳-۷) سری که به دست می‌آید باید متناهی باشد، یعنی تمام ضرایب آن باید صفر باشند. جمله با کمترین مرتبه به صورت ρ^{-2} است. با صفر کردن ضریب آن، به دست می‌آوریم

$$[-l(l+1) + s(s-1)]c_0 = 0 \quad (98-7)$$

اگر (۹۶-۷) را به حساب آوریم، ملاحظه می‌کنیم که s می‌تواند یکی از دو مقدار زیر را بگیرد

$$\begin{cases} s = l + 1 & (99-7 \text{ الف}) \\ s = -l & (99-7 \text{ ب}) \end{cases}$$

(سازگار با نتیجه کلی بخش ۱-۷-۲ ج). دیدیم که فقط (۹۹-۷ الف) رفتاری را در مبدأ می‌دهد که می‌تواند به یک جواب قابل قبول منجر شود [شرط (۹۴-۷)]. با مساوی صفر قرار دادن ضریب جمله عمومی ρ^{q+s-2} ، رابطه بازگشتی زیر [با $s = l + 1$] را به دست می‌آوریم

$$q(q + 2l + 1)c_q = 2[(q + l)\lambda_{k,l} - 1]c_{q-1} \quad (100-7)$$

اگر c_0 را تعیین کنیم، این رابطه به ما امکان می‌دهد که c_1 را محاسبه کنیم، و سپس c_2 را، و بدین ترتیب توسط رابطه بازگشتی تمام ضرایب c_q را به دست می‌آوریم. چون c_q/c_{q-1} به صفر میل می‌کند وقتی $q \rightarrow \infty$ ، سری مربوط به ازای تمام ρ ها همگراست. بنابراین، به ازای هر مقدار از $\lambda_{k,l}$ جواب (۹۳-۷) را تعیین کرده‌ایم که در شرط (۹۴-۷) صادق است.

ج) کوانتس انرژی. توابع شعاعی

اکنون لازم می‌کنیم که جواب قبلی از لحاظ فیزیکی رفتار مجانبی قابل قبولی داشته باشد. [قسمت ب-۱ بخش ۳-۷-۴ را ببینید]. این شامل کوانتس مقادیر ممکن $\lambda_{k,l}$ خواهد شد. اگر عبارت داخل کروشه در طرف راست (۱۰۰-۷)، به ازای هر عدد صحیح q ، صفر نشود، بسط (۹۵-۷) یک سری نامتناهی واقعی است، که برای آن

$$\frac{c_q}{c_{q-1}} \underset{q \rightarrow \infty}{\sim} \frac{2\lambda_{k,l}}{q} \quad (101-7)$$

اکنون، بسط سری توانی تابع $e^{\rho\lambda_{k,l}}$ عبارت است از

$$\begin{cases} e^{\rho\lambda_{k,l}} = \sum_{q=0}^{\infty} d_q \rho^q \\ d_q = \frac{(\rho\lambda_{k,l})^q}{q!} \end{cases} \quad (102-7)$$

و در نتیجه

$$\frac{d_q}{d_{q-1}} = \frac{\rho\lambda_{k,l}}{q} \quad (103-7)$$

اگر (۱۰۱-۷) و (۱۰۳-۷) را مقایسه کنیم به سهولت می بینیم که، به ازای مقادیر بزرگ ρ ، سری مورد نظر به مانند $e^{\rho\lambda_{k,l}}$ رفتار می کند. بنابراین، تابع متناظر $u_{k,l}$ [فرمول (۹۲-۷)] متناسب با $e^{\rho\lambda_{k,l}}$ است، که از نظر فیزیکی قابل قبول نیست.

در نتیجه؛ باید تمام مواردی را که در آنها بسط (۹۵-۷) یک سری نامتناهی است کنار بگذاریم. تنها مقادیر ممکن $\lambda_{k,l}$ مقادیری هستند که برای آنها (۹۵-۷) فقط تعداد محدودی جمله دارد، یعنی، مقادیری که برای آنها $u_{k,l}$ به یک چندجمله‌ای تبدیل می شود. بنابراین، تابع متناظر $u_{k,l}$ از نظر فیزیکی قابل قبول است، زیرا رفتار مجانبی آن توسط $e^{-\rho\lambda_{k,l}}$ تعیین می شود. در نتیجه، تمام آنچه که نیاز داریم یک عدد صحیح k است به طوری که عبارت داخل کروشه طرف راست (۱۰۰-۷) به ازای $q = k$ صفر شود؛ آنگاه ضریب متناظر c_k صفر است، همین طور تمام ضرایب از مرتبه بالاتر صفرند. زیرا صفر بودن c_k می رساند که c_{k+1} نیز صفر است، و غیره. برای l معین، مقادیر متناظر $\lambda_{k,l}$ را توسط این عدد صحیح k مشخص می کنیم (توجه کنید که k بزرگتر از l مساوی ۱ است، زیرا c_0 هیچگاه صفر نیست). بنابراین، بر طبق (۱۰۰-۷) داریم

$$\lambda_{k,l} = \frac{1}{k+l} \quad (104-7)$$

برای یک l معین، تنها مقادیر ممکن انرژی [فرمول (۸۹-۷)] عبارتند از

$$E_{k,l} = \frac{-E_I}{(k+l)^2} ; k = 1, 2, 3, \dots \quad (105-7)$$

از این نتیجه در بخش ۷-۳-۴ بحث خواهیم کرد.

بنابراین، $y_{k,l}$ یک چندجمله‌ای است که جمله با کمترین مرتبه آن ρ^{k+1} است و جمله با بیشترین مرتبه آن برحسب ρ^{k+l} است. ضرایب مختلف آن را می‌توان با حل رابطه بازگشتی (۷-۱۰۰) برحسب c_0 ، محاسبه کرد؛ این رابطه را می‌توانیم با استفاده از (۷-۱۰۴) به صورت زیر بنویسیم

$$c_q = -\frac{2(k-q)}{q(q+2l+1)(k+l)} c_{q-1} \quad (۷-۱۰۶)$$

به سادگی می‌توان نشان داد که

$$c_q = (-1)^q \left(\frac{2}{k+l}\right)^q \frac{(k-1)!}{(k-q-1)!} \frac{(2l+1)!}{q!(q+2l+1)!} c_0 \quad (۷-۱۰۷)$$

بنابراین، $u_{k,l}(\rho)$ توسط فرمول (۷-۹۲) داده می‌شود، و c_0 (با تقریب یک ضریب فاز) توسط شرط بهنجارش (۷-۳۴) تعیین می‌شود [البته، ابتدا باید با استفاده از (۷-۸۸) به متغیر r برگردیم]. بالاخره، تابع حقیقی $R_{k,l}(r)$ را با تقسیم $u_{k,l}(r)$ بر r به دست می‌آوریم. سه مثال زیر برداشتی از شکل این توابع شعاعی به دست می‌دهد

$$R_{k=1,l=0}(r) = 2(a_0)^{-r/2} e^{-r/2a_0} \quad (الف ۷-۱۰۸)$$

$$R_{k=2,l=0}(r) = 2(2a_0)^{-r/2} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0} \quad (ب ۷-۱۰۸)$$

$$R_{k=1,l=1}(r) = (2a_0)^{-r/2} \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \quad (ج ۷-۱۰۸)$$

۷-۳-۴ بحث نتایج

الف) مرتبه بزرگی پارامترهای اتمی

فرمولهای (۷-۱۰۵) و (۷-۱۰۸) نشان می‌دهند که، برای اتم هیدروژن، انرژی یونش E_I ، که با (۷-۸۰) الف) تعریف می‌شود، و شعاع بور، که با (۷-۸۱) ب) داده می‌شود، نقش مهمی دارند. این کمیتها مرتبه بزرگی انرژیها و گستردگی فضایی تابع موجهای وابسته به حالتهای مقید اتم هیدروژن

را می‌دهند. (۷-۸۱ الف) و (۷-۸۱ ب) را می‌توان به شکل زیر نوشت

$$E_I = \frac{1}{4} \alpha^2 \mu c^2 \quad (۷-۱۰۹ الف)$$

$$a_0 = \frac{1}{\alpha} \lambda_c \quad (۷-۱۰۹ ب)$$

که α یک ثابت بدون بعد است که ثابت ساختار ریز نامیده می‌شود و نقش بسیار مهمی در فیزیک دارد

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137} \quad (۷-۱۱۰)$$

و λ_c با رابطه زیر تعریف می‌شود

$$\lambda_c = \frac{\hbar}{\mu c} \quad (۷-۱۱۱)$$

چون μ تقریباً همان m_e ، جرم سکون الکترون، است، λ_c عملاً برابر طول موج کامپتون الکترون است، که برابر است با

$$\frac{\hbar}{m_e c} \approx 2.42 \times 10^{-12} \text{ \AA} \quad (۷-۱۱۲)$$

بنابراین، رابطه (۷-۱۰۹ ب) نشان می‌دهد که a_0 اندازه‌ای حدود صد برابر طول موج کامپتون الکترون دارد. رابطه (۷-۱۰۹ الف) نشان می‌دهد که مرتبه بزرگی انرژی بستگی الکترون بین $10^{-4} \mu c^2$ و $10^{-5} \mu c^2$ است که عملاً برابر انرژی سکون الکترون است

$$m_e c^2 \approx 0.51 \times 10^6 \text{ eV} \quad (۷-۱۱۳)$$

نتیجه می‌شود که

$$E_I \ll m_e c^2 \quad (۷-۱۱۴)$$

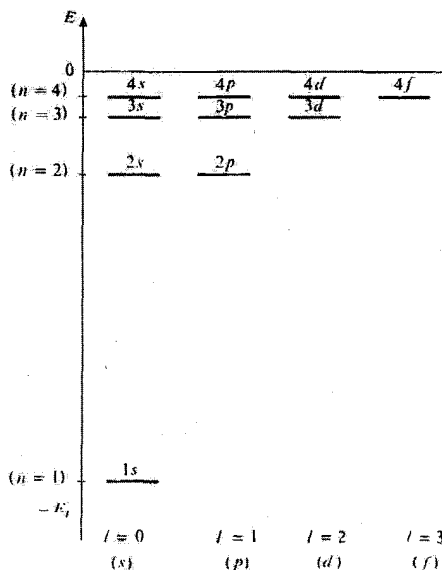
این نتیجه انتخاب معادله شرودینگر غیرنسبیتی را برای توصیف اتم هیدروژن توجیه می‌کند. البته، اثرات نسبیتی هرچند کوچکی وجود دارند؛ با این همه، کوچکی این اثرات باعث می‌شود که آنها توسط نظریه اختلال مورد مطالعه قرار گیرند (فصل ۱۱ و ۱۲ را ببینید).

ب) ترازهای انرژی

۱. مقادیر ممکن اعداد کوانتومی؛ واگنیا

برای l معین، تعداد نامحدودی از مقادیر ممکن انرژی متناظر با $k = 1, 2, 3, \dots$ وجود دارند [فرمول (۷-۱۰۵)]. هرکدام از این انرژیها، دست کم واگن مرتبه $(2l + 1)$ است: این یک واگنی اساسی است که مربوط به این واقعیت است که معادله شعاعی فقط بستگی به اعداد کوانتومی l دارد نه به m (بخش ۷-۱-۳). اما، واگنهای اتفاقی هم وجود دارند: معادله (۷-۱۰۵) نشان می‌دهد که دو ویژه‌مقدار $E_{k',l'}$ و $E_{k,l}$ متناظر با معادلات شعاعی مختلف ($l' \neq l$) در صورتی مساوی‌اند که $k + l = k' + l'$. شکل ۷-۴، که در آن اولین ویژه‌مقادیر وابسته به $l = 0, 1, 2, 3$ بر مبنای یک مقیاس انرژی نشان داده شده‌اند به‌وضوح چندواگنی اتفاقی را ظاهر می‌سازد. در مورد خاص اتم هیدروژن $E_{k,l}$ به k و l به‌طور مجزا بستگی ندارد بلکه به مجموع آنها وابسته است. قرار می‌دهیم

$$n = k + l \tag{۷-۱۱۵}$$



شکل ۷-۴. ترازهای انرژی اتم هیدروژن. انرژی E_n هر تراز تنها به n بستگی دارد. به‌ازای یک n ثابت، مقادیر ممکن برای l عبارت‌اند از: $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$. به هرکدام از این مقادیر l ، مقدار m متناظر است: $m = -l, -l + 1, \dots, l$. در نتیجه تراز E_n ، n^2 بار واگن است.

حالت‌های مختلف انرژی توسط عدد صحیح n (بزرگتر از یا مساوی ۱) مشخص می‌شوند، و (۱۰۵-۷) می‌شود

$$E_n = -\frac{1}{n^2} E_I \quad (116-7)$$

برطبق (۱۱۵-۷)، این هم‌ارز مشخص کردن k و l یا n و l جهت تعیین ویژه‌تابعها است. بنابه قرارداد، از این پس از اعداد کوانتومی n و l استفاده خواهیم کرد. انرژی توسط n که آن را عدد کوانتومی اصلی می‌نامند مشخص می‌شود؛ یک مقدار معین n ، آنچه را لایهٔ الکترونی نامیده می‌شود، مشخص می‌کند.

چون k لزوماً عدد صحیحی است که بزرگتر از یا مساوی ۱ است (بخش ۷-۳-۳-ج)، فقط تعداد محدودی از مقادیر l وابسته به یک مقدار n وجود دارد. برطبق (۱۱۵-۷)، اگر n ثابت باشد، داریم

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1 \quad (117-7)$$

لایه‌ای که توسط n مشخص شود به اصطلاح حاوی n زیرلایه است^۱ که هرکدام با یکی از مقادیر l داده شده در (۱۱۶-۷) متناظر است. بالاخره، هر زیرلایه شامل $(2l+1)$ حالت مجزاست، که به $(2l+1)$ مقدار ممکن m برای یک l معین، وابسته است. پس واگنی کل تراز انرژی E_n برابر است با

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2 \frac{(n-1)n}{2} + n = n^2 \quad (118-7)$$

در فصل ۹ خواهیم دید که وجود اسپین الکترون این عدد را در ۲ ضرب می‌کند (اگر اسپین پروتون را نیز در نظر بگیریم، که برابر اسپین الکترون است، یک ضریب ۲ دیگر به دست می‌آوریم).

۲. نمادگذاری طیف‌نمایی

به دلایل تاریخی (عطف به دوره‌ای، قبل از تکوین مکانیک کوانتومی، که در آن مطالعهٔ طیفها به رده‌بندی تجربی خطوط متعدد مشاهده شده منجر شده است) مقادیر مختلف l را با حروف الفبا

۱. مفهوم زیرلایه را می‌توان حتی در مدل نیمه‌کلاسیک زومرفلد پیدا کرد. این مدل به هر مقدار n از عدد کوانتومی n ، مدار بیضوی با یک انرژی و تکانه‌های متفاوت نسبت می‌دهد. یکی از این مدارها دایره‌ای است؛ این مداری است که مربوط به مقدار ماکزیموم تکانهٔ زاویه‌ای است.

نشان می‌دهند. تناظر به صورت زیر است:

$$\begin{aligned} l = 0 &\longleftrightarrow s \\ l = 1 &\longleftrightarrow p \\ l = 2 &\longleftrightarrow d \\ l = 3 &\longleftrightarrow f \\ l = 4 &\longleftrightarrow g \\ &\vdots \end{aligned} \quad (119-7)$$

به ترتیب الفبایی

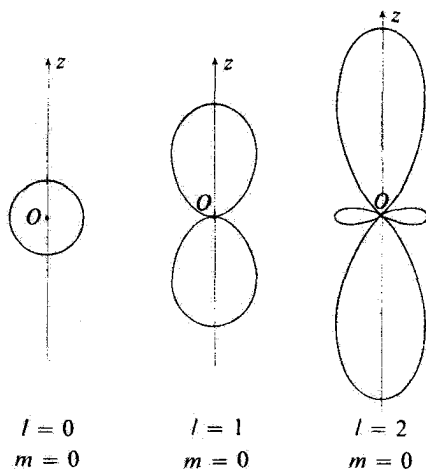
بنابراین، نمادگذاری طیف‌نمایی یک زیرلایه را با عدد مربوط n و سپس حرف متناظر را با مقدار l مشخص می‌کند، بدین ترتیب، تراز پایه که گاهی "لایه K " نامیده می‌شود [و بر طبق (7-117)] واگن نیست]، شامل فقط زیرلایه $1s$ است؛ اولین لایه برانگیخته، یا "لایه L "، شامل زیرلایه‌های $2s$ و $2p$ است؛ دومین تراز برانگیخته ("لایه M ") شامل زیرلایه‌های $3s$ ، $3p$ و $3d$ است، و غیره. (حروف بزرگ مربوط به لایه‌های متوالی به ترتیب الفبایی هستند که با حروف K شروع می‌شود).

ج) تابع موجها

تابع موجهای وابسته به ویژه‌حالت‌های مشترک L_z ، L^2 ، و هامیلتونی H اتم هیدروژن عموماً توسط سه عدد کوانتومی k ، l و m ، همان‌طور که تاکنون انجام داده‌ایم، مشخص نمی‌شوند بلکه توسط سه عدد کوانتومی n ، l و m مشخص می‌شوند [رفتن از یک مجموعه به مجموعه دیگر به سادگی با استفاده از رابطه (7-114) انجام می‌شود]. چون عملگرهای H ، L^2 و L_z تشکیل یک مجموعه کامل مشاهده‌پذیرهای جابه‌جایی‌پذیر می‌دهند (بخش 7-1-3) مشخص کردن سه عدد صحیح n ، l و m که هم‌ارز مشخص کردن ویژه‌مقدارهای H ، L^2 و L_z است، ویژه‌تابعهای متناظر $\varphi_{n,l,m}(r)$ را بدون ابهام تعیین می‌کند.

۱. بستگی زاویه‌ای

همان‌طور که در مورد هر پتانسیل مرکزی صادق است، توابع $\varphi_{n,l,m}(r)$ حاصلضرب یک تابع شعاعی و یک هماهنگ کروی $Y_l^m(\theta, \varphi)$ است. برای روشن ساختن بستگی زاویه‌ای آنها، می‌توانیم فاصله‌ای را روی محوری که توسط زوایای قطبی θ و φ مشخص می‌شود اندازه بگیریم که برای هر r ثابت متناسب با $|\varphi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi)|^2$ است. بدین ترتیب، یک سطح دوران حول محور Oz به دست می‌آوریم، زیرا می‌دانیم که $Y_l^m(\theta, \varphi)$ فقط از طریق عامل $e^{im\varphi}$ به بستگی دارد



شکل ۷-۵ بستگی زاویه‌ای، $Y_l^m(\theta, \varphi)$ ، برخی تابع موجهای مانای اتم هیدروژن، متناظر با مقادیر معین l و m . برای هر راستایی با زاویه‌های قطبی θ و φ ، مقدار $|Y_l^m(\theta, \varphi)|^2$ ثبت می‌شود؛ بدین ترتیب، یک سطح دوران حول محور Oz به دست می‌آید. وقتی $l = 0$ ، این سطح یک کره به مرکز O است؛ برای مقادیر بالاتر l ، سطوح پیچیده‌تر می‌شوند.

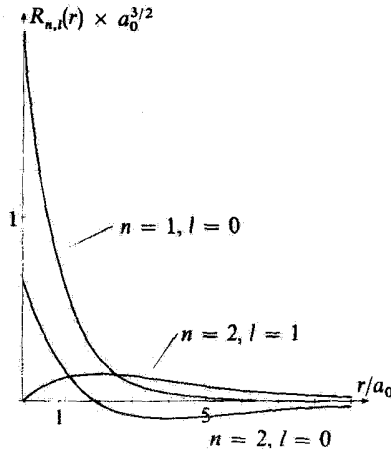
(بخش ۶-۴-۱ ب): در نتیجه، $|Y_l^m(\theta, \varphi)|^2$ مستقل از φ است. بنابراین، می‌توانیم مقطع آن را توسط صفحه‌ای شامل Oz نمایش دهیم. این چیزی است که در شکل ۷-۵ برای $m = 0$ و $l = 0, 1, 2$ انجام داده‌ایم [هماهنگهای گروه متناظر در مکمل ۱ فصل ۶، فرمولهای (۳۱) و (۳۲) و (۳۳) داده شده‌اند]: Y_0^0 یک ثابت است، و از این رو تقارنی گروه دارد؛ $|Y_1^0|^2$ متناسب با $\cos^2 \theta$ است، و $|Y_2^0|^2$ متناسب با $(3 \cos^2 \theta - 1)^2$ است.

۲. بستگی شعاعی

توابع شعاعی $R_{n,l}(r)$ ، که هر کدام از آنها یک زیرلایه را مشخص می‌کنند، می‌توانند از نتایج بخش ۷-۴-۳ ج، و در عین حال با توجه به تغییر در نمادگذاری معرفی شده در فرمول (۷-۱۱۴)، محاسبه شوند. شکل ۷-۶ نمایشگر تغییر سه تابع شعاعی داده شده در (۷-۱۰۸) نسبت به r است:

$$R_{k=1,l=0} \equiv R_{n=1,l=0}; R_{k=2,l=0} \equiv R_{n=2,l=0}; R_{k=1,l=1} \equiv R_{n=2,l=1} \quad (7-119)$$

رفتار $R_{n,l}(r)$ در مجاورت $r = 0$ مانند رفتار r^l است (بحث بخش ۷-۱-۲ ج). در نتیجه، فقط در مورد حالت‌های مربوط به زیرلایه‌های s ($l = 0$) یک احتمال غیرصفر برای حضور ذره در مبدأ به دست می‌آید. هرچه l بزرگتر باشد، ناحیه حول پروتون، که در آن احتمال مکانی الکترون قابل



شکل ۶-۷ بستگی شعاعی $R_{n,l}(r)$ تابع موج وابسته به چند تراز اولیه اتم هیدروژن. وقتی $r \rightarrow 0$ ، $R_{n,l}(r)$ به صورت r^l تغییر می‌کند؛ فقط حالت‌های s (که برای آن $l = 0$ است) دارای یک احتمال مکانی غیرصفر در مبدأ است.

صرفنظر است، وسیعتر است. این دارای بعضی پیامدهای فیزیکی است، به ویژه در پدیده گبراندازی الکترونی توسط برخی هسته‌ها و در ساختار فوق‌رین خطوط (فصل ۱۲، بخش ۱۲-۲-۲ را ببینید). بالاخره، می‌توانیم فرمول (۷-۸۰ب) برای شعاع‌های متوالی بور را به دست آوریم. برای این کار، حالت‌های مختلفی در نظر بگیرید که برای آنها $l = n - 1$ است. حال تغییر چگالی احتمال نسبت به γ را برای هر کدام از مرزهای قبلی در یک زاویه فضایی بینهایت کوچک $d\Omega$ حول راستای ثابتی با زوایای قطبی θ و φ ، محاسبه می‌کنیم. به طور کلی، احتمال مکانی برای الکترون در عنصر حجم $d^3r = r^2 dr d\Omega$ واقع در نقطه (r, θ, φ) با رابطه زیر داده می‌شود

$$d^3 \mathcal{P}_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = |\varphi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 dr d\Omega$$

$$= |R_{n,l}(r)|^2 r^2 dr \times |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2 d\Omega \quad (۱۲۱-۷)$$

در اینجا θ, φ ، و $d\Omega$ را ثابت گرفته‌ایم. پس احتمال یافتن الکترون بین r و $r + dr$ در زاویه فضایی مورد نظر متناسب با $r^2 |R_{n,l}(r)|^2 dr$ است. بنابراین، چگالی متناظر، با تقریب یک ضریب ثابت، برابر $|R_{n,l}(r)|^2$ است (عامل r^2 ناشی از عبارت عنصر حجمی در مختصات کروی است). موارد جالب برای ما در اینجا مواردی هستند که برای آنها $l = n - 1$

۱. این حالتها متناظر با مدارهای دایره‌ای نظریه زومرفلد هستند (یادداشت صفحه ۵۵۲ را ببینید).

یعنی $k = n - l = 1$; آنگاه، قسمت ج-۳ بخش ۷-۳-۲ نشان می‌دهد که چند جمله‌ای وارد در $R_{n,l}(r)$ شامل فقط یک جمله بر حسب $(r/a_0)^{n-1}$ است. بنابراین، احتمال مطلوب متناسب است با

$$f_n(r) = \frac{r^2}{a_0^3} \left[\left(\frac{r}{a_0} \right)^{n-1} e^{-r/na_0} \right]^2$$

$$= \left(\frac{r}{a_0} \right)^{2n} e^{-2r/na_0} \quad (122-7)$$

این تابع یک ماکزیموم به‌ازای

$$r = r_n = n^2 a_0 \quad (123-7)$$

دارد، که شعاع مدار بور متناظر با انرژی E_n است. در پایان، در جدول زیر عبارتهای مربوط به تابع موجهای اولین ترازهای انرژی آورده شده‌اند:

$\varphi_{n=1, l=0, m=0} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$	تراز ۱s
$\varphi_{n=2, l=0, m=0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0} \right) e^{-r/2a_0}$	تراز ۲s
$\varphi_{n=2, l=1, m=1} = -\frac{1}{\lambda \sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \sin \theta e^{i\varphi}$	تراز ۲p
$\varphi_{n=2, l=1, m=0} = \frac{1}{\sqrt{2\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \cos \theta$	
$\varphi_{n=2, l=1, m=-1} = \frac{1}{\lambda \sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \sin \theta e^{-i\varphi}$	

مراجع برای مطالعه بیشتر
ذره در یک پتانسیل مرکزی:

Messiah (1.17), chap. IX; Schiff (1.18), §16.

اتم بور-زوموفلد و نظریه کوانتوم:

Cagnac and PebayPeyroula (11.2), chaps. V, VI and XIII; Born (11.4), chap. V, §§1 and 2; Pauling and Wilson (1.9), chap. II; Tomonaga (1.8), Vol. I; Eisberg and Resnick (1.3), chap. 4.

توابع موج هیدروژن ماندها:

Levine (12.3), §6.5; Karplus and Porter (12.1), §§3.8 and 3.10; Eisberg and Resnick (1.3), §§7.6 and 7.7.

واگنی وابسته به پتانسیل $1/r$ (گروه دینامیک)

Borowitz (1.7). §13.7; Schiff (1.18), §30; Bacry (10.31), §6.11

رفتار ریاضی معادلات دیفرانسیل:

Morse and Feshbach (10.13), chaps. 5 and 6; Courant and Hilbert (10.11), vol. I, §V-11.

۱. دستگاههای هیدروژن‌گونه

۱. ارائه دستگاههای هیدروژن‌گونه مختلف که در مورد آنها محاسبات فصل ۷ می‌تواند مستقیماً به‌کار رود. تأکید بر بحثهای فیزیکی و تأثیر جرم ذرات درگیر در دستگاه است. ساده است و برای مطالعه اولیه توصیه می‌شود.

۲. یک مثال قابل حل از پتانسیل مرکزی: نوسانگر هماهنگ سه‌بعدی همسانگرد.

۲. مطالعه مورد دیگری (یک نوسانگر و هماهنگ سه‌بعدی) که در آن امکان دارد انرژی ترازهای یک ذره در پتانسیل مرکزی را توسط روش فصل ۷ دقیقاً محاسبه کرد (جواب معادله شعاعی). از لحاظ نظری مشکل نیست؛ می‌تواند به‌عنوان یک تمرین در نظر گرفته شود.

۳. جریانهای احتمال وابسته به‌حالت‌های مانای اتم هیدروژن.

۳. نتایج بخش ۷-۳-۴-ج مربوط به خواص حالت‌های مانای اتم هیدروژن را با محاسبه جریانهای احتمال آنها تکمیل می‌کند. مختصر و ساده، مفید برای مکمل ۴ فصل ۵.

۴. اتم هیدروژن واقع در میدان مغناطیسی یکنواخت. پارامغناطیس و دیامغناطیس. اثر زیمان.

۴، ۵، و ۶: بحث در مورد چند پدیده فیزیکی، با استفاده از نتایج فصل ۷.

۴. خواص یک اتم در میدان مغناطیسی (دیامغناطیس، پارامغناطیس، اثر زیمان). نسبتاً مشکل، و به‌علت کاربردهای متعدد آن مهم.

۵. مطالعه برخی اوربیتال‌های اتمی. اوربیتال‌های هیبریدی.

۵. مکملی به‌منظور معرفی مفهوم اوربیتال هیبریدی اتمی، اساسی برای درک برخی خواص پیوند شیمیایی. از لحاظ فیزیکی مشکل نیست. روی جنبه هندسی تابع موجها تأکید می‌کند.

۶. ترازهای ارتعاشی-دورانی مولکولهای دواتمی.
۶. کاربرد مستقیم نظریه فصل ۷ برای مطالعه طیف دورانی-ارتعاشی مولکولهای دواتمی غیر دوقطبی. دنباله مکملهای ۱ فصل ۵ (بخش ۱) و ۳ فصل ۶؛ نسبتاً مشکل.

۷. تمرینات.
۷. تمرین ۲ تأثیر میدان مغناطیسی یکنواخت را روی ترازهای یک دستگاه فیزیکی ساده، در یک مورد قابل حل دقیق، مطالعه می‌کند. این تمرین یک مثال واقعی از نقطه نظرات کلی مکملهای ۳ و ۴ فصل ۵ مربوط به تأثیر جمله‌های پارامغناطیسی و دیامغناطیسی هامیلتونی به دست می‌دهد.

دستگاههای هیدروژن گونه

۱. دستگاههای هیدروژن گونه با یک الکترون
 - الف) دستگاههای از لحاظ الکتریکی خنثی
 ۱. ایزوتوپهای سنگین هیدروژن
 ۲. موثونیم
 ۳. یوزیترونیم
 ۴. دستگاههای هیدروژن گونه در فیزیک حالت جامد
 - ب) یونهای هیدروژن گونه
۲. دستگاههای هیدروژن گونه بدون الکترون
 - الف) اتمهای موثونی
 - ب) اتمهای هادرونی

محاسبات فصل ۷ که ما را قادر می‌سازد تا خواص فیزیکی متعدد اتم هیدروژن را (ترازهای انرژی، توزیع فضایی تابع موجها، و غیره) تعیین کنیم، بر این واقعیت متکی است که سیستم تحت مطالعه از دو ذره ترکیب یافته است (یک الکترون و یک پروتون) که انرژی جاذبه متقابل آنها با فاصله بین آنها تناسب عکس دارد. دستگاههای متعدد دیگری در فیزیک وجود دارند که این شرط را دارا هستند: دوتریم یا تریتم، موثونیم یوزیترونیم، اتمهای موثونی و غیره. بنابراین، نتایج به دست آمده در فصل ۷ به طور مستقیم در این مثالها قابل کاربردند. تمام آنچه که احتیاج داریم تعویض ثابتهای وارد شده در محاسبات است (جرمها و بارهای دو ذره). این چیزی است که در این مکمل انجام خواهیم داد، که در آن، به ویژه، مطالعه خواهیم کرد چگونه شعاع بور و انرژی یونش E_I در هر کدام از دستگاههای مورد نظر تغییر می‌کنند. آنگاه، تابع موجهای وابسته به حالت‌های مانای آنها و انرژیهای متناظر، با جایگذاری a_0 و E_I در فرمولهای (۷-۱۰۸) و (۷-۱۱۵) از فصل ۷ توسط مقادیر جدیدشان، به دست می‌آیند، که مرتبه بزرگی گسترش فضایی تابع موجها و انرژیهای بستگی این دستگاهها را می‌دهند. عبارتهای مربوط به a_0 و E_I را یادآوری می‌کنیم

$$a_0 = \lambda_c \frac{1}{\alpha} = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \quad (1)$$

$$E_I = \frac{1}{2} \mu c^2 \alpha^2 = \frac{\mu e^4}{2 \hbar^2} \quad (2)$$

که μ جرم کاهش یافته دستگاه الکترون-پروتون است

$$\mu = \mu(\text{H}) = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \simeq m_e \left(1 - \frac{m_e}{m_p} \right) \quad (۳)$$

و e^+ شدت پتانسیل جاذبه $V(r)$ را مشخص می‌کند

$$V(r) = -\frac{e^2}{|r_1 - r_2|} \quad (۴)$$

در مورد هیدروژن، دیدیم که

$$a_0(\text{H}) \simeq 0.52 \text{ \AA} \quad (۵\text{-الف})$$

$$E_I(\text{H}) = 13.6 \text{ eV} \simeq 2.2 \times 10^{-18} \text{ J} \quad (۵\text{-ب})$$

چگونه می‌توانیم مقادیر متناظر را برای دستگاهی از دو ذره اختیاری به جرمهای m_1 و m_2 که انرژی جاذبه آنها برابر است با

$$V'(r) = -\frac{Ze^2}{|r_1 - r_2|} \quad (۶)$$

(Z پارامتر بدون بعد است) به دست آوریم؟ تمام آنچه که باید انجام دهیم محاسبه جرم کاهش یافته μ دستگاه با جانشانی m_p و m_e توسط m_1 و m_2 در (۳)

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (۷\text{-الف})$$

و جاگذاری نتیجه به دست آمده در (۱) و (۲) است و دقت در انجام جاگذاری زیر

$$e^2 \implies Z e^2 \quad (۷\text{-ب})$$

چیزی است که در چند مثال فیزیکی انجام خواهیم داد.

۱. دستگاههای هیدروژن‌گونه با یک الکترون الف) دستگاههای از لحاظ الکتریکی خنثی

۱. ایزوتوپهای سنگین هیدروژن

نزدیکترین دستگاههای فیزیکی به اتم هیدروژن عبارت‌اند از دوایزوتوپ آن، یعنی دوتریم و تریتیم. در این اتمها، به جای پروتون یک هسته با همان بار پروتون ولی دارای یک یا دو نوترون علاوه بر پروتون وجود دارد. جرم هسته دوتریم تقریباً $2m_p$ ، و جرم هسته تریتیم $3m_p$ است. بنابراین، جرمهای کاهش‌یافته، در این دو مورد می‌شوند

$$\mu(\text{دوتریم}) \simeq m_e \left(1 - \frac{m_e}{2m_p} \right) \quad (\text{الف-۸})$$

$$\mu(\text{تریتیم}) \simeq m_e \left(1 - \frac{m_e}{3m_p} \right) \quad (\text{ب-۸})$$

چون

$$\frac{m_e}{m_p} \simeq \frac{1}{1836} \ll 1 \quad (9)$$

واضح است که جرمهای کاهش‌یافته دوتریم و تریتیم بسیار نزدیک به جرم کاهش‌یافته هیدروژن است و می‌توانند به جای m_e بنشینند بدون آنکه عدم دقت زیادی ایجاد شود.

اگر روابط (۳)، یا (الف-۸) یا (ب-۸) را در فرمولهای (۱) و (۲) قرار دهیم ملاحظه می‌کنیم که شعاعهای بور و انرژیهای اتمهای هیدروژن، دوتریم و تریتیم عملاً یکسان هستند. با وجود این، تفاوت‌های جزئی، حدود هزارم از لحاظ مقدار نسبی وجود دارند. این تفاوتها را می‌توان به‌طور تجربی آشکارسازی کرد. به‌عنوان مثال، با یک طیف‌نگار اپتیکی با توان تفکیک کافی، می‌توان مشاهده کرد که طول‌موجهای خطوط گسیل‌یافته توسط اتمهای هیدروژن به‌طور جزئی بزرگتر از طول‌موجهای خطوط تریتیم هستند. این تغییر جزئی در طول‌موجهای گسیل‌یافته مربوط به این واقعیت است که هسته بینهایت سنگین نیست، و وقتی الکترون حرکت می‌کند ثابت نمی‌ماند؛ این را "اثر جرم متناهی هسته" گویند. آزمایش تأیید کرده است که فرمولهای (الف-۷)، (۱) و (۲) به‌طور بسیار دقیقی این اثر را توضیح می‌دهند.

۲. موثونیم

موثون ذره‌ای است که خواص اساسی آن، همان خواص الکترون است، به استثنای تفاوت در جرم (جرم m_μ موثون برابر $207m_e$ است). به‌ویژه، موثون به نیروهای هسته‌ای (برهم‌کنش قوی) حساس

نیست. دو نوع موئون وجود دارد، μ^- و μ^+ ، که بار آنها به ترتیب برابر بار الکترون e^- و پوزیترون e^+ است.^۱ نظیر تمام ذرات باردار دیگر، موئون به برهمکنشهای الکترومغناطیسی حساس است. بنابراین، می‌توانیم یک دستگاه فیزیکی متشکل از موئون μ^+ و یک الکترون e^- در نظر بگیریم، که در آن جاذبه الکتروستاتیکی همان است که بین یک پروتون و یک الکترون وجود دارد. در نتیجه، حالت‌های مقید وجود دارند. این دستگاه به اصطلاح ایزوتوپ سبک هیدروژن است، که در آن موئون μ^+ به جای پروتون نشسته است. این "ایزوتوپ" را موئونیم گویند (جرم اتمی آن در حدود $m_p/m_\mu \simeq 0.۱$ است).

مشکل نیست نتایج این فصل را جهت به دست آوردن انرژی یونش و شعاع بور وابسته به موئونیم به کار ببریم؛ از (۱)، (۲)، و (۷) داریم

$$a_0(\text{موئونیم}) = a_0(\text{H}) \frac{1 + m_e/m_\mu}{1 + m_e/m_p} \simeq a_0(\text{H}) \left(1 + \frac{1}{200}\right) \quad (10\text{-الف})$$

$$E_I(\text{موئونیم}) = E_I(\text{H}) \frac{1 + m_e/m_\mu}{1 + m_e/m_p} \simeq E_I(\text{H}) \left(1 - \frac{1}{200}\right) \quad (10\text{-ب})$$

چون موئون تقریباً ده برابر سبکتر از پروتون است، اثر جرم متناهی هسته‌ای برای موئونیم تقریباً ده برابر بیشتر است تا برای هیدروژن؛ اما، چون الکترون به طور متمایزی سبکتر از موئون است، این اثر کوچک باقی می‌ماند (حدود ۵.۰٪). به عنوان مثال، طول موجهای خطوط نوری گسیل یافته از موئونیم باید نزدیک به طول موج خطوط متناظر در هیدروژن باشند. در واقع، طیف گسیلی نوری موئونیم تاکنون مشاهده نشده است.

از لحاظ تجربی، وجود موئونیم به علت ناپایداریش آشکار شد: موئون μ^+ با گسیل یک پوزیترون و دو نوترینو می‌باشد، و نیمه عمر موئونیم $10^{-6} \times 2.2$ ثانیه است. پوزیترون حاصل از این واپاشی را می‌توان آشکارسازی کرد. این ذره ترجیحاً در راستای اسپین موئون μ^+ گسیل می‌شود^۲ (تا پایستگی پاریته در برهمکنشهای ضعیف). از این رو، آشکارسازی پوزیترون به تعیین تجربی این راستا منجر می‌شود. به علاوه، چون اسپین موئون μ^+ اتم موئونیم به اسپین الکترون جفت می‌شود (جفتدگی ساختار فوق ریز: فصل ۱۲ و مکملهای آن را ببینید)، بسامد تقدیمی آن در میدان مغناطیسی متفاوت از مورد موئون آزاد است. بنابراین، اندازه‌گیری این بسامد وجود اتمهای موئونیم را آشکار می‌کند.

مطالعه موئونیم از اهمیت بسیار زیادی برخوردار است، چه از لحاظ نظری و چه تجربی دو ذره‌ای که این دستگاه را تشکیل می‌دهند تحت تأثیر برهمکنشهای قوی قرار نمی‌گیرند، به طوری که ترازهای انرژی آن

۱. به علاوه، مانند e^- و e^+ ، دو ذره μ^- و μ^+ یاد ذرات یکدیگرند.

۲. به مانند الکترون، موئون دارای اسپین $1/2$ است که به آن یک گشتاور مغناطیسی $\mathbf{M}_\mu = (q_\mu/m_\mu)\mathbf{S}$ وابسته است.

(به‌ویژه، ساختار فوق‌ریز حالت پایه $1s$) را می‌توان با دقت زیاد، بدون وارد کردن هیچ "تصحیح هسته‌ای" در آن، محاسبه کرد (اما برای اتم هیدروژن باید ساختار داخلی و قطبش‌پذیری پروتون، که ناشی از برهم‌کنشهای قوی هستند، به حساب آیند). مقایسه بین پیش‌بینیهای نظری و نتایج تجربی یک آزمون بسیار جدی برای الکتروینامیک کوانتومی است. اندازه‌گیری اخیر ساختار فوق‌ریز موثونیم به‌یک‌ی از بهترین مقادیری که تا به امروز برای ثابت ساختار فوق‌ریز $\alpha = e^2/\hbar c$ به‌دست آمده‌اند منجر شده است.

۳. پوزیترونیم

پوزیترونیم یک دستگاه مقید متشکل از یک الکترون e^- و یک پوزیترون e^+ است. به مانند موثونیم، می‌توان آن را یک ایزوتوپ هیدروژن نامید، که در آن پوزیترون جانشین پروتون شده است. اما باید متذکر شد که وضعیت کاملاً یکی نیست: در اتم هیدروژن، پروتون (که بسیار سنگینتر از الکترون است) تقریباً بدون حرکت می‌ماند، در حالی‌که در پوزیترونیم، پوزیترون، یاد ذره الکترون، وقتی مرکز جرم پوزیترونیم ثابت باشد دارای همان جرم الکترون و در نتیجه همان سرعت است، (شکل ۱ (ب)).

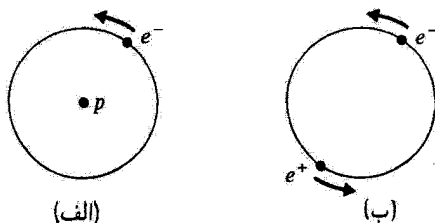
برطبق (۷ الف) جرم کاهش‌یافته وابسته به پوزیترونیم برابر است با

$$\mu(\text{پوزیترونیم}) = \frac{m_e}{2} \quad (11)$$

بنابراین

$$a_0(\text{پوزیترونیم}) \simeq 2a_0(H) \quad (12\text{-الف})$$

$$E_I(\text{پوزیترونیم}) \simeq \frac{1}{4}E_I(H) \quad (12\text{-ب})$$



شکل ۱ نمایش طرح‌وار اتمهای هیدروژن (دستگاه الکترون + پروتون) و پوزیترونیم (دستگاه الکترون + پوزیترون). چون پروتون بسیار سنگینتر از الکترون است، عملاً در مرکز جرم اتم هیدروژن واقع می‌شود؛ الکترون در فاصله $a_0(H)$ حول پروتون "می‌گردد". از طرف دیگر، پوزیترون از لحاظ جرم برابر با الکترون است؛ بنابراین، هر دو این ذرات حول مرکز جرمشان می‌گردند، و فاصله بین آنها برابر است با $a_0(H) = 2a_0$.

بنابراین، برای یک حالت معین پوزیترونیم فاصله میانگین الکترون-پوزیترون دو برابر فاصله الکترون-پروتون برای حالت متناظر اتم هیدروژن است (شکل ۱). اما تفاوت‌های بین انرژی‌های حالت‌های مانا، دو بار کم‌ترند، و طیف خطی نوری گسیل‌یافته توسط پوزیترونیم، از دو برابر کردن تمام طول‌موجهای خطوط متناظر هیدروژن به دست می‌آید.

یادداشت:

از فرمول (۱۲ الف) نباید نتیجه گرفت که شعاع پوزیترونیم دو برابر شعاع اتم هیدروژن است. شعاع بور برداشتی از گستردگی تابع موجهای وابسته به "ذره نسبی" (بخش ۷-۲) که مکان آن، $r_1 - r_2$ ، به فاصله بین دو ذره مربوط است نه به فاصله بین آنها و مرکز جرم G ، می‌دهد. به علاوه، شکل ۱ به وضوح نشان می‌دهد که اتمهای هیدروژن و پوزیترونیم هم اندازه هستند. به طور کلی، تمام دستگاههای هیدروژن-گونه که برای آنها پتانسیل جاذبه توسط (۶) به ازای $Z = 1$ داده می‌شود، دارای شعاع دقیقاً یکسانی هستند زیرا فرمول (۷-۴) نشان می‌دهد که

$$r - r_G = \frac{m_2}{m_1 + m_2} r = \frac{\mu}{m_1} r \quad (13)$$

با استفاده از (۱)، که مرتبه بزرگی گسترش فضایی تابع موج $\varphi_{100}(r)$ مربوط به حالت پایه را می‌دهد، می‌بینیم که "شعاع" ρ اتم می‌تواند توسط فرمول زیر تعریف شود

$$\rho = \frac{\hbar^2}{m_1 Z e^2} \quad (14)$$

که m_1 جرم ذره سبکتر است (ذره سنگینتر به مرکز جرم نزدیکتر است). برای تمام دستگاههایی که تاکنون مورد بررسی قرار داده‌ایم، داریم $Z = 1$ و $m_1 = m_e$ ؛ بنابراین، شعاعهای آنها یکی هستند. مواردی را بعداً خواهیم دید که در آنها شعاع ρ کوچکتر است، خواه به علت $m_1 \neq m_e$ باشد خواه به علت $Z = 1$.

طیف نوری پوزیترونیم این اواخر مشاهده شده است [مرجع (۱۱-۲۳) را ببینید]. راجع به ساختار (فوق ریز) حالت پایه ناشی از برهم‌کنش بین گشتاورهای مغناطیسی الکترون و پوزیترون این ساختار به طور دقیق تعیین شده است (مکمل ۳ فصل ۱۲).

این واقعیت که پوزیترونیم، به مانند موئونیم، یک دستگاه الکتروپدینامیکی محض است (نه الکترون نه پوزیترون هیچ‌کدام به برهم‌کنشهای قوی حساس نیستند) اهمیتی که به مطالعه نظری و تجربی آن داده شده است را توضیح می‌دهد.

همچنین متذکر می‌شویم که پوزیترونیم یک دستگاه ناپایدار است. چون حالت پایه یک حالت ۱s است، الکترون و پوزیترون به یکدیگر تماس پیدا می‌کنند و نابود می‌شوند، و دو یا سه فوتون، بسته به تراز ساختار فوق ریزی که از آن شروع کرده‌اند، ایجاد می‌کنند. مطالعه آهنگ واپاشی متناظر نیز در الکترودینامیک کوانتومی بسیار مورد توجه است.

۴. دستگاه‌های هیدروژن‌گونه در فیزیک حالت جامد

فیزیک اتمی تنها قلمرو کاربرد نظریه‌ی ارائه‌شده در این فصل نیست. برای مثال "اتم‌های بخشنده" جایگزیده در نیم‌رساناها تشکیل دستگاه‌های تقریباً هیدروژن‌گونه در فیزیک حالت جامد می‌دهند. یک بلور سیلیسیم در نظر بگیرید، در شبکه‌ی سیلیسیم، هر اتم از چهار الکترون ظرفیتش برای تشکیل چهار پیوند چهاروجهی با مجاورینش استفاده می‌کند. اگر یک اتم پنج ظرفیتی مثل فسفر (یک اتم بخشنده) به جای سیلیسیم در شبکه قرار گیرد باید یک الکترون ظرفیت از دست بدهد، و بار کل آن مثبت می‌شود. در این صورت این اتم به مانند مرکزی رفتار می‌کند که می‌تواند الکترون را حفظ کند، و با آن تشکیل یک سیستم هیدروژن‌گونه دهد. عملاً نیروی وارد بر الکترون را نمی‌توان مستقیماً از قانون کولن در خلأ محاسبه کرد زیرا سیلیسیم دارای ثابت دی‌الکتریک زیاد $\epsilon \simeq 12$ است، به طوری که به جای رابطه (۴) داریم

$$V(r) = -\frac{e^2}{\epsilon |r_1 - r_2|} \quad (15)$$

برای اینکه کاملاً دقیق باشیم، باید جرم الکترون را توسط "جرم مؤثر" m^* الکترون در سیلیسیم جانشین کنیم، و به علت برهم‌کنش بارهای هسته‌ها در بلور، این جرم متفاوت از جرم الکترون آزاد است. با وجود این، ما به یک بحث کیفی بسنده می‌کنیم، و متذکر می‌شویم که اثر مقدار زیاد ϵ این است که e^2 را در (۱۵) حدود 10^2 بار کاهش می‌دهد، یعنی، برطبق (۱)، شعاع بور را حدود 10^2 بار افزایش می‌دهد. بنابراین، ناخالصی اتم بخشنده، شبیه یک اتم هیدروژن بسیار بزرگ است، که تابع موجهای آن در فواصل بسیار بزرگتر از طول یاخته واحد شبکه سیلیسیم گسترده شده‌اند. اکنون به طور مختصر اکسیژن را که دستگاه هیدروژن‌گونه دیگری در فیزیک حالت جامد است توصیف می‌کنیم. یک بلور نیم‌رسانا را در نظر بگیرید. در غیاب اختلال خارجی، الکترونهای خارجی اتمهای تشکیل دهنده بلور تماماً در حالت‌های متعلق به "نوار ظرفیت" هستند (فرض می‌شود دما به اندازه کافی پایین باشد؛ مکمل ۳ فصل ۱۴ را ببینید). با برتابندگی مناسب بلور، می‌توانیم باعث شویم که الکترون از طریق جذب یک فوتون به "نوار رسانش" (که شامل مجموعه‌ای از ترازهای انرژی است که بالاتر از ترازهای انرژی نوار ظرفیت هستند) برود. بنابراین، جای یک الکترون در نوار

ظرفیت خالی است. این نوار را می‌توان این‌طور تلقی کرد که گویی شامل ذره‌ای است که بار آن مخالف بار یک الکترون است؛ این ذره را "حفره" می‌نامند. حفره می‌تواند یک الکترون از نوار ظرفیت جذب کند و با آن یک دستگاه مقید، که اکسیژن نامیده می‌شود، تشکیل بدهد. اکسیژن به مانند هیدروژن دارای یک رشته ترازهای انرژی است که می‌تواند بین آنها گذار انجام دهد. وجود اکسیژن را می‌توان با اندازه‌گیری جذب نور توسط بلور نشان داد.

ب) یونهای هیدروژن‌گونه

اتم هلیوم خنثی از دو الکترون و یک هسته با بار مثبت $2q_e$ - درست شده است. یک چنین دستگاهی، که متشکل از سه ذره است، نمی‌تواند در چارچوب نظریه فصل ۷ مطالعه شود. اما، اگر یک الکترون به طریقی از اتم هلیوم جدا شود، یک یون He^+ می‌ماند که شبیه اتم هیدروژن است؛ تنها تفاوتها در بار هسته، که دو برابر بار پروتون است (بار کل یون مثبت و برابر است با $-q_e$)، و جرم آن (که برای ${}^4\text{He}$ ، تقریباً چهار برابر جرم پروتون است) وجود دارند. البته، یونهای هیدروژن‌گونه دیگری وجود دارند: یون Li^{++} (اتم لیتیم، وقتی یونیده نیست، دارای $Z = 3$ الکترون است)، یون Be^{+++} ($Z = 4$) و غیره

بنابراین، دستگاهی متشکل از یک هسته، به جرم M و بار مثبت $-Zq_e$ و یک الکترون را در نظر می‌گیریم. اگر (۷ ب) را در (۱) و (۲) قرار دهیم، داریم

$$a_0(Z) \simeq \frac{a_0(H)}{Z} \quad (16)$$

$$E_I(Z) \simeq Z^2 E_I(H) \quad (17)$$

(چون $M \gg m_e$)، از تفاوت بین جرم کاهش‌یافته هیدروژن و جرم کاهش‌یافته یون هیدروژن‌گونه تحت مطالعه صرف‌نظر کرده‌ایم؛ نتایج اثر جرم متناهی هسته‌ای روی a_0 و E_I ، در واقع، در مقایسه با نتایج ناشی از تغییر بار، قابل صرف‌نظر هستند). بنابراین، تمام یونهای هیدروژن‌گونه کوچکتر از اتم هیدروژن هستند، که باید انتظار داشت زیرا هسته و الکترون به‌طور قویتری مقیدند. به علاوه، انرژی آنها به سرعت با Z (به‌طور مربعی) افزایش می‌یابد؛ به‌عنوان مثال، انرژی‌ای که باید به یون Li^{++} بدهیم تا آخرین الکترون آن‌را بکنیم بیشتر از 10^6eV است. به این علت است که بسامدهای الکترومغناطیسی که می‌توانند توسط یون هیدروژن‌گونه گسیل یا جذب شوند، در ناحیه فرابنفش می‌افتند و حتی، وقتی Z به اندازه کافی بزرگ باشد، در قلمرو پرتوهای x واقع می‌شوند.

۲. دستگاههای هیدروژن‌گونه بدون الکترون

تاکنون دستگاههایی را که در نظر گرفتیم تماماً شامل یک الکترون بودند. اما، ذرات متعدد دیگری با همان بار q_e وجود دارند که قادرند با هسته‌ای با بار $Zq_e -$ تشکیل یک دستگاه هیدروژن‌گونه بدهند. چند نمونه خواهیم آورد. "اتمهای" که می‌خواهیم در اینجا مورد بحث قرار دهیم البته به اندازه اتمهای "معمولی" که در رده‌بندی مندلیف ظاهر می‌شوند عادی نیستند. این اتمها ناپایدارند، و به منظور مطالعه آنها، لازم است از شتابدهنده‌های با انرژی زیاد استفاده کنیم تا ذرات لازم برای تشکیل آنها را ایجاد کنند. از این جهت آنها را گاهی "اتمهای اگزوتیک" گویند.

الف) اتمهای موثونی

قبلاً برخی ویژگیهای اساسی موثون را متذکر شدیم و وجود موثون μ^- را خاطر نشان کردیم. وقتی این ذره توسط هسته اتم با بار مثبت جذب شد، می‌تواند با آن یک سیستم مقید تشکیل دهد که آن را "اتم موثونی" گویند.^۱

به‌عنوان مثال، ساده‌ترین اتم موثونی را در نظر بگیرید، که از یک موثون μ^- و یک پروتون ترکیب می‌شود؛ این یک دستگاه خنثی است که شعاع بور آن عبارت است از

$$a_0(\mu^-, p^+) \simeq \frac{\hbar^2}{m_\mu e^2} \simeq \frac{a_0(H)}{200} \quad (18)$$

و انرژی یونش آن به‌صورت زیر است

$$E_I(\mu^-, p^+) \simeq \frac{m_\mu e^4}{2\hbar^2} \simeq 200 E_I(H) \quad (19)$$

بنابراین، اندازه این اتم موثونی حدود چند هزارم یک آنگستروم است. طیف آن از طیف هیدروژن با تقسیم طول‌موجها بر ۲۰۰ به‌دست می‌آید؛ بنابراین، در قلمرو پرتوهای x نرم می‌افتد. چه پیش می‌آید اگر μ^- به‌جای گردش حول یک پروتون، توسط یک هسته N گیر بیفتد؟^۲ که

۱. همچنین می‌توان یک سیستم مقید متشکل از یک موثون μ^+ و یک موثون μ^- را تصور کرد. اما، چون باریکه‌های موثونی که می‌دانیم چگونه تولید می‌شوند شدت کمی دارند، آفرینش چنین اتمی مشکل است و هرگز دیده نشده است.

۲. چنین دستگاهی می‌تواند با تاباندن باریکه μ^- به یک هدف از اتمهای سرب تشکیل شود. وقتی یک μ^- توسط یک هسته سرب گیر بیفتد، حول آن، در فاصله‌ای که حدود ۲۰۰ بار کمتر از فاصله با الکترونهاي داخلی‌ترین لایه اتم است به گردش درمی‌آید. بنابراین، بار هسته عملاً تنها باری است که بر موثون اثر می‌کند. پس، در مطالعه حالت‌های اتم موثونی به سهولت می‌توانیم از الکترونها صرف‌نظر کنیم.

بار آن Z برابر بیشتر است، مثلاً سرب، که برای آن $Z = ۸۲$ پس فرمولهای (۱) و (۲) می‌دهند

$$a_0(\mu^-, N) \simeq \frac{a_0(H)}{۲۰۰Z} \quad (۲۰)$$

$$E_I(\mu^-, N) \simeq ۲۰۰Z^2 E_I(H) \quad (۲۱)$$

با قراردادن $Z = ۸۲$ در این فرمولها، برای گذارهای اتم موثونی سرب، انرژیهای تا چندین MeV ($۱\text{MeV} = ۱۰^6\text{eV}$) به دست می‌آوریم. اما، باید متذکر شد که فرمولهای (۱) و (۲) دیگر در این مورد معتبر نیستند، زیرا از معادله (۲۰) داریم

$$a_0(\mu^-, \text{Pb}) \simeq ۳ \times ۱۰^{-5} \text{\AA} = ۳\text{f} \quad (۲۲)$$

یعنی، شعاعی کمی کوچکتر از شعاع هسته سرب. از این رو، محاسبات این فصل دیگر معتبر نیستند. علت آن است که آنها مبتنی بر پتانسیل $V(r)$ به صورت رابطه (۶) هستند که فقط وقتی صحیح است که ذرات تحت مطالعه، که در فواصلی خیلی بیشتر از ابعاد آنها از هم مجزا شده‌اند،^۱ بتوانند به صورت ذرات نقطه‌ای تلقی شوند. این فرض، که برای هیدروژن کاملاً صادق است، در موردی که در اینجا مطالعه می‌شود معتبر نیست.

با وجود این، (۲۰) و (۲۱) مرتبه بزرگی انرژیها و شعاع اتم موثونی سرب را می‌دهند. نتایج فیزیکی وجود گسترش فضایی غیرصفر هسته ("اثر حجم") با تفصیل بیشتری در مکتب ۴ فصل ۱۱ مورد مطالعه قرار می‌گیرد. اما از این فرصت جهت یادآوری استفاده می‌کنیم که یکی از دلایل توجه به اتمهای موثونی دقیقاً به این نوع اثر ارتباط دارد: موثون μ^- ، ساختار داخلی هسته را، چنانکه گویی، "کاوش" می‌کند، و ترازهای انرژی اتمهای موثونی، بستگی به توزیع بار الکتریکی و مغناطیسی داخل هسته دارد (یادآوری می‌کنیم که موثون به نیروهای هسته‌ای حساس نیست).^۲ بنابراین، مطالعه این حالتها می‌تواند اطلاعاتی که در فیزیک هسته‌ای بسیار مفید است، به دست دهد.

ب) اتمهای هادرونی

"هادرونها" آن ذراتی هستند که تحت برهم‌کنشهای قوی قرار می‌گیرند، برخلاف "لپتونها" که این‌طور نیستند. الکترونها و موثونها، که حالتها می‌تواند آنها در یک پتانسیل کولنی را تاکنون مطالعه

۱. داخل هسته، پتانسیل تقریباً سهمی شکل است (مکلهای ۱ فصل ۵، بخش ۴ و مکتب ۴ فصل ۶).
 ۲. مفهوم نفوذناپذیری دو جسم جامد یک مفهوم ماکروسکوپی است. در مکانیک کوانتومی هیچ چیز مانع نمی‌شود که تابع موجهای دو ذره از جنس مختلف همپوشی داشته باشند.

کرده‌ایم، لپتون هستند. پروتونها، نوترونها، و مزونها نظیر مزون π و غیره هادرون هستند. در میان اینها، آنهایی که بار منفی دارند می‌توانند با یک هستهٔ اتمی، دستگاه مقید هیدروژن‌گونه‌ای به نام "اتم هادرونی" تشکیل دهند. به‌عنوان مثال، دستگاه مزون π^- هستهٔ یک "اتم بیونی"؛ دستگاه ذرهٔ Σ^- هستهٔ یک "اتم سیگماتونیک"؛ دستگاه مزون K^- هستهٔ یک "اتم کائونی"، دستگاه پادپروتون-هستهٔ یک "اتم پادپروتونی" و غیره می‌دهند. اینها تماماً ناپایدارند ولی طول عمر آنها برای اینکه بتوانیم برخی از خطوط طیفی آنها را مشاهده کنیم به اندازهٔ کافی زیاد است. نظریهٔ اتم هیدروژن، که فقط برهم‌کنش الکتروستاتیک بین دو ذرهٔ تحت بررسی را به حساب می‌آورد، البته، در مورد چنین دستگاههایی، که در آنها برهم‌کنشهای قوی نقش مهمی دارند، به‌کار نمی‌رود. اما، در مطالعهٔ حالت‌های برانگیختهٔ اتمها هادرونی که در آنها دو ذره از یکدیگر دورند (غیر از حالت‌های s) می‌توان از برهم‌کنشهای قوی صرف‌نظر کرد زیرا برد آنها بسیار کوتاه است. از این رو، نظریهٔ این فصل قابل کاربرد است، و همین‌طور فرمولهای (۱) و (۲) که در تمام این موارد به شعاعهای بور بسیار کوچکتر و انرژیهای بسیار بیشتر از مورد هیدروژن منجر می‌شوند. بنابراین، اندازه‌گیری بسامدهای طیفی گسیل‌یافته از اتمهای بیونی تعیین دقیق جرم مزون π^- را ممکن می‌سازد.

مراجع برای مطالعهٔ بیشتر

اتمهای خارق‌العاده (اگزوتیک): زیربخش "اتمهای اگزوتیک" از بخش ۱۱ از کتابشناسی را ببینید؛ همچنین مراجع زیر را ببینید

Cagnac and Pebay-Peyroula (11.2), chap. XIX §7; Weissenberg (16.19), chap. 4, §2 and chap. 6.

اکسیتون

Kittel (13.2), chap. 17, p. 538; Ziman (13.3), §6.7.

۱. عبارت "اتم مزونی" گاهی جهت نمایاندن یک دستگاه شامل یک مزون به‌کار می‌رود. به تشابه، چون Σ^- یک هیبرون است (ذره‌ای سنگینتر از پروتون). اتم سیگماتونیک را گاهی "اتم هیبرونی" گویند.

مکمل ۲

یک مثال قابل حل از پتانسیل مرکزی: نوسانگر هماهنگ سه بعدی همسانگرد

۱. حل معادله شعاعی

۲. ترازهای انرژی و تابع موجهای مانا

در این مکمل یک مورد خاص از پتانسیل مرکزی را بررسی می‌کنیم که برای آن معادله شعاعی دقیقاً قابل حل است: نوسانگر هماهنگ سه بعدی همسانگرد. ما قبلاً این مسئله را (مکمل ۵ فصل ۵) با در نظر گرفتن حالت فضایی $\mathcal{E}_x \otimes \mathcal{E}_y \otimes \mathcal{E}_z$ به صورت حاصلضرب تانسوری $\mathcal{E}_x \otimes \mathcal{E}_y \otimes \mathcal{E}_z$ مورد بررسی قرار داده‌ایم؛ و این در نمایش $\{|r\rangle\}$ ، به جداسازی متغیرها در مختصات دکارتی منجر می‌شود. بدین ترتیب، سه معادله دیفرانسیل به دست آوردیم، یکی برحسب متغیر x ، یکی برحسب y و سومی برحسب z . در اینجا، با جداسازی متغیرها در مختصات قطبی، در جستجوی حالت‌های مانایی هستیم که ویژه حالت‌های L_z^2 و L^2 نیز باشند. سپس نشان خواهیم داد چگونه دو پایه \mathcal{E}_x که با این دو روش مختلف به دست می‌آیند، به یکدیگر مربوط‌اند.

همچنین، در مکمل ۱ فصل ۸، حالت‌های مانایی یک ذره آزاد با تکانه زاویه‌ای کاملاً معین را مطالعه خواهیم کرد. این را می‌توان مورد خاص دیگری از پتانسیل مرکزی $[V(r) = 0]$ در نظر گرفت که به یک معادله شعاعی دقیقاً قابل حل منجر می‌شود.

نوسانگر هماهنگ سه بعدی از یک ذره (بدون اسپین) به جرم μ تشکیل می‌شود که تحت پتانسیل زیر قرار دارد:

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2}\mu(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) \quad (1)$$

که ω_x ، ω_y ، و ω_z ثابت‌های مثبت‌اند. نوسانگر را همسانگرد گویند اگر

$$\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega \quad (2)$$

چون پتانسیل (۱) مجموعی است از سه جمله که هر کدام تابع تنها یکی از سه متغیر x ، y ، و

z هستند، می‌توانیم معادله ویژه مقدار هامیلتونی

$$H = \frac{P^2}{2\mu} + V(\mathbf{R}) \quad (3)$$

را با جداسازی متغیرهای x, y, z و در نمایش $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ حل کنیم. این کاری است که در مکمل ۵ فصل ۵ انجام شد. آنگاه، برای نوسانگر همسانگرد، درمی‌یابیم که ترازهای انرژی به شکل زیرند

$$E_n = \left(n + \frac{3}{2}\right) \hbar\omega \quad (4)$$

که n هر عدد مثبت صحیح یا صفر است. مرتبه واگنی g_n مربوط به تراز E_n برابر است با

$$g_n = \frac{1}{2}(n+1)(n+2) \quad (5)$$

و ویژه‌تابعهای وابسته عبارت‌اند از

$$\begin{aligned} \varphi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = & \left(\frac{\beta^2}{\pi}\right)^{3/2} \frac{1}{\sqrt{2^{n_x+n_y+n_z} n_x! n_y! n_z!}} e^{-(\beta^2/2)(x^2+y^2+z^2)} \\ & \times H_{n_x}(\beta x) H_{n_y}(\beta y) H_{n_z}(\beta z) \quad (6) \end{aligned}$$

با

$$\beta = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}} \quad (7)$$

$H_p(u)$ چندجمله‌ای هرمیتی درجه p است؛ مکمل ۲ فصل ۵]. φ_{n_x, n_y, n_z} ویژه‌تابع هامیلتونی H با ویژه‌مقدار E_n است به طوری که

$$n = n_x + n_y + n_z \quad (8)$$

اگر نوسانگر مورد نظر همسانگرد باشد^۱، پتانسیل (۱) تابعی فقط از فاصله r بین ذره و مبدأ است

$$V(r) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 \quad (9)$$

۱. جداسازی متغیرهای قطبی r, θ, φ فقط برای نوسانگر همسانگرد امکانپذیر است.

در نتیجه، سه مؤلفهٔ تکانهٔ زاویه‌ای مداری L ثابت‌های حرکت هستند. می‌خواهیم ویژه‌حالت‌های مشترک H ، L^2 ، و L_z را پیدا کنیم. برای این کار، می‌توانیم به مانند مکمل ۴ فصل ۶، با معرفی عملگرهای مربوط به کوانتومهای دایره‌ای راست و چپ و کوانتومهای "طولی" متناظر با سومین درجهٔ آزادی در امتداد Oz ، رفتار کنیم (اساس این روش در انتهای این مکمل آمده است). اما، ترجیح می‌دهیم از این مثال جهت روشن‌سازی روش بیان‌شده در فصل ۷ [بخش ۷-۱] استفاده کنیم و معادلهٔ شعاعی را با روش چندجمله‌ای حل کنیم.

۱. حل معادلهٔ شعاعی

برای یک مقدار ثابت عدد کوانتومی l ، تابع شعاعی $R_{k,l}(r)$ و انرژیهای $E_{k,l}$ با معادلهٔ زیر داده می‌شوند

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{1}{2} \mu \omega^2 r^2 + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] R_{k,l}(r) = E_{k,l} R_{k,l}(r) \quad (10)$$

قرار می‌دهیم

$$R_{k,l}(r) = \frac{1}{r} u_{k,l}(r) \quad (11\text{-الف})$$

$$\varepsilon_{k,l} = \frac{2\mu E_{k,l}}{\hbar^2} \quad (11\text{-ب})$$

پس معادلهٔ (۱۰) می‌شود

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \beta^2 r^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} + \varepsilon_{k,l} \right] u_{k,l}(r) = 0 \quad (12)$$

[که β ثابت تعریف شده در (۷) است]. باید شرط در مبدأ را اضافه کنیم

$$u_{k,l}(0) = 0 \quad (13)$$

به‌ازای r بزرگ، (۱۲) عملاً به صورت زیر درمی‌آید

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \beta^2 r^2 \right] u_{k,l}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} 0 \quad (14)$$

بنابراین، رفتار مجانبی جوابهای معادله (۱۲)، توسط $e^{\beta^2 r^2/2}$ یا $e^{-\beta^2 r^2/2}$ تعیین می‌شود. فقط امکان دوم به‌طور فیزیکی قابل قبول است. این ما را به تعویض تابع زیر هدایت می‌کند

$$u_{k,l}(r) = e^{-\beta^2 r^2/2} y_{k,l}(r) \quad (15)$$

به سادگی درمی‌یابیم که $y_{k,l}(r)$ در رابطه زیر صادق است

$$\frac{d^2}{dr^2} y_{k,l} - 2\beta^2 r \frac{d}{dr} y_{k,l} + \left[\epsilon_{k,l} - \beta^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] y_{k,l} = 0 \quad (16\text{-الف})$$

$$y_{k,l}(0) = 0 \quad (16\text{-ب})$$

اکنون $y_{k,l}(r)$ را به‌شکل یک سری توانی برحسب r می‌نویسیم

$$y_{k,l}(r) = r^s \sum_{q=0}^{\infty} a_q r^q \quad (17)$$

که بنا به تعریف، a_0 ضریب اولین جمله غیر صفر است

$$a_0 \neq 0 \quad (18)$$

وقتی بسط (۱۷) را در معادله (۱۶-الف) می‌گذاریم، پایتترین جمله برحسب r^{s-2} است، ضریب آن در صورتی صفر است که

$$[s(s-1) - l(l+1)]a_0 = 0 \quad (19)$$

با در نظر گرفتن شرایط (۱۸) و (۱۶-ب)، تنها طریق صدق کردن رابطه (۱۹) انتخاب زیر است

$$s = l + 1 \quad (20)$$

(این نتیجه قابل پیش‌بینی بود؛ بخش ۷-۱-۲-ج همین فصل). عبارت بعدی در بسط معادله (۱۶-الف) برحسب r^{s-1} است، و ضریب آن مساوی است با

$$[s(s+1) - l(l+1)]a_1 \quad (21)$$

چون s قبلاً توسط (۲۰) تعیین شده است، این ضریب تنها در صورتی صفر می‌شود که

$$a_1 = 0 \quad (22)$$

بالاخره، ضریب r^{q+s} را در جمله عمومی مساوی صفر قرار می‌دهیم

$$[(q+s+2)(q+s+1) - l(l+1)]a_{q+2} + [\varepsilon_{k,l} - \beta^2 - 2\beta^2(q+s)]a_q = 0 \quad (23)$$

یعنی، با استفاده از (۲۰) داریم

$$(q+2)(q+2l+3)a_{q+2} = [(2q+2l+3)\beta^2 - \varepsilon_{k,l}]a_q \quad (24)$$

بنابراین، یک رابطه بازگشتی برای ضرایب a_q بسط (۱۷) به دست می‌آوریم.

اول از همه، توجه کنید که این رابطه بازگشتی، با توجه به نتیجه (۲۲)، ایجاب می‌کند که تمام ضرایب a_q با رتبه (q) فرد صفرند. راجع به ضرایب رتبه زوج، آنها باید همگی متناسب با a_0 باشند. اگر مقدار $\varepsilon_{k,l}$ طوری باشد که هیچ مقدار صحیح q ، عبارت کروشه سمت راست (۲۴) را صفر نکند، جواب $y_{k,l}$ معادله (۱۶) به صورت یک سری توانی نامتناهی خواهد بود، که برای آن

$$\frac{a_{q+2}}{a_q} \underset{q \rightarrow \infty}{\sim} \frac{2\beta^2}{q} \quad (25)$$

این رفتار به مانند رفتار ضرایب بسط تابع $e^{\beta^2 r^2}$ است، چون

$$e^{\beta^2 r^2} = \sum_{p=0}^{\infty} c_{2p} r^{2p} \quad (26)$$

با

$$c_{2p} = \frac{\beta^{2p}}{p!} \quad (27)$$

و در نتیجه

$$\frac{c_{2p+2}}{c_{2p}} \underset{p \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\beta^2}{p} \quad (28)$$

چون این $2p$ است که متناظر با عدد صحیح زوج q در بسط $y_{k,l}$ است، (۲۸) در واقع با (۲۵) یکسان است. از اینجا می‌توانیم ببینیم که اگر (۱۷) واقعاً شامل بینهایت جمله باشد، رفتار مجانبی $y_{k,l}$ توسط $e^{\beta^2 r^2}$ تعیین می‌شود، و این (۱۷) را از لحاظ فیزیکی غیر قابل قبول می‌کند [رابطه (۱۵)].

بنابراین، تنها مواردی از دیدگاه فیزیکی جالب‌اند که در آنها یک عدد صحیح زوج k ، مثبت یا صفر، وجود دارد به طوری که

$$\varepsilon_{k,l} = (2k + 2l + 3)\beta^2 \quad (۲۹)$$

آنگاه، رابطه بازگشتی (۲۴) نشان می‌دهد که ضرایب رتبه زوج بزرگتر از k صفرند، چون تمام ضرایب رتبه فرد نیز صفرند، بسط (۱۷) به یک چندجمله‌ای تبدیل می‌شود، و تابع شعاعی $w_{k,l}(r)$ بنابه (۱۵) وقتی r به بینهایت می‌رود، به طور نمایی کاهش می‌یابد.

۲. ترازهای انرژی و تابع موجهای مانا

با استفاده از تعاریف (۷) و (۱۱) ب، رابطه (۲۹) انرژیهای $E_{k,l}$ وابسته به یک مقدار معین l را می‌دهد

$$E_{k,l} = \hbar\omega \left(k + l + \frac{3}{4} \right) \quad (۳۰)$$

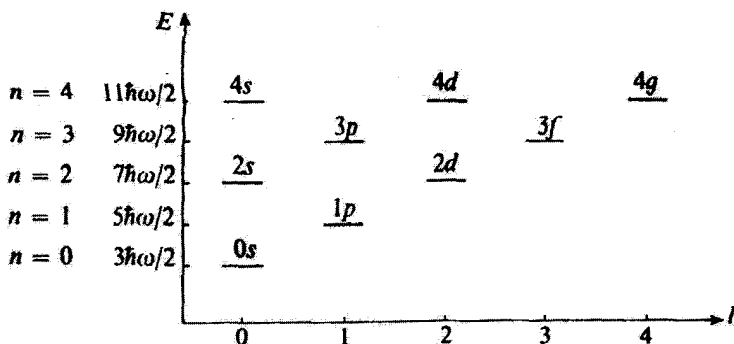
که هر عدد زوج مثبت یا صفر است. چون $E_{k,l}$ در واقع فقط به مجموع زیر بستگی دارد

$$n = k + l \quad (۳۱)$$

واگنیهای اتفاقی ظاهر می‌شوند: ترازهای انرژی نوسانگر سه‌بعدی همسانگرد به شکل زیرند

$$E_n = \left(n + \frac{3}{4} \right) \hbar\omega \quad (۳۲)$$

l می‌تواند هر عدد صحیح مثبت یا صفر باشد و k می‌تواند هر عدد زوج مثبت یا صفر باشد؛ از این رو n می‌تواند تمام مقادیر صحیح مثبت یا صفر را بگیرد. این نتیجه با (۴) سازگار است.



شکل ۱ پایینترین ترازهای انرژی نوسانگر سه بعدی. وقتی n زوج است، l می تواند $(n/2 + 1)$ مقدار بگیرد: $0, \dots, n-2, n-1$. وقتی n فرد است، l می تواند $n + 1/2$ مقدار بگیرد: $1, \dots, n-2, n-1$. با در نظر گرفتن مقادیر کیفی m ($-l \geq m \geq l$)، مرتبه واگنی تراز E_n برابر است با $(n+1)(n+2)/2$.

ما یک انرژی E_n تعیین می کنیم، یعنی یک n صحیح مثبت یا صفر را ثابت می گیریم. مقادیر k و l که می توانند به آن برطبق (۳۱) مرتبط باشد عبارتند از

(۳۳-الف) اگر n زوج باشد $(k, l) = (0, n), (2, n-2), \dots, (n-2, 2), (n, 0)$

(۳۳-ب) اگر n فرد باشد $(k, l) = (0, n), (2, n-2), \dots, (n-3, 3), (n-1, 1)$

از اینجا، می توانیم بلافاصله مقادیر l وابسته به اولین مقادیر n را به دست آوریم

$$n = 0 : l = 0$$

$$n = 1 : l = 1$$

$$n = 2 : l = 0, 2 \tag{34}$$

$$n = 3 : l = 1, 3$$

$$n = 4 : l = 0, 2, 4$$

شکل ۱، با همان قراردادهای مربوط به اتم هیدروژن (شکل ۷-۴)، پایینترین ترازهای انرژی نوسانگر سه بعدی همسانگرد را نشان می دهد.

برای هر زوج (k, l) ، یک و فقط یک تابع شعاعی $u_{k,l}(r)$ وجود دارد، یعنی $(2l+1)$ ویژه تابع

مشترک H ، L^2 و L_z وجود دارد

$$\varphi_{k,l,m}(r) = \frac{1}{r} u_{k,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (۳۵)$$

در نتیجه، مرتبه واگنی انرژی E_n مورد نظر برابر است با

$$g_n = \sum_{l=0,2,\dots,n} (2l+1) \quad \text{اگر } n \text{ زوج باشد} \quad (\text{الف-۳۶})$$

$$g_n = \sum_{l=1,2,\dots,n} (2l+1) \quad \text{اگر } n \text{ فرد باشد} \quad (\text{ب-۳۶})$$

این مجموعهها به سادگی محاسبه می شوند، و مجدداً نتیجه (۵) به دست می آید

$$g_n = \sum_{p=0}^{n/2} (4p+1) = \frac{1}{4}(n+1)(n+2) \quad \text{برای } n \text{ زوج} \quad (\text{الف-۳۷})$$

$$g_n = \sum_{p=0}^{(n-1)/2} (4p+3) = \frac{1}{4}(n+1)(n+2) \quad \text{برای } n \text{ فرد} \quad (\text{ب-۳۷})$$

برای هر جفت (k, l) در (۳۳) با استفاده از نتیجه بخش ۱ می توان تابع شعاعی متناظر $u_{k,l}(r)$ را (با تقریب عامل a_0) تعیین کرد و از این رو، $(2l+1)$ ویژه تابع مشترک H و L^2 و ویژه مقدارهای E_n و $l(l+1)\hbar^2$ را به دست آورد. به عنوان مثال، تابع موجهای وابسته به پایینترین سه تراز انرژی را محاسبه می کنیم.

برای حالت پایه $E_0 = (3/2)\hbar\omega$ ، باید قرار دهیم

$$k = l = 0 \quad (۳۸)$$

بنابراین، $y_{0,0}(r)$ به صورت $a_0 r$ می شود. اگر a_0 را حقیقی و مثبت انتخاب کنیم، تابع بهنجار شده $\varphi_{k=l=m=0}$ به صورت زیر خواهد بود

$$\varphi_{0,0,0}(r) = \left(\frac{\beta^2}{\pi}\right)^{3/4} e^{-\beta^2 r^2/2} \quad (۳۹)$$

چون حالت پایه واگن نیست ($g_0 = 1$)، $\varphi_{0,0,0}$ به همان صورت تابع $\varphi_{n_x=n_y=n_z=0}$ است که با جداسازی متغیرهای دکارتی x, y, z پیدا می شود [فرمول (۶)].

به اولین حالت برانگیخته ($E_1 = (5/2)\hbar\omega$)، که واگن سه‌گانه است، نیز تنها یک جفت (k, l) وابسته است

$$\begin{cases} k = 0 \\ l = 1 \end{cases} \quad (40)$$

و $y_{0,1} = a_0 r^2$. بنابراین، سه تابع پایهٔ مربوط به L_z و L^2 عبارت‌اند از

$$\varphi_{0,1,m}(r) = \sqrt{\frac{8}{3}} \frac{\beta^{3/2}}{\pi^{1/2}} \beta r e^{-\beta^2 r^2 / 2} Y_1^m(\theta, \varphi) \quad m = 1, 0, -1 \quad (41)$$

می‌دانیم [مکمل ۱ فصل ۶، فرمول (۳۲)] که هماهنگ‌های کروی Y_l^m طوری هستند که

$$\begin{aligned} r Y_1^0(\theta, \varphi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} z \\ \frac{r}{\sqrt{2}} [Y_1^{-1} - Y_1^1] &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} x \\ \frac{r}{\sqrt{2}} [Y_1^{-1} + Y_1^1] &= -i \sqrt{\frac{3}{4\pi}} y \end{aligned} \quad (42)$$

و چندجمله‌ای هرمیت مرتبهٔ ۱ عبارت‌است از [مکمل ۲ فصل ۵ فرمول (۱۸)]

$$H_1(u) = 2u \quad (43)$$

در نتیجه، واضح است که سه تابع $\varphi_{0,1,m}$ به توابع φ_{n_x, n_y, n_z} پایهٔ (۶) توسط معادلات زیر مربوط‌اند

$$\begin{aligned} \varphi_{n_x=0, n_y=0, n_z=1} &= \varphi_{k=0, l=1, m=0} \\ \varphi_{n_x=1, n_y=0, n_z=0} &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{k=0, l=1, m=-1} - \varphi_{k=0, l=1, m=1}] \\ \varphi_{n_x=0, n_y=1, n_z=0} &= \frac{i}{\sqrt{2}} [\varphi_{k=0, l=1, m=-1} + \varphi_{k=0, l=1, m=1}] \end{aligned} \quad (44)$$

بالاخره، دومین حالت برانگیخته، یا انرژی $E_2 = (7/2)\hbar\omega$ ، را بررسی می‌کنیم. این حالت

واگن شش‌گانه است، و اعداد کوانتومی k و l می‌توانند مقادیر زیر را بگیرند

$$k = 0, l = 2 \quad (\text{الف-۴۵})$$

$$k = 2, l = 0 \quad (\text{ب-۴۵})$$

تابع $y_{2,2}(r)$ که به مقادیر (الف-۴۵) مربوط است، به سادگی $a_0 r^2$ است. برای مقادیر (ب-۴۵)، $y_{2,0}$ شامل دو جمله است؛ با استفاده از (۲۴) و (۲۹)، به سهولت به دست می‌آوریم

$$y_{2,0}(r) = a_0 r \left[1 - \frac{2}{3} \beta^2 r^2 \right] \quad (۴۶)$$

بنابراین، شش تابع پایه در ویژه‌زیرفضای وابسته به E_2 به شکل زیرند

$$\varphi_{0,2,m}(r) = \sqrt{\frac{16}{15}} r^2 \frac{\beta^{2/2}}{\pi^{1/2}} \beta^2 e^{-\beta^2 r^2/2} Y_2^m(\theta, \varphi) \quad m = 2, 1, 0, -1, -2 \quad (\text{الف-۴۷})$$

$$\varphi_{2,0,0}(r) = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\beta^{2/2}}{\pi^{2/2}} \left(1 - \frac{2}{3} \beta^2 r^2 \right) e^{-\beta^2 r^2/2} \quad (\text{ب-۴۷})$$

با دانستن عبارتهای صریح هماهنگهای کروی [فرمول (۳۳)] از مکمل ۱ فصل ۶] و چند جمله‌ایهای هرمیت [فرمول (۱۸)] از مکمل ۲ فصل ۵]، به سهولت می‌توانیم روابط زیر را ثابت کنیم

$$\varphi_{k=2, l=0, m=0} = -\frac{1}{\sqrt{3}} [\varphi_{n_x=2, n_y=0, n_z=0} + \varphi_{n_x=0, n_y=2, n_z=0} + \varphi_{n_x=0, n_y=0, n_z=2}]$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{k=0, l=2, m=2} + \varphi_{k=0, l=2, m=-2}]$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{n_x=2, n_y=0, n_z=0} - \varphi_{n_x=0, n_y=2, n_z=0}]$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{k=0, l=2, m=2} - \varphi_{k=0, l=2, m=-2}] = i \varphi_{n_x=1, n_y=1, n_z=0}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{k=0, l=2, m=1} - \varphi_{k=0, l=2, m=-1}] = -\varphi_{n_x=1, n_y=0, n_z=1}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{k=0, l=2, m=1} + \varphi_{k=0, l=2, m=-1}] = -i \varphi_{n_x=0, n_y=1, n_z=1}$$

$$\varphi_{k=0, l=2, m=0} = \sqrt{\frac{2}{3}} [\varphi_{n_x=0, n_y=0, n_z=2} - \frac{1}{2} \varphi_{n_x=2, n_y=0, n_z=0}$$

$$- \frac{1}{2} \varphi_{n_x=0, n_y=2, n_z=0}] \quad (۴۸)$$

یادداشت:

همان طور که در شروع این مکمل متذکر شدیم، می‌توانیم روشی شبیه به روش ارائه شده در مکمل ۴ فصل ۶ در مورد نوسانگر هماهنگ سه بعدی همسانگرد به کار ببریم. اگر a_x ، a_y و a_z عملگرهای نابودی ای باشند که به ترتیب در فضاهای حالت \mathcal{E}_x ، \mathcal{E}_y و \mathcal{E}_z عمل می‌کنند، آنگاه تعریف می‌کنیم

$$a_d = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x - ia_y) \quad (۴۹-الف)$$

$$a_g = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x + ia_y) \quad (۴۹-ب)$$

می‌توان نشان داد که a_d و a_g به مانند عملگرهای نابودی مستقل رفتار می‌کنند (مکمل ۴ فصل ۶، بخش ۳-ب). در این صورت، هامیلتونی H و عملگرهای نکانه زاویه‌ای می‌توانند برحسب a_d ، a_g و a_z و الحاقیهای آنها بیان شوند

$$H = \hbar\omega \left(N_d + N_g + N_z + \frac{3}{2} \right) \quad (۵۰-الف)$$

$$L_z = \hbar(N_d - N_g) \quad (۵۰-ب)$$

$$L_+ = \hbar\sqrt{2}(a_z^\dagger a_g - a_d^\dagger a_z) \quad (۵۰-ج)$$

$$L_- = \hbar\sqrt{2}(a_g^\dagger a_z - a_z^\dagger a_d) \quad (۵۰-د)$$

ویژه بردارهای مشترک $|\chi_{n_d, n_g, n_z}\rangle$ مربوط به مشاهده پذیرهای N_d ، N_g و N_z را می‌توان از اثر دادن عملگرهای آفرینش a_d^\dagger ، a_g^\dagger و a_z^\dagger روی حالت پایه $|\cdot, \cdot, \cdot\rangle$ هامیلتونی H به دست آورد [این حالت با تقریب یک ضریب ثابت یکتاست؛ فرمولهای (۶) و (۳۹)]:

$$|\chi_{n_d, n_g, n_z}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_d! n_g! n_z!}} (a_d^\dagger)^{n_d} (a_g^\dagger)^{n_g} (a_z^\dagger)^{n_z} |\cdot, \cdot, \cdot\rangle \quad (۵۱)$$

برطبق (۵۰-الف) و (۵۰-ب)، ویژه بردار H و L_z با ویژه مقدارهای $\hbar\omega(n_d + n_g + n_z + 3/2)$ و $\hbar(n_d - n_g)$ است. بنابراین، ویژه زیر فضای \mathcal{E}_n وابسته به انرژی معین E_n می‌تواند توسط مجموعه بردارهای $|\chi_{n_d, n_g, n_z}\rangle$ ایجاد شود به طوری که

$$n_d + n_g + n_z = n \quad (۵۲)$$

از اینها، ویژه بردار L_z با بیشترین ویژه مقدار سازگار با E_n عبارت است از $|\chi_{n,0,0}\rangle$ که ویژه مقدار آن $n\hbar$ است. این کیت، برطبق (50-ج) در رابطه زیر صدق می کند

$$L_+ |\chi_{n,0,0}\rangle = 0 \quad (53)$$

در نتیجه، این کیت یک ویژه بردار L^2 با ویژه مقدار، $n(n+1)\hbar$ است،^۱ و می توان آن را کیت پایه $\{|\varphi_{k,l,m}\rangle\}$ دانست به طوری که

$$k+l=n \quad (54)$$

$$l=m=n$$

بنابراین

$$|\varphi_{k=0,l=n,m=n}\rangle = -|\chi_{n_d=n,n_g=0,n_z=0}\rangle \quad (55)$$

اعمال عملگر L_- [فرمول (50-د)] به دو طرف رابطه (55) می دهد

$$|\varphi_{0,n,n-1}\rangle = -|\chi_{n-1,0,1}\rangle \quad (56)$$

ویژه مقدار $(n-2)\hbar$ مربوط به L_z ، برخلاف دو مورد قبلی، در \mathcal{E}_n واگن دوگانه است: دو بردار متعامد $|\chi_{n-2,0,2}\rangle$ و $|\chi_{n-1,1,0}\rangle$ متناظر با آن هستند. با استفاده دوباره از (50-د) ، به منظور اعمال L_- روی (56) ، به دست می آوریم

$$|\varphi_{0,n,n-2}\rangle = \sqrt{\frac{2(n-1)}{2n-1}} |\chi_{n-2,0,2}\rangle - \frac{1}{\sqrt{2n-1}} |\chi_{n-1,1,0}\rangle \quad (57)$$

می توان نشان داد که اثر L_+ روی ترکیب خطی متعامد بر (57) بردار صفر را می دهد. در نتیجه، این ترکیب خطی باید یک ویژه بردار L^2 با ویژه مقدار $(n-1)(n-2)\hbar$ باشد. از اینجا، با تقریب یک عامل فاز، داریم

$$|\varphi_{2,n-2,n-2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2n-1}} |\chi_{n-2,0,2}\rangle + \sqrt{\frac{2(n-1)}{2n-1}} |\chi_{n-1,1,0}\rangle \quad (58)$$

۱. این نتیجه مستقیماً از رابطه $(6-77)$ (ب) فصل ۶ به دست می آید که با اثر روی $|\chi_{n,0,0}\rangle$ می دهد

$$L^2 |\chi_{n,0,0}\rangle = \hbar^2 (n^2 + n) |\chi_{n,0,0}\rangle$$

بنابراین، با تکرار می‌توانیم دو پایه $\{ | \chi_{n_d, n_g, n_x} \rangle \}$ و $\{ \varphi_{k, l, m} \}$ را بهم مربوط کنیم.^۱ البته، با جانشین کردن a_d^\dagger و a_g^\dagger با توابع a_x^\dagger و a_y^\dagger در (۵۱)، می‌توانیم $| \chi_{n_d, n_g, n_x} \rangle$ را به صورت ترکیب خطی از بردارهای $| \varphi_{n_x, n_y, n_z} \rangle$ ، که تابع موجهایشان توسط (۶) داده می‌شود، بیان کنیم. ■

مراجع برای مطالعه بیشتر

مثالهای قابل حل دیگر (چاه مربعی کروی و غیره):

Messiah (1.17), chap. IX, §10; Schiff (1.18), §15; see also Flügge (1.24), §§58 to 79.

۱. یک استدلال شبیه به آنچه که در فوق به اختصار بیان شد را در فصل ۱۰، برای ترکیب دو تکانه زاویه‌ای به‌کار

جریانهای احتمال وابسته به حالت‌های مانای اتم هیدروژن

۱. عبارت عمومی برای جریان احتمال

۲. کاربرد در مورد حالت‌های مانای اتم هیدروژن

الف) ساختار جریان احتمال

ب) اثر میدان مغناطیسی

تابع موجهای بهنجار شده $\varphi_{n,l,m}(\mathbf{r})$ وابسته به حالت‌های مانای اتم هیدروژن در همین فصل تعیین شدند. $\varphi_{n,l,m}(\mathbf{r})$ عبارت است از حاصلضرب تابع $R_{n,l}(r)$ که در بخش ۷-۳-۳ از این فصل محاسبه شد و هماهنگ کروی $Y_l^m(\theta, \varphi)$

$$\varphi_{n,l,m}(\mathbf{r}) = R_{n,l}(r)Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (1)$$

سپس، تغییر فضایی چگالی احتمال

$$\rho_{n,l,m}(\mathbf{r}) = |\varphi_{n,l,m}(\mathbf{r})|^2 \quad (2)$$

لااقل برای پایینترین حالت‌های انرژی، مطالعه شد.

اما، مهم است درک کنیم که یک حالت مانا فقط توسط مقدار چگالی احتمال در تمام نقاط فضا مشخص نمی‌شود. باید یک احتمال جریان نیز به آن وابسته کنیم که به صورت زیر بیان می‌شود

$$\mathbf{J}_{n,l,m}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{\mu i} \varphi_{n,l,m}^*(\mathbf{r}) \nabla \varphi_{n,l,m}(\mathbf{r}) + \text{c.c.} \quad (3)$$

[در اینجا فرض می‌کنیم که پتانسیل برداری $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ صفر است؛ μ معرف جرم ذره است].

بنابراین، می‌توانیم به حالت کوانتومی یک ذره، یک "سیال" (به نام "سیال احتمالی") وابسته کنیم که چگالی آن در هر نقطه فضا $\rho(\mathbf{r})$ است. این سیال بی حرکت نیست؛ بلکه در حالی از شارش است که توسط چگالی جریان \mathbf{J} مشخص می‌شود. در یک حالت مانا، ρ و \mathbf{J} وابسته به زمان نیستند؛ سیال در حالت پایای شارش است.

برای تکمیل نتایج این فصل مربوط به خواص فیزیکی حالت‌های مانای اتم هیدروژن، اکنون جریانهای احتمال $\mathbf{J}_{n,l,m}(\mathbf{r})$ را مطالعه می‌کنیم.

۱. عبارت عمومی برای جریان احتمال

یک تابع موج بهنجارشدهٔ اختیاری $\psi(\mathbf{r})$ را در نظر بگیرید. کمیات حقیقی $\alpha(\mathbf{r})$ را [قدرمطلق $\psi(\mathbf{r})$] و $\xi(\mathbf{r})$ [شناسهٔ $\psi(\mathbf{r})$] را با نوشتن رابطهٔ زیر معرفی می‌کنیم:

$$\psi(\mathbf{r}) = \alpha(\mathbf{r})e^{i\xi(\mathbf{r})} \quad (۴)$$

با

$$\alpha(\mathbf{r}) \geq 0; \quad 0 \leq \xi(\mathbf{r}) < 2\pi \quad (۵)$$

اگر (۴) را در عبارتهای مربوط به چگالی احتمال $\rho(\mathbf{r})$ و جریان $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ قرار دهیم به‌دست می‌آوریم [هنوز فرض می‌شود که پتانسیل برداری $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ صفر باشد]

$$\rho(\mathbf{r}) = \alpha^2(\mathbf{r}) \quad (۶)$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{\mu} \alpha^2(\mathbf{r}) \nabla \xi(\mathbf{r}) \quad (۷)$$

بنابراین، $\rho(\mathbf{r})$ فقط به قدرمطلق تابع موج بستگی دارد، در حالی که $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ فاز آن را در خود دارد [مثلاً، اگر این فاز در تمام فضا ثابت باشد $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ صفر است].

یادداشت:

اگر تابع موج $\psi(\mathbf{r})$ معلوم باشد، واضح است که $\rho(\mathbf{r})$ و $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ کاملاً معین هستند. بالعکس، آیا همیشه یک و فقط یک تابع $\psi(\mathbf{r})$ متناظر با مقادیر داده شدهٔ $\rho(\mathbf{r})$ و $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ وجود دارد؟

برطبق (۶)، قدرمطلق $\alpha(\mathbf{r})$ تابع موج مستقیماً از $\rho(\mathbf{r})$ به‌دست می‌آید. شناسهٔ $\xi(\mathbf{r})$ باید در معادلهٔ زیر صدق کند

$$\nabla \xi(\mathbf{r}) = \frac{\mu}{\hbar} \frac{\mathbf{J}(\mathbf{r})}{\rho(\mathbf{r})} \quad (۸)$$

می‌دانیم که این معادله فقط وقتی جواب دارد که

$$\nabla \times \frac{\mathbf{J}(\mathbf{r})}{\rho(\mathbf{r})} = 0 \quad (۹)$$

پس بینهایت جواب داریم، که به‌اندازهٔ یک ثابت از هم تفاوت دارند. چون این ثابت متناظر با یک عامل فاز عمومی است، نتیجه می‌شود که اگر شرط (۹) برقرار باشد تابع موج ذره با مشخص بودن $\rho(\mathbf{r})$ و $\mathbf{J}(\mathbf{r})$

۱. البته، برای اینکه $\rho(\mathbf{r})$ چگالی احتمال باشد باید در همه جا مثبت باشد.

کاملاً تعیین می‌شود. اگر شرط (۹) صادق نباشد، تابع موجی متناظر با مقادیر $\rho(r)$ و $J(r)$ مورد نظر وجود ندارد. ■

۲. کاربرد در مورد حالت‌های مانای اتم هیدروژن

الف) ساختار جریان احتمال

وقتی تابع موج به صورت (۱) است، که در آن $R_{n,l}(r)$ یک تابع حقیقی و $Y_l^m(\theta, \varphi)$ حاصلضرب $e^{im\varphi}$ و یک تابع حقیقی است، داریم

$$\begin{aligned}\alpha_{n,l,m}(r) &= |R_{n,l}(r)| |Y_l^m(\theta, \varphi)| \\ \xi_{n,l,m}(r) &= m\varphi\end{aligned}\quad (10)$$

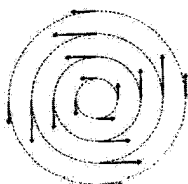
با به‌کار بردن فرمول (۷) و استفاده از عبارت گرادیان در مختصات قطبی، به‌دست می‌آوریم

$$J_{n,l,m}(r) = \frac{\hbar}{\mu} m \frac{\rho_{n,l,m}(r)}{r \sin \theta} e_{\varphi}(r) \quad (11)$$

که $e_{\varphi}(r)$ بردار واحدی است که با Oz و r یک چارچوب دستگاه مختصات دکارتی راستگرد تشکیل می‌دهد

تغییرات جریان احتمال در صفحه عمود بر Oz در شکل ۱ نشان داده شده‌اند.

برطبق (۱۱)، جریان در هر نقطه M عمود بر صفحه‌ای است که توسط M و محور Oz ساخته می‌شود: سیال احتمال حول Oz می‌چرخد. چون $|J|$ متناسب با $r \sin \theta \rho(r)$ نیست،



شکل ۱ ساختار جریان احتمال وابسته به یک حالت مانای $(\varphi_{n,l,m})$ اتم هیدروژن (نشان داده شده در صفحه عمود بر Oz). شاخص m به‌ویژه مقدار $m\hbar$ از L_z مربوط است. اگر $m > 0$ ، سیال احتمال، حول Oz در جهت پادساعتگرد می‌چرخد؛ اگر $m < 0$ ، در جهت ساعتگرد می‌چرخد. اگر $m = 0$ ، جریان احتمال در تمام نقاط فضا صفر است.

دستگاه به‌طور دسته‌جمعی دوران نمی‌کند. ویژه‌مقدار $m\hbar$ از مشاهده‌پذیر L_z را می‌توان به‌عنوان تکانه زاویه‌ای کلاسیک وابسته به این حرکت دورانی سیال احتمال تعبیر کرد. سهم عنصر حجم d^3r ، واقع در نقطه \mathbf{r} ، در تکانه زاویه‌ای نسبت به مبدأ را می‌توانیم به‌صورت زیر بنویسیم

$$d\mathcal{L} = \mu \mathbf{r} \times \mathbf{J}_{n,l,m}(\mathbf{r}) d^3r \quad (12)$$

بنابه تقارن، برآیند تمام این تکانه‌های جزئی در امتداد Oz است؛ این نتیجه برابر است با

$$\mathcal{L}_z = \mu \int d^3r \mathbf{e}_z \cdot [\mathbf{r} \times \mathbf{J}_{n,l,m}(\mathbf{r})] \quad (13)$$

با استفاده از عبارت (۱۱) برای $\mathbf{J}_{n,l,m}(\mathbf{r})$ به‌سهولت به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_z &= \mu \int d^3r r |\mathbf{J}_{n,l,m}(\mathbf{r})| \sin \theta \\ &= m\hbar \int d^3r \rho_{n,l,m}(\mathbf{r}) \\ &= m\hbar \end{aligned} \quad (14)$$

ب) اثر میدان مغناطیسی

نتایجی که تاکنون به‌دست آمده‌اند فقط وقتی معتبرند که پتانسیل برداری $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ صفر باشد؛ اکنون بررسی می‌کنیم وقتی این مورد صادق نباشد چه اتفاق می‌افتد. فرض کنید، به‌عنوان مثال، اتم هیدروژن را در میدان مغناطیسی یکنواخت \mathbf{B} قرار دهیم. این میدان را می‌توان با پتانسیل برداری زیر توصیف کرد

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{c} \mathbf{r} \times \mathbf{B} \quad (15)$$

جریان احتمال وابسته به‌حالت پایه چیست؟

برای سهولت، همچنین فرض خواهیم کرد که میدان مغناطیسی \mathbf{B} تابع موج حالت پایه را تغییر نمی‌دهد.^۱ بنابراین، جریان احتمال می‌تواند از عبارت عمومی برای \mathbf{J} محاسبه شود [رابطه ۲۰-D].

۱. چون هامیلتونی H به \mathbf{B} بستگی دارد، واضح است که این فرض دقیقاً صحیح نیست. با وجود این، با توجه به عبارت H [فرمولهای (۶) و (۷)] از مکمل ۴ فصل ۷، می‌توانیم نشان دهیم که، برای پیمانه انتخاب شده (۱۵) و \mathbf{B} در جهت Oz ، توابع $\varphi_{n,l,m}(\mathbf{r})$ با تقریب جمله‌ای از مرتبه دوم برحسب \mathbf{B} ویژه‌تابع H هستند. با استفاده از نظریه اختلال فصل ۱۱، می‌توان نشان داد که، برای میدانهای مغناطیسی که نوعاً در آزمایشگاهها ایجاد می‌شوند، این جمله مرتبه دوم قابل صرفنظر است.

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{n,l,m}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{\mu}} \left\{ \varphi_{n,l,m}^*(\mathbf{r}) \left[\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A}(\mathbf{r}) \right] \varphi_{n,l,m}(\mathbf{r}) + \text{c.c.} \right\} \\ &= \frac{1}{\mu} \rho_{n,l,m}(\mathbf{r}) [\hbar \nabla \xi_{n,l,m}(\mathbf{r}) - q\mathbf{A}(\mathbf{r})] \end{aligned} \quad (16)$$

برای حالت پایه و میدان \mathbf{B} در امتداد Oz ، با استفاده از (۱۵) داریم

$$\mathbf{J}_{1,0,0}(\mathbf{r}) = \frac{\omega_c}{\gamma} \rho_{1,0,0}(\mathbf{r}) \mathbf{e}_z \times \mathbf{r} \quad (17)$$

که بسامد سیکلوترونی ω_c به صورت زیر تعریف می شود

$$\omega_c = -\frac{qB}{\mu} \quad (18)$$

بنابراین، جریان احتمال حالت پایه در حضور میدان مغناطیسی، به مانند وقتی که $\mathbf{B} = 0$ ، صفر نیست. عبارت (۱۷) نشان می دهد که سیال احتمال، با سرعت زاویه ای $\omega_c/2$ به طور دسته جمعی حول \mathbf{B} می چرخد. از نظر فیزیکی، این نتیجه از این حقیقت ناشی می شود که وقتی میدان مغناطیسی \mathbf{B} برقرار می شود، یک میدان الکتریکی گذرای $\mathbf{E}(t)$ باید وجود داشته باشد. تحت اثر این میدان، الکترون، در عین حال که در حالت پایه است، با یک سرعت زاویه ای که فقط به مقدار \mathbf{B} (و نه به نحوه دقیق برقراری میدان طی دوره گذار) بستگی دارد حول پروتون به دوران می افتد.

یادداشت:

انتخاب خاص پیمانه (۱۵) باعث شد که همان تابع موجهایی را که با فقط یک خطای قابل صرف نظر در غیاب میدان به کار بردیم حفظ کنیم (پانوشت صفحه قبل). با یک پیمانه دیگر تابع موجهای دیگری به دست می آوریم (مکمل HIII فصل سوم) و در (۱۶) جمله ای که صریحاً شامل $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ است تنها جمله ای نیست که، تا مرتبه اول از \mathbf{B} ، در مقدار $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ سهم دارد. با وجود این، در پایان محاسبه (۱۷) را پیدا می کنیم، زیرا نتیجه فیزیکی نباید به پیمانه بستگی داشته باشد.

مکمل ۴

اتم هیدروژن واقع در میدان مغناطیسی یکنواخت. پارامغناطیس و دیامغناطیس. اثر زیمان

۱. هامیلتونی مسئله. جمله پارامغناطیسی و جمله دیامغناطیسی

الف) عبارت هامیلتونی

ب) مرتبه بزرگی جملات مختلف

ج) تعبیر جمله پارامغناطیسی

د) تعبیر جمله دیامغناطیسی

۲. اثر زیمان

الف) ترازهای انرژی اتم در حضور میدان مغناطیسی

ب) نوسانهای دوقطبی الکتریکی

ج) بسامد و قطبش تابش گسیل شده

در فصل ۷، خواص مکانیک کوانتومی اتم هیدروژن آزاد را مطالعه کردیم، یعنی، خواص دستگاه متشکل از یک الکترون و یک پروتون که روی یکدیگر جاذبه الکتروستاتیک وارد می‌کنند ولی با هیچ میدان خارجی برهم‌کنش ندارند. این مکمل به مطالعه اثرات جدیدی اختصاص دارد که وقتی این اتم در یک میدان مغناطیسی ایستا قرار می‌گیرد ظاهر می‌شوند. ما فقط به موردی می‌پردازیم که این میدان یکنواخت است، همان‌طور که در عمل همیشه هست، زیرا میدانهای مغناطیسی که بتوانند در آزمایشگاه تولید شوند، از لحاظ مقدار نسبی، روی مسافتهای قابل مقایسه با ابعاد اتمی، بسیار کم تغییر می‌کنند. ما قبلاً رفتار یک الکترون را یا فقط تحت میدان الکتریکی (مثلاً فصل ۷) یا فقط تحت میدان مغناطیسی (مکمل ۵ فصل ۶) مطالعه کرده‌ایم. در اینجا این مباحث را با محاسبه ترازهای انرژی یک الکترون که تحت تأثیر میدان الکتریکی داخلی اتم و یک میدان مغناطیسی خارجی است تعمیم خواهیم داد. تحت این شرایط، حل دقیق معادله شرودینگر ممکن است مسئله بسیار پیچیده‌ای به نظر برسد. اما، خواهیم دید که این مسئله می‌تواند با برخی تقریبات به‌طور قابل ملاحظه‌ای ساده شود. در مرحله اول ما به‌طور کامل از اثر جرم متناهی هسته‌ای صرف‌نظر خواهیم کرد.^۱ سپس از

۱. برای اتم هیدروژن، چنین تقریبی از این واقعیت توجیه می‌شود که پروتون به‌طور قابل ملاحظه‌ای سنگینتر از الکترون است. برای موئونیم مکمل ۱ همین فصل، تقریب به این خوبی نیست و در مورد پوزیترونیم کاملاً غیرقابل کاربرد است. به‌علاوه، متذکر می‌شویم که در حضور یک میدان مغناطیسی به‌طور دقیق امکان ندارد حرکت مرکز جرم را

این واقعیت استفاده خواهیم کرد که، در عمل، اثر میدان مغناطیسی خارجی بسیار کوچکتر از اثر میدان الکتریکی داخلی اتم است: جابه‌جاییهای تراز اتمی ناشی از میدان مغناطیسی بسیار کمتر از جداسازیهای انرژی در میدان صفر هستند.

بحث ارائه شده در این مکمل ما را قادر می‌سازد برخی اثرات را که در فیزیک اتمی مهم هستند معرفی کنیم و توضیح دهیم. به‌ویژه، خواهیم دید که، چگونه پارامغناطیس و دیامغناطیس اتمی در صورتبندی مکانیک کوانتومی ظاهر می‌شوند، به‌علاوه قادر خواهیم بود که تغییرات طیف نوری گسیل‌یافته از اتمهای هیدروژن واقع در میدان مغناطیسی ایستا (اثر زیمان) را پیش‌بینی کنیم.

۱. هامیلتونی مسئله. جمله پارامغناطیسی و جمله دیامغناطیسی

الف) عبارت هامیلتونی

یک ذره بدون اسپین، به جرم m_e و بار q در نظر می‌گیریم، که به‌طور همزمان تحت تأثیر پتانسیل مرکزی زده‌ای $V(\mathbf{r})$ و پتانسیل برداری $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ قرار دارد. هامیلتونی آن می‌شود

$$H = \frac{1}{2m_e} [P - q\mathbf{A}(\mathbf{R})]^2 + V(\mathbf{R}) \quad (1)$$

وقتی میدان مغناطیسی $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r})$ یکنواخت باشد، می‌توان پتانسیل برداری \mathbf{A} را به‌شکل زیر نوشت

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{c} \mathbf{r} \times \mathbf{B} \quad (2)$$

برای جاگذاری این عبارت در (۱)، کمیت زیر را محاسبه خواهیم کرد

$$[P - q\mathbf{A}(\mathbf{R})]^2 = P^2 + \frac{q}{c} [P \cdot (\mathbf{R} \times \mathbf{B}) + (\mathbf{R} \times \mathbf{B}) \cdot P] + \frac{q^2}{c^2} (\mathbf{R} \times \mathbf{B})^2 \quad (3)$$

اما، \mathbf{B} عملاً یک ثابت است و عملگر نیست. بنابراین، تمام مشاهده‌پذیرها با \mathbf{B} جابه‌جاپذیرند، به‌طوری که، با استفاده از قواعد حساب بردارها، می‌توانیم بنویسیم

$$[P - q\mathbf{A}(\mathbf{R})]^2 = P^2 + \frac{q}{c} [\mathbf{B} \cdot (\mathbf{P} \times \mathbf{R}) - (\mathbf{R} \times \mathbf{P}) \cdot \mathbf{B}] + \frac{q^2}{c^2} [\mathbf{R}^2 \mathbf{B}^2 - (\mathbf{R} \cdot \mathbf{B})^2] \quad (4)$$

جداسازی کنیم. اگر بخواهیم اثر جرم متناهی هسته‌ای را در این مکمل به‌حساب آوریم، کافی نیست که به‌جای جرم m_e الکترون جرم کاهش‌یافته μ دستگاه الکترون-پروتون را بگذاریم.

در طرف راست این عبارت، تکانه زاویه‌ای L ذره ظاهر می‌شود

$$L = R \times P = -P \times R \quad (5)$$

بنابراین می‌توانیم H را به شکل زیر بنویسیم

$$H = H_0 + H_1 + H_2 \quad (6)$$

که H_0 ، H_1 ، و H_2 توسط روابط زیر تعریف می‌شوند

$$H_0 = \frac{P^2}{2m_e} + V(R) \quad (الف-7)$$

$$H_1 = \frac{\mu_B}{\hbar} L \cdot B \quad (ب-7)$$

$$H_2 = \frac{q^2 B^2}{4m_e} R_{\perp}^2 \quad (ج-7)$$

در این روابط، μ_B معرف مگنتون بور است (که دارای ابعاد گشتاور مغناطیسی است)

$$\mu_B = \frac{q\hbar}{2m_e} \quad (8)$$

و عملگر R_{\perp} تصویر R روی صفحه عمود بر B است

$$R_{\perp}^2 = R^2 - \frac{(R \cdot B)^2}{B^2} \quad (9)$$

اگر دستگاهی از محورهای متعام $Oxyz$ را طوری انتخاب کنیم که B موازی Oz باشد، داریم

$$R_{\perp}^2 = X^2 + Y^2 \quad (10)$$

یادداشت:

وقتی میدان B صفر است، H برابر H_0 می‌شود، که مجموع انرژی جنبشی $P^2/2m_e$ و انرژی پتانسیل $V(R)$ است. با وجود این، نباید از اینجا نتیجه بگیریم که وقتی B صفر نیست، $P^2/2m_e$ هنوز نشاندهنده انرژی جنبشی الکترون است. دیدیم (مکمل H_{III} فصل سوم) که وقتی بردار پتانسیل صفر نیست، معنی

فیزیکی عملگرهای عمل‌کننده در فضای حالت تغییر می‌کند. به‌عنوان مثال، تکانه P دیگر نمایشگر تکانه مکانیکی $\Pi = m_e V$ نیست، و انرژی جنبشی در این صورت برابر است با

$$\frac{\Pi^2}{2m_e} = \frac{1}{2m_e} [P - qA(R)]^2 \quad (11)$$

معنی جمله $P^2/2m_e$ ، که به‌تهایی در نظر گرفته شود، بستگی به پیمانه انتخابی دارد. با پیمانه تعریف شده توسط (۲)، به‌سهولت می‌توان نشان داد که این جمله با انرژی جنبشی "نسبی" $\Pi_R^2/2m_e$ متناظر است، که Π_R عبارت است از تکانه مکانیکی ذره نسبت به "چارچوب لارمور" که حول B با سرعت زاویه‌ای $\omega_L = -qB/2m_e$ دوران می‌کند. بنابراین، جمله H_2 انرژی جنبشی $\Pi_E^2/2m_e$ وابسته به سرعت کشش چارچوب را نشان می‌دهد. H_1 با جمله $\Pi_E \cdot \Pi_R/m_e$ متناظر است. ■

ب) مرتبه بزرگی جملات مختلف

پس در حضور میدان مغناطیسی B ، دو جمله جدید H_1 و H_2 در H ظاهر می‌شوند. قبل از بررسی مفهوم فیزیکی آنها با جزئیات بیشتر، مرتبه بزرگی تفاضل انرژیهای ΔE (یا تفاضل بسامدهای $\Delta E/\hbar$) وابسته به آنها را محاسبه خواهیم کرد. تا جایی که به H_0 مربوط می‌شود، ما تفاضل انرژی ΔE_0 متناظر را قبلاً شناخته‌ایم (همین فصل). بسامدهای وابسته از مرتبه زیرند

$$\frac{\Delta E_0}{h} \simeq 10^{14} - 10^{15} \text{ Hz} \quad (12)$$

همچنین، با استفاده از (۷-ب)، می‌بینیم که ΔE_1 به‌طور تقریبی با رابطه زیر داده می‌شود

$$\frac{\Delta E_1}{h} \simeq \frac{1}{h} \left(\frac{\mu_B}{\hbar} \hbar B \right) = \frac{\omega_L}{2\pi} \quad (13)$$

که ω_L سرعت زاویه‌ای لارمور است^۱

$$\omega_L = -\frac{qB}{2\mu} \quad (14)$$

یک محاسبه عددی ساده نشان می‌دهد که، برای یک الکترون، بسامد لارمور طوری است که:

$$\frac{\nu_L}{B} = \frac{\omega_L}{2\pi B} \simeq 1.40 \times 10^{11} \text{ Hz/T} = 1.40 \text{ MHz/G} \quad (15)$$

۱. توجه کنید که بسامد لارمور $\omega_L/2\pi$ نصف بسامد سیکلوترونی است.

اکنون، با میدانهای متداول در آزمایشگاه (که به ندرت از ۱۰۰۰۰۰۰ گاوس تجاوز می کنند)، داریم

$$\frac{\omega_L}{2\pi} \lesssim 10^{11} \text{Hz} \quad (16)$$

از مقایسه (۱۲) و (۱۶)، ملاحظه می کنیم که

$$\Delta E_1 \ll \Delta E_0 \quad (17)$$

به همین ترتیب، نشان می دهیم که

$$\Delta E_2 \ll \Delta E_1 \quad (18)$$

برای انجام این کار، مرتبه بزرگی ΔE_2 انرژیهای وابسته به H_2 را محاسبه خواهیم کرد. عناصر ماتریسی عملگر $R_1^2 = X^2 + Y^2$ به همان مرتبه بزرگی a_0^2 هستند، که $a_0 = \hbar^2/m_e^2$ مشخص کننده ابعاد اتمی است. بنابراین، به دست می آوریم

$$\Delta E_2 \simeq \frac{q^2 B^2}{m_e} a_0^2 \quad (19)$$

پس نسبت زیر را پیدا می کنیم

$$\frac{\Delta E_2}{\Delta E_1} \simeq \frac{q^2 B^2}{m_e} a_0^2 \frac{1}{\hbar \omega_L} = 2 \hbar \frac{q B}{m_e} \frac{m_e a_0^2}{\hbar^2} \quad (20)$$

اکنون، برطبق فرمولهای (۷-۸۱الف) و (۷-۸۱ب) داریم

$$\Delta E_0 \simeq \frac{\hbar^2}{m_e a_0^2} \quad (21)$$

بنابراین، رابطه (۲۰) با به حساب آوردن (۱۳) می دهد

$$\frac{\Delta E_2}{\Delta E_1} \simeq \frac{\Delta E_2}{\Delta E_0} \quad (22)$$

که برطبق (۱۷)، رابطه (۱۸) را ثابت می کند.

بنابراین، اثرات میدان مغناطیسی همیشه، در عمل، بسیار کمتر از اثرات مربوط به میدان داخلی اتم باقی می‌ماند. به علاوه، وقتی آنها را مطالعه می‌کنیم، عموماً کافی است فقط جمله H_1 ، که در مقایسه با آن H_2 قابل صرف‌نظر است، را حفظ کنیم (H_2 فقط در موارد خاصی به حساب می‌آید که سهم H_1 صفر است).^۱

ج) تعبیر جمله پارامغناطیسی

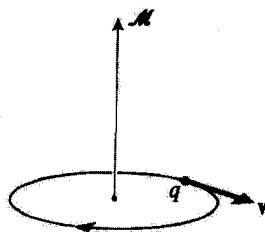
قبل از هر چیز، عبارت H_1 در (۷-ب) را در نظر بگیرید. خواهیم دید که این جمله را می‌توان انرژی جفت‌شدگی $-M_1 \cdot B$ ، مربوط به میدان B و گشتاور مغناطیسی M_1 وابسته به گردش الکترون در مدارش، تعبیر کرد.

برای این منظور، با محاسبه کردن گشتاور مغناطیسی \mathcal{M} که به‌طور کلاسیک به بار q واقع در یک مدار دایره‌ای به شعاع r وابسته است شروع خواهیم کرد (شکل ۱). اگر سرعت ذره v باشد حرکت آن هم‌ارز یک جریان است

$$i = q \frac{v}{2\pi r} \quad (23)$$

از آنجا که مساحت S که توسط این جریان تعریف می‌شود برابر است با

$$S = \pi r^2 \quad (24)$$



شکل ۱ از لحاظ کلاسیک، حرکت یک الکترون در مدارش می‌تواند به‌عنوان جریان حلقه‌ای با گشتاور مغناطیسی \mathcal{M} تلقی شود.

۱. اثر زمین برای نوسانگر هماهنگ سهم‌بدی را می‌توان بدون تقریب محاسبه کرد (مسئله ۲ از مکمل ۲ از فصل ۵) این واقعیت دارد چون در این صورت $V(\mathbf{R})$ و H_2 شکل‌های مشابهی دارند. این مثال جالب است زیرا ما را قادر می‌سازد که سهم‌های H_1 و H_2 را در یک مورد قابل حل بررسی کنیم.

گشتاور مغناطیسی \mathcal{M} با رابطه زیر داده می‌شود

$$|\mathcal{M}| = i \times S = \frac{q}{4} r v \quad (25)$$

با معرفی تکانه زاویه‌ای \mathcal{L} که، چون سرعت مماسی است، دارای قدرمطلق

$$|\mathcal{L}| = m_e r v \quad (26)$$

است، می‌توانیم (۲۵) را به شکل زیر بنویسیم

$$\mathcal{M} = \frac{q}{2m_e} \mathcal{L} \quad (27)$$

(این رابطه را بدین علت به صورت برداری نوشته‌ایم که \mathcal{L} و \mathcal{M} موازیند زیرا عمود بر صفحه مدار کلاسیک هستند).

مشابه مکانیک کوانتومی (۲۷) رابطه عملگری زیر است

$$\mathbf{M}_\lambda = \frac{q}{2m_e} \mathbf{L} \quad (28)$$

بنابراین می‌توانیم H_λ را به شکل زیر بنویسیم

$$H_\lambda = -\mathbf{M}_\lambda \cdot \mathbf{B} \quad (29)$$

این نتیجه تعبیر فوق‌الذکر را تأیید می‌کند: H_λ متناظر با جفتیدگی بین میدان مغناطیسی \mathbf{B} و گشتاور مغناطیسی اتمی دائمی است (\mathbf{M}_λ مستقل از \mathbf{B} است). H_λ را جمله جفتیدگی پارامغناطیسی گویند.

یادداشت:

۱. برطبق (۲۸)، ویژه‌مقدارهای هر مؤلفه گشتاور مغناطیسی \mathbf{M}_λ به شکل زیرند

$$\left(\frac{q}{2m_e} \right) \times (m\hbar) = m\mu_B \quad (30)$$

که m یک عدد صحیح است. بنابراین، μ_B مرتبه بزرگی گشتاور مغناطیسی وابسته به گشتاور مداری الکترون را می‌دهد. به این علت است که تعریف (۸) مفید است. در دستگاه MKSA

$$\mu_B \simeq -9.27 \times 10^{-24} \text{ J/T} \quad (31)$$

۲. همان‌طور که در فصل ۹ خواهیم دید الکترون علاوه بر تکانه زاویه‌ای مداری L ، دارای تکانه زاویه‌ای اسپینی S است. به این مشاهده‌پذیر یک گشتاور مغناطیسی M_S متناسب با S وابسته است

$$M_S = \gamma \frac{\mu_B}{\hbar} S \quad (32)$$

گرچه، اثرات مغناطیسی ناشی از اسپین مهم هستند، فعلاً به آنها نمی‌پردازیم (در مکمل ۴ فصل ۱۲ به آن خواهیم گشت).

۳. استدلال کلاسیک بالا کاملاً صحیح نیست. ما تکانه زاویه‌ای

$$\mathcal{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (33)$$

را به‌جای گشتاور تکانه مکانیکی

$$\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{r} \times m_e \mathbf{v} = \mathcal{L} - q \mathbf{r} \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) \quad (34)$$

گرفته‌ایم. در واقع خطا کوچک است. همان‌طور که در قسمت بعد خواهیم دید، این کوچکی صرفاً به صرف‌نظر کردن از H_2 نسبت به H_1 منجر می‌شود.

د) تعبیر جمله دیامغناطیسی

یک حالت با تکانه زاویه‌ای صفر از اتم هیدروژن (مثلاً حالت پایه) را در نظر می‌گیریم. تصحیح H_1 در انرژی این حالت نیز صفر است. بنابراین، برای تعیین اثر میدان B ، باید اکنون حضور H_2 را به حساب آوریم. انرژی متناظر را چگونه باید تعبیر کرد؟

دیدیم (مکمل ۳ فصل ۵ بخش ۲-ب) که، در حضور میدان مغناطیسی یکنواخت، جریان احتمال وابسته به الکترون تغییر می‌کند. این جریان نسبت به B تقارن استوانه‌ای دارد، که متناظر با دوران یکنواخت سیال احتمال در جهت ساعتگرد است اگر q مثبت باشد و در جهت پادساعتگرد

است اگر q منفی باشد. پس به جریان الکتریکی متناظر، یک گشتاور مغناطیسی $\langle M_r \rangle$ پادموازی با B ، و در نتیجه یک انرژی جفتیدگی مثبت، وابسته است که منشأ فیزیکی جمله H_r را توضیح می‌دهد.

برای بررسی دقیقتر این موضوع، به استدلال کلاسیک قسمت قبل برمی‌گردیم، و این واقعیت را به حساب می‌آوریم، [یادداشت ۳ از قسمت ج] که گشتاور مغناطیسی \mathcal{M} در واقع متناسب است با $\lambda = \mathbf{r} \times m_e \mathbf{v}$ (و نه با $\mathcal{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$)

$$\mathcal{M} = \frac{q}{2m_e} \lambda = \frac{q}{2m_e} [\mathcal{L} - q \mathbf{r} \times \mathbf{A}(\mathbf{r})] \quad (35)$$

وقتی \mathcal{L} صفر است، \mathcal{M} ، با پیمانه (۲) به مقدار زیر تبدیل می‌شود

$$\mathcal{M}_r = \frac{q^2}{4m_e} \mathbf{r} \times (\mathbf{r} \times \mathbf{B}) = \frac{q^2}{4m_e} [(\mathbf{r} \cdot \mathbf{B})\mathbf{r} - r^2 \mathbf{B}] \quad (36)$$

\mathcal{M}_r متناسب با مقدار مغناطیسی است،^۱ و از این رو گشتاور القایی توسط B در اتم را نشان می‌دهد. انرژی جفتیدگی آن با B عبارت است از

$$\begin{aligned} W_r &= - \int_{\mathbf{B}} \mathcal{M}_r(\mathbf{B}') \cdot d\mathbf{B}' = - \frac{1}{4} \mathcal{M}_r(\mathbf{B}) \cdot \mathbf{B} \\ &= \frac{q^2}{4m_e} [\mathbf{r}^T \mathbf{B}^T - (\mathbf{r} \cdot \mathbf{B})^T] \\ &= \frac{q^2}{4m_e} r_{\perp}^T \mathbf{B}^T \end{aligned} \quad (37)$$

که با (۷-ج) توافق دارد. بنابراین، تعبیر فوق تأیید شده است: H_r جفتیدگی بین میدان B و گشتاور مغناطیسی M_r القا شده در اتم را توصیف می‌کند. چون گشتاور القایی، برطبق قانون لنز، در جهت خلاف میدان اعمال شده است، انرژی جفتیدگی مثبت است. H_r را جمله دیامغناطیسی هامیلتونی گویند.

یادداشت:

همان‌طور که قبلاً متذکر شدیم [رابطه (۱۸)]، دیامغناطیس اتمی پدیده ضعیفی است که در حضور یارامغناطیس قابل ملاحظه نیست. همان‌طور که (۳۷) نشان می‌دهد (و محاسبات قسمت ۱ ب)،

۱. \mathcal{M} با B همراستا نیست، اما، می‌توان نشان داد که، در حالت پایه اتم هیدروژن، مقدار میانگین $\langle M_r \rangle$ مربوط به عملگر وابسته به \mathcal{M}_r پادموازی با B است. این یا نتیجه به‌دست آمده در فوق از ساختار جریان احتمال سازگار است.

این نتیجه به کوچک بودن اندازه شعاع اتمی مربوط است: برای میدانهای مغناطیسی متداول، شار مغناطیسی که از یک اتم می‌گذرد بسیار کم است. نباید نتیجه بگیریم که می‌توانیم همیشه از H_2 نسبت به H_1 ، در هر مسئله فیزیکی صرفنظر کنیم. به عنوان مثال، در مورد الکترون آزاد (که برای آن شعاع مدار کلاسیک در یک میدان مغناطیسی صفر، بینهایت است) در مکمل ۵ فصل ۶ دیدیم که سهم جمله دیامغناطیسی به همان اهمیت سهم جمله پارامغناطیسی است. ■

۲. اثر زیمان

اکنون که مفهوم فیزیکی جمله‌های مختلف هامیلتونی را توضیح دادیم، اثرات آنها را روی طیف اتم هیدروژن با تفصیل بیشتری بررسی خواهیم کرد. به طور دقیقتر، چگونگی تغییر گسیل خط نوری موسوم به "خط شدید" ($\lambda \simeq 1210 \text{ \AA}$) را وقتی اتم هیدروژن در میدان مغناطیسی ایستا قرار می‌گیرد، بررسی می‌کنیم. خواهیم دید که این نه فقط بسامد بلکه قطبش خطوط اتمی را نیز تغییر می‌دهد: این پدیده معمولاً "اثر زیمان" نامیده می‌شود.

یادداشت مهم: در واقع، به علت وجود اسپینهای الکترون و پروتون، خط شدید شامل چندین مؤلفه مجاور است (ساختار ریز و فوق ریز؛ فصل ۱۲ را ببینید). به علاوه، درجات آزادی اسپین، اثر میدان مغناطیسی روی مؤلفه‌های مختلف خط شدید را به طور عمده تغییر می‌دهد (اثر زیمان اتم هیدروژن گاهی "بی‌هنجار" نامیده می‌شود). چون در اینجا اثرات اسپین را در نظر نمی‌گیریم، محاسبات زیر حقیقتاً به وضعیت فیزیکی واقعی مربوط نمی‌شوند. اما، می‌توان آنها را به سادگی به مورد اسپینها تعمیم داد (مکمل ۴ فصل ۱۲). به علاوه، نتایجی که به دست خواهیم آورد (ظهور مؤلفه‌های زیمان متعدد با بسامدها و قطبشهای مختلف) از لحاظ کیفی معتبر باقی می‌مانند.

الف) ترازهای انرژی اتم در حضور میدان مغناطیسی

خط شدید هیدروژن متناظر با یک گذار اتمی بین حالت‌های پایه $1s$ ($n = 1; l = m = 0$) و حالت برانگیخته $2p$ ($n = 2; l = 1; m = +1, 0, -1$) است. در حالی که تکانه زاویه‌ای در حالت پایه صفر است، در حالت برانگیخته این طور نیست؛ بنابراین، در محاسبه تغییرات خط در حضور میدان مغناطیسی B ، با صرفنظر کردن از جمله دیامغناطیسی H_2 که منجر به انتخاب $H_0 + H_1$ برای هامیلتونی می‌شود، مرتکب خطای کوچکی می‌شویم.

ویژه‌حالت‌های مشترک H_0 (ویژه‌مقدار $E_n = -E_1/N^2$) و L^2 (ویژه‌مقدار $l(l+1)\hbar^2$) و L_z (ویژه‌مقدار $m\hbar$) را با $(\varphi_{n,l,m})$ نشان می‌دهیم. تابع موجهای این حالتها را در فصل ۷

محاسبه کردیم

$$\varphi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (۳۸)$$

محور Oz را موازی \mathbf{B} انتخاب می‌کنیم؛ آنگاه مشکل نیست بینیم که حالت‌های $|\varphi_{n,l,m}\rangle$ ویژه‌بردارهای $H_0 + H_1$ نیز هستند

$$\begin{aligned} (H_0 + H_1) |\varphi_{n,l,m}\rangle &= \left(H_0 - \frac{\mu_B}{\hbar} B L_z \right) |\varphi_{n,l,m}\rangle \\ &= (E_n - m\mu_B B) |\varphi_{n,l,m}\rangle \end{aligned} \quad (۳۹)$$

بنابراین، اگر از جمله دیامغناطیسی صرف‌نظر کنیم، حالت‌های مانای اتم واقع در میدان \mathbf{B} بار هم $|\varphi_{n,l,m}\rangle$ هستند؛ فقط انرژی‌های متناظر تغییر می‌کنند. به‌ویژه، برای حالت‌هایی که در خط تشدید دخالت دارند، ملاحظه می‌کنیم که

$$(H_0 + H_1) |\varphi_{1,0,0}\rangle = -E_I |\varphi_{1,0,0}\rangle \quad (۴۰-الف)$$

$$(H_0 + H_1) |\varphi_{2,1,m}\rangle = [-E_I + \hbar(\Omega + m\omega_L)] |\varphi_{2,1,m}\rangle \quad (۴۰-ب)$$

که

$$\Omega = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = \frac{3E_I}{4\hbar} \quad (۴۱)$$

عبارت است از بسامد زاویه‌ای خط تشدید در میدان صفر.

ب) نوسان‌های دوقطبی الکتریکی

۱. عناصر ماتریسی عملگر وابسته به دوقطبی به‌فرض

$$\mathbf{D} = q\mathbf{R} \quad (۴۲)$$

عملگر دوقطبی الکتریکی اتم باشد. برای تعیین مقدار میانگین $\langle \mathbf{D} \rangle$ این دوقطبی، از محاسبه عناصر ماتریسی \mathbf{D} شروع می‌کنیم.

تحت انعکاسی نسبت به مبدأ، D به $-D$ تبدیل می‌شود: بنابراین، دوقطبی الکتریکی یک عملگر فرد است (مکمل F_{II} فصل دوم). اما، حالت‌های $(\varphi_{n,l,m} |$ نیز دارای پاریته معین هستند: چون بستگی زاویه‌ای آنها توسط $Y_l^m(\theta, \varphi)$ داده می‌شود، پاریته آنها، l است اگر زوج باشد و $-l$ است اگر فرد باشد (مکمل ۱ فصل ۶). بخصوص نتیجه می‌شود که به‌ازای تمام m و l

$$\begin{cases} \langle \varphi_{1,0,0} | D | \varphi_{1,0,0} \rangle = 0 \\ \langle \varphi_{2,1,m'} | D | \varphi_{2,1,m} \rangle = 0 \end{cases} \quad (43)$$

بنابراین، عناصر ماتریسی غیرصفر D لزوماً عناصر غیرقطری هستند. برای محاسبه عناصر ماتریسی $\langle \varphi_{2,1,m} | D | \varphi_{1,0,0} \rangle$ مناسب است که x, y, z برحسب هماهنگی‌های کروی بیان شوند

$$\begin{cases} x = \sqrt{\frac{2\pi}{3}} r [Y_1^{-1}(\theta, \varphi) - Y_1^1(\theta, \varphi)] \\ y = i\sqrt{\frac{2\pi}{3}} r [Y_1^{-1}(\theta, \varphi) + Y_1^1(\theta, \varphi)] \\ z = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_1^0(\theta, \varphi) \end{cases} \quad (44)$$

بنابراین، در عبارتهای مربوط به عناصر ماتریسی مطلوب داریم:
— از یک طرف، یک انتگرال شعاعی، که مساوی χ قرار خواهیم داد

$$\chi = \int_0^\infty R_{2,1}(r) R_{1,0}(r) r^2 dr \quad (45)$$

— از طرف دیگر، یک انتگرال زاویه‌ای که، با استفاده از روابط (۴۴)، به یک حاصلضرب زده‌ای از هماهنگی‌های کروی تبدیل می‌شود که می‌تواند مستقیماً از روابط تعامدشان محاسبه شود. در نهایت، به‌دست می‌آوریم

$$\left\{ \begin{aligned} \langle \varphi_{2,1,1} | D_x | \varphi_{1,0,0} \rangle &= -\langle \varphi_{2,1,-1} | D_x | \varphi_{1,0,0} \rangle = -\frac{q\chi}{\sqrt{6}} & (\text{الف-۴۶}) \end{aligned} \right.$$

$$\langle \varphi_{2,1,0} | D_x | \varphi_{1,0,0} \rangle = 0$$

$$\left\{ \begin{aligned} \langle \varphi_{2,1,1} | D_y | \varphi_{1,0,0} \rangle &= \langle \varphi_{2,1,-1} | D_y | \varphi_{1,0,0} \rangle = \frac{iq\chi}{\sqrt{6}} & (\text{ب-۴۶}) \end{aligned} \right.$$

$$\langle \varphi_{2,1,0} | D_y | \varphi_{1,0,0} \rangle = 0$$

$$\left\{ \begin{aligned} \langle \varphi_{2,1,1} | D_z | \varphi_{1,0,0} \rangle &= \langle \varphi_{2,1,-1} | D_z | \varphi_{1,0,0} \rangle = 0 & (\text{ج-۴۶}) \end{aligned} \right.$$

$$\langle \varphi_{2,1,0} | D_z | \varphi_{1,0,0} \rangle = \frac{q\chi}{\sqrt{3}}$$

۲. محاسبه مقدار میانگین دوقطبی

نتایج قسمت ۱ نشان می‌دهند که، اگر دستگاه در حالت مانا باشد، مقدار میانگین عملگر D صفر است. حال، فرض می‌کنیم که بردار حالت دستگاه، در ابتدا یک برهم‌نهی خطی از حالت پایه $1s$ و یکی از حالت‌های $2p$ باشد

$$|\psi_m(0)\rangle = \cos \alpha |\varphi_{1,0,0}\rangle + \sin \alpha |\varphi_{2,1,m}\rangle \quad (47)$$

با $m = +1, 0, -1$ یک پارامتر حقیقی است). آنگاه، بلافاصله بردار حالت در زمان t به دست می‌آید

$$|\psi_m(t)\rangle = \cos \alpha |\varphi_{1,0,0}\rangle + \sin \alpha e^{-i(\Omega+m\omega_L)t} |\varphi_{2,1,m}\rangle \quad (48)$$

ما عامل فاز عمومی $e^{iEt/\hbar}$ را حذف کرده‌ایم، زیرا نتیجه فیزیکی‌ای ندارد. برای محاسبه مقدار میانگین دوقطبی الکتریکی

$$\langle D \rangle_m(t) = \langle \psi_m(t) | D | \psi_m(t) \rangle \quad (49)$$

از نتایج (۴۶) و (۴۸) استفاده خواهیم کرد، و سه مورد را متمایز می‌کنیم

(۱) اگر $m = 1$ نتیجه می‌شود

$$\begin{cases} \langle D_x \rangle_1 = \frac{q\chi}{\sqrt{6}} \sin 2\alpha \cos[(\Omega + \omega_L)t] \\ \langle D_y \rangle_1 = -\frac{q\chi}{\sqrt{6}} \sin 2\alpha \sin[(\Omega + \omega_L)t] \\ \langle D_z \rangle_1 = 0 \end{cases} \quad (50)$$

بنابراین، بردار $\langle \mathbf{D} \rangle_1(t)$ در صفحه xOy حول محور Oz در جهت پادساعتگرد با سرعت زاویه‌ای $\Omega + \omega_L$ می‌چرخد.

(۲) اگر $m = 0$ باشد

$$\begin{cases} \langle D_x \rangle_0 = \langle D_y \rangle_0 = 0 \\ \langle D_z \rangle_0 = \frac{q\chi}{\sqrt{3}} \sin 2\alpha \cos \Omega t \end{cases} \quad (51)$$

حرکت $\langle \mathbf{D} \rangle_0(t)$ یک نوسان خطی با بسامد زاویه‌ای Ω در امتداد محور Oz است.

(۳) اگر $m = -1$

$$\begin{cases} \langle D_x \rangle_{-1} = \frac{q\chi}{\sqrt{6}} \sin 2\alpha \cos[\Omega - \omega_L)t] \\ \langle D_y \rangle_{-1} = -\frac{q\chi}{\sqrt{6}} \sin 2\alpha \sin[(\Omega - \omega_L)t] \\ \langle D_z \rangle_{-1} = 0 \end{cases} \quad (52)$$

بردار $\langle \mathbf{D} \rangle_{-1}(t)$ مجدداً در صفحه xOy حول Oz می‌چرخد، اما این دفعه در جهت ساعتگرد و با سرعت زاویه‌ای $\Omega - \omega_L$.

ج) بسامد و قطبش تابش گسیل شده

در سه مورد ($m = +1, 0$ و $m = -1$) مقدار میانگین دوقطبی الکتریکی یک تابع نوسانی زمانی است. واضح است که این دوقطبی انرژی الکترومغناطیسی تابش می‌کند.

چون ابعاد اتمی نسبت به طول موج نوری قابل صرفنظر است، تابش اتم را در فواصل زیاد می‌توان تابش یک دوقطبی در نظر گرفت. فرض خواهیم کرد که مشخصات نور گسیل یافته (یا

جذب شده) توسط اتم هنگام گذار بین یک حالت $(\varphi_{2,1,m})$ و حالت پایه به طور صحیح با محاسبه کلاسیک تابش یک دوقطبی داده می شود که برابر مقدار میانگین مکانیک کوانتومی $\langle D \rangle_m(t)$ است.^۱

برای بیان مسئله به طور دقیق، فرض خواهیم کرد که می خواهیم تابش گسیل یافته توسط نمونه ای حاوی تعداد زیادی اتم هیدروژن را مطالعه کنیم، که به طریقی به حالت $2p$ برانگیخته شده اند. در اغلب آزمایشهایی که تاکنون انجام شده اند، برانگیزش آنها همسانگرد است، و سه حالت $(\varphi_{2,1,1})$ ، $(\varphi_{2,1,0})$ و $(\varphi_{2,1,-1})$ با احتمال یکسان رخ می دهند. بنابراین، با محاسبه نمودار تابش برای هر یک از موارد بخشهای قبل شروع خواهیم کرد. آنگاه، تابش واقعاً گسیل یافته توسط دستگاه اتمی را، برای هر راستای فضایی، با محاسبه مجموع شدت نور گسیل یافته در هر مورد، به دست خواهیم آورد.

(۱) اگر $m = 1$ ، بسامد زاویه ای تابش گسیل یافته برابر است با $(\Omega + \omega_L)$. بنابراین، بسامد خط نوری به طور جزئی توسط میدان مغناطیسی تغییر می کند. مطابق با قوانین الکترومغناطیسی کلاسیک در مورد یک دوقطبی چرخان نظیر $\langle D \rangle_1(t)$ ، تابش گسیل یافته در راستای Oz قطبیده دایره ای است (قطبش متناظر را σ_+ گویند). اما، تابش گسیل یافته در راستای صفحه xOy قطبیده خطی (موازی این صفحه) است. در راستاهای دیگر قطبش بیضوی است.

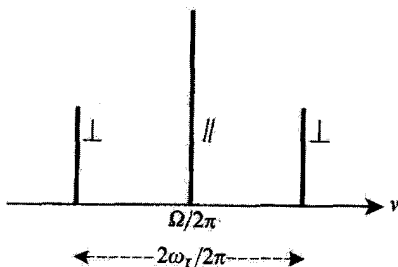
(۲) اگر $m = 0$ ، باید یک دوقطبی نوسانی خطی با بسامد زاویه ای Ω در راستای Oz ، در نظر بگیریم، یعنی مانند موردی که میدان صفر است. پس طول موج تابش توسط میدان B تغییر نمی کند. قطبش آن، در هر راستای انتشار مورد نظر، همیشه خطی است. به عنوان مثال، برای یک راستای واقع در صفحه xOy این قطبش موازی Oz است (قطبش π). هیچ تابشی در راستای Oz گسیل نمی شود. (دوقطبی نوسانی خطی در امتداد محور تابش نمی کند).

(۳) اگر $m = -1$ ، نتایج شبیه نتایج برای $m = 1$ هستند، تنها تفاوت آن است که بسامد زاویه ای تابش به جای $(\Omega + \omega_L)$ برابر $(\Omega - \omega_L)$ است، و دوقطبی در جهت مخالف می چرخد. این، به عنوان مثال، جهت قطبش دایره ای را تغییر می دهد (قطبش $-\sigma$).

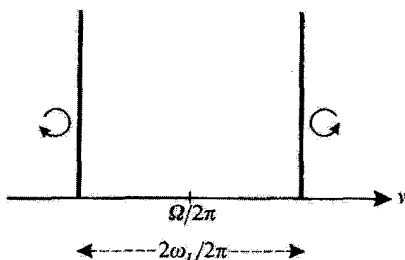
اگر اکنون فرض کنیم که تعداد مساوی از اتمهای برانگیخته در سه حالت $m = +1, 0, -1$ باشند، ملاحظه می کنیم که:

— در یک راستای اختیاری فضایی، سه بسامد نوری گسیل می شوند: $\Omega/2\pi$ و $(\Omega \pm \omega_L)/2\pi$.

۱. اگر می خواستیم مسئله را به طور کاملاً مکانیک کوانتومی بررسی کنیم، می بایست از نظریه مکانیک کوانتومی تابش استفاده کنیم. به ویژه برگشت اتم به حالت پایه با گسیل خودبه خود یک فوتون فقط می تواند در چارچوب این نظریه درک شود. اما، نتایجی که در اینجا به طور نیمه کلاسیک به دست خواهیم آورد، تا جایی که تابش مورد نظر است، اساساً معتبر می ماند.



شکل ۲ مؤلفه‌های زیمان خط تشدید هیدروژن وقتی در راستای عمود بر میدان مغناطیسی B (با صرف نظر کردن از اسپین الکترون) مشاهده شوند، یک مؤلفه با بسامد تغییر نیافته ν به دست می‌آوریم، که موازی B قطبیده است، و دو مؤلفه تغییر یافته $\pm\omega_L/2\pi$ که عمود بر B قطبیده‌اند.



شکل ۳ وقتی مشاهده در راستای میدان B انجام شود، فقط دو مؤلفه زیمان به دست می‌آیند، که به‌طور دایره‌ای از جهت‌های مخالف قطبیده‌اند و به اندازه $\pm\omega/2\pi$ جابه‌جا شده‌اند.

قطبش وابسته به اولین بسامد خطی است، و قطبش وابسته به دو بسامد دیگر، به طور کلی، بیضوی است.

— در راستای عمود بر میدان B ، هر سه قطبش خطی هستند (شکل ۲). اولین قطبش موازی با و دو تای دیگر عمود بر B هستند. شدت خط مرکزی دو برابر شدت هر یک از خطوط تغییر یافته است [فرمولهای (۵۰)، (۵۱)، و (۵۲)]. در راستای موازی با B ، فقط دو بسامد تغییر یافته $(\Omega \pm \omega_L)/2\pi$ گسیل می‌شوند، و قطبشهای نوری وابسته هر دو دایره‌ای ولی در جهت مخالف هستند (شکل ۳).

یادداشت:

بنابراین، اتم تابش قطبیده σ_+ را با رفتن از حالت $|\varphi_{2,1,1}\rangle$ به حالت $|\varphi_{1,0,0}\rangle$ ، σ_- را با رفتن از $|\varphi_{2,1,-1}\rangle$ به $|\varphi_{1,0,0}\rangle$ ، و π را با رفتن از $|\varphi_{2,1,0}\rangle$ به $|\varphi_{1,0,0}\rangle$ گسیل می‌کند. فرمولهای (۴۶)

یک قاعده ساده برای یافتن این قطبشها می دهد. عملگرهای $D_x + iD_y$, $D_x - iD_y$, D_x و D_z را در نظر می گیریم؛ تنها عناصر ماتریسی غیرصفر آنها بین حالت های $2p$ و $1s$ به ترتیب عبارت اند از

$$\langle \varphi_{2,1,1} | D_x + iD_y | \varphi_{1,0,0} \rangle, \langle \varphi_{2,1,-1} | D_x - iD_y | \varphi_{1,0,0} \rangle$$

و

$$\langle \varphi_{2,1,0} | D_z | \varphi_{1,0,0} \rangle$$

بنابراین، به قطبشهای σ_+ , σ_- و π به ترتیب عملگرهای $D_x + iD_y$, $D_x - iD_y$, D_x و D_z متناظرند. این یک قاعده عمومی است: وقتی عملگر D عنصر ماتریسی غیرصفر بین حالت اولیه اتم و حالت نهایی آن دارد، گسیل تابش دوقطبی الکتریکی وجود دارد. قطبش این تابش، بسته به اینکه عنصر ماتریسی غیرصفر متعلق به $D_x + iD_y$, $D_x - iD_y$, D_x یا D_z باشد، σ_+ , σ_- یا π است. \blacksquare

مراجع برای مطالعه بیشتر

پارامغناطیس و دیامغناطیس:

Feynman II (7.2), chaps. 34 and 35; Cagnac and Pebay-Peyroula (11.2), chaps. VIII and IX; Kittel (13.2), chap. 14; Slater (1.6), chap. 14; Flüge (1.24), §§128 and 160.

تابش دوقطبی:

Cagnac and Pebay-Peyroula (1.2), Annex III; Panofsky and Phillips (7.6), §14-7; Jackson (7.5), §9-2.

تکانه زاویه ای تابش و قواعد گزینش:

Cagnac and Pebay-Peyroula (11.2), chap. XI.

مکمل ۵

مطالعهٔ برخی اوربیتالهای اتمی. اوربیتالهای هیبریدی

۱. مقدمه

۲. اوربیتالهای اتمی وابسته به تابع موجهای حقیقی

(الف) اوربیتالهای s ($l = 0$)

(ب) اوربیتالهای p ($l = 1$)

(ج) مقادیر دیگر l

۳. هیبریدشدگی sp

(الف) معرفی اوربیتالهای هیبریدی sp

(ب) خواص اوربیتالهای هیبریدی sp

(ج) مثال: ساختار استیلن

۴. هیبریدشدگی sp^2

(الف) معرفی اوربیتالهای هیبریدی sp^2

(ب) خواص اوربیتالهای هیبریدی sp^2

(ج) مثال: ساختار اتیلن

۵. هیبریدشدگی sp^3

(الف) معرفی اوربیتالهای هیبریدی sp^3

(ب) خواص اوربیتالهای هیبریدی sp^3

(ج) مثال: ساختار متان

۱. مقدمه

در بخش ۷-۳، یک پایهٔ راست‌هنجار از حالت‌های مانا برای الکترون اتم هیدروژن تعیین کردیم. تابع موجهای متناظر عبارت‌اند از

$$\varphi_{n,l,m}(\mathbf{r}) = R_{n,l}(r)Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (1)$$

و اعداد کوانتومی n ، l ، و m ، به‌ترتیب متناظر با انرژی با $E_n = -E_I/n^2$ ، مجذور تکانهٔ زاویه‌ای $l(l+1)\hbar^2$ ، و مؤلفهٔ O_z تکانهٔ زاویه‌ای $m\hbar$ هستند.

با برهم‌نهی خطی حالت‌های مانای مربوط به یک انرژی، یعنی، به یک عدد کوانتومی m می‌توانیم حالت‌های مانای جدیدی بسازیم که دیگر لزوماً متناظر با مقادیر معین l و m نیستند. در این مکمل، قصد داریم خواص برخی از این حالت‌های مانای جدید را — به‌ویژه، بستگی زاویه‌ای تابع موجهای وابسته را — مطالعه کنیم.

تابع موجهای (۱) غالباً اوربیتالهای اتمی نامیده می‌شوند. برهم‌نهی خطی اوربیتالهای با یک n ولی l و m متفاوت را اوربیتال هیبریدی گویند. خواهیم دید که یک اوربیتال هیبریدی می‌تواند در برخی راستاهای فضایی بیشتر از اوربیتالهای (ساده) سازنده آن امتداد یابد. این خاصیت، که در تشکیل پیوندهای شیمیایی مهم است، معرفی اوربیتالهای هیبریدی اتم را توجیه می‌کند. اگر چه محاسبات ارائه شده در این مکمل به‌طور دقیق فقط در مورد اتم هیدروژن معتبر است، به‌طور کیفی نشان خواهیم داد که چگونه آنها ساختار هندسی پیوندهای مختلفی را که یک اتم دارای چند الکترون ظرفیت تشکیل می‌دهد توضیح می‌دهند.

۲. اوربیتالهای اتمی وابسته به تابع موجهای حقیقی

در عبارت (۱)، تابع شعاعی $R_{n,l}(r)$ حقیقی است. اما، $Y_l^m(\theta, \varphi)$ بجز برای $m = 0$ ، یک تابع مختلط از φ است، زیرا

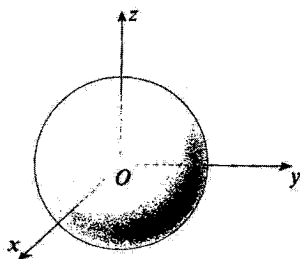
$$Y_l^m(\theta, \varphi) = F_l^m(\theta) e^{im\varphi} \quad (2)$$

که $F_l^m(\theta)$ یک تابع حقیقی از θ است.

بنابراین، اوربیتالهای اتمی به‌طور کلی توابع مختلط هستند. اما در برهم‌نهی اوربیتالهای $\varphi_{n,l,m}(r)$ و $\varphi_{n,l,-m}(r)$ می‌توان، اوربیتالهای حقیقی ساخت که مزیت آنها بستگی زاویه‌ای ساده آنهاست، که می‌تواند بدون مربع گرفتن از قدرمطلق تابع موج به‌طور نموداری نمایش داده شود (همان‌طور که در بخش ۷-۳-۴ قسمت ج-۱ انجام دادیم).

الف) اوربیتالهای s ($l = 0$)

وقتی $l = m = 0$ ، تابع موج $\varphi_{n,0,0}(r)$ حقیقی است و می‌گوییم با یک "اوربیتال s " سروکار داریم. حالت مانای متناظر را با φ_{ns} نمایش می‌دهیم. برای نمایش بستگی زاویه‌ای اوربیتال ns ، r را ثابت می‌گیریم و در هر راستا با زاویه‌های قطبی θ و φ یک قطعه خط به‌طول $\varphi_{ns}(r, \theta, \varphi)$ جدا می‌کنیم. سطحی که از تغییر θ و φ به‌دست می‌آید کره‌ای است به‌مرکز O (شکل ۱).



شکل ۱ اوربیتال s به طور کروی متقارن است: تابع موج آن به θ و φ بستگی ندارد.

(ب) اوربیتالهای p ($l = 1$)

۱. اوربیتالهای p_x, p_y, p_z

اگر عبارت مربوط به سه هماهنگ کروی $Y_l^m(\theta, \varphi)$ داده شده در مکمل ۱ فصل ۶ را به کار ببریم [فرمولهای (۳۲)], برای سه اوربیتال $\varphi_{n,l,m}(\mathbf{r})$ متناظر با $l = 1$ به دست می آوریم

$$\begin{cases} \varphi_{n,1,1}(\mathbf{r}) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} R_{n,1}(r) \sin \theta e^{i\varphi} & \text{(الف-۳)} \\ \varphi_{n,1,0}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{n,1}(r) \cos \theta & \text{(ب-۳)} \\ \varphi_{n,1,-1}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} R_{n,1}(r) \sin \theta e^{-i\varphi} & \text{(ج-۳)} \end{cases}$$

اکنون سه برهم نهی خطی زیر را تشکیل می دهیم

$$\begin{cases} \varphi_{n,1,0}(\mathbf{r}) & \text{(الف-۴)} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{n,1,1}(\mathbf{r}) - \varphi_{n,1,-1}(\mathbf{r})] & \text{(ب-۴)} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} [\varphi_{n,1,1}(\mathbf{r}) + \varphi_{n,1,-1}(\mathbf{r})] & \text{(ج-۴)} \end{cases}$$

به سهولت دیده می شود که سه تابع موج قبلی را نیز می توان به صورت زیر نوشت

$$\left\{ \begin{array}{l} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{n,1}(r) \frac{z}{r} \quad (\text{الف-۵}) \\ \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{n,1}(r) \frac{x}{r} \quad (\text{ب-۵}) \\ \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{n,1}(r) \frac{y}{r} \quad (\text{ج-۵}) \end{array} \right.$$

اینها توابع حقیقی از r , θ , و φ هستند که، مانند $\varphi_{n,l,m}(r)$ متعامدند و تشکیل پایه ای در زیر فضای $\mathcal{E}_{n,l=1}$ می دهند. آنها را به ترتیب "اوربیتالهای p_x , p_y , و p_z " گویند. تابع موجهای (۵) را با $\varphi_{npz}(r)$ و $\varphi_{npy}(r)$ نشان می دهیم.

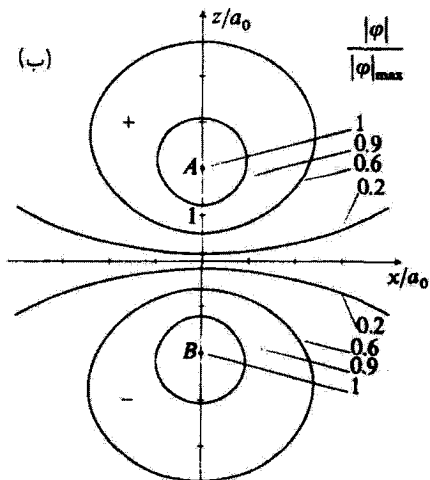
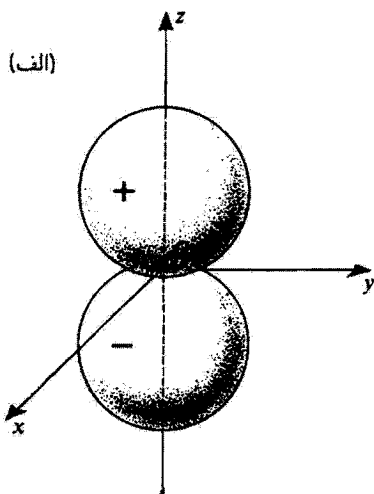
دو نمایش هندسی متمایز ما را قادر می سازند که شکل اوربیتال $\psi(r, \theta, \varphi)$ را مجسم کنیم. اول از همه، اگر بستگی زاویه ای مدار مورد توجه باشد، r را ثابت می گیریم و قطعه خطی به طول $|\psi(r, \theta, \varphi)|$ را در هر راستا با زوایای قطبی θ و φ جدا می کنیم. بنابراین، بستگی زاویه ای اوربیتال p_z برابر است با $\cos \theta = z/r$. وقتی φ از 0 تا 2π و θ از 0 تا π تغییر می کند، انتهای قطعه خط به طول $|\cos \theta|$ که در راستای با زوایای قطبی θ و φ رسم می شود دو کره می بیناید که مراکز آنها روی محور Oz هستند و در نقطه O به صفحه xOy مماس اند و تصاویر آینه ای نسبت به صفحه xOy هستند [شکل ۲ (الف)]. علامت نشان داده شده در شکل مربوط به تابع موج است که حقیقی است. نمایش ممکن دیگر اوربیتال $\psi(r, \theta, \varphi)$ با ترسیم یک خانواده از سطوح به دست می آید که هر کدام متناظر با یک مقدار معین $|\psi(r, \theta, \varphi)|$ است (سطوح چگالی احتمال یکسان). این آن چیزی است که برای اوربیتال p_z در شکل ۲ (ب) انجام شده است (در اینجا نیز، علامت نشان داده شده، علامت تابع موج است، که حقیقی است). در بقیه این مکمل هر دو نمایش را به کار خواهیم برد.

اوربیتالهای p_x و p_y به ترتیب می توانند از اوربیتالهای p_z با دورانهایی به اندازه زوایای $\pi/2 + \pi$ و $-\pi/2$ حول Ox و Oy به دست آیند [شکلهای ۳ و ۴ که در آنها همان نمایش هندسی شکل ۲ (الف) به کار رفته است].

بنابراین، برخلاف اوربیتال s که تقارن کروی دارد، اوربیتالهای p_x , p_y , و p_z به ترتیب در امتداد محورهای Oz , Ox , و Oy قرار دارند.

۲. اوربیتالهای p_u

انتخاب محورهای Ox , Oy , و Oz به وضوح اختیاری است. بنابراین، با برهم نهی خطی اوربیتالهای



شکل ۲ دو نمایش ممکن از اوربیتال p_z ($l = 1, m = 0$) (الف): بستگی زاویه‌ای این اوربیتال به ازای π ثابت، $|\varphi_{n,l=1,m=0}(r, \theta, \varphi)|$ را برای هر راستای θ و φ نمایش می‌دهیم. بنابراین دو کره به دست می‌آید که در O بر صفحه xOy مماس هستند. علامت نشان داده شده روی هر کدام از آنها علامت تابع موج (که حقیقی است) است. (ب): مقطع یک خانواده سطوح در صفحه xOz ، هر کدام متناظر با یک مقدار معینی برای $|\varphi_{n,l=1,m=0}(r, \theta, \varphi)|$ [با مقادیری مساوی با ۰.۲، ۰.۶، و ۱] و $\theta = 90^\circ$ ماکزیموم مقدار $|\varphi|$ در نقاط A و B را انتخاب کرده‌ایم. اینها سطوح دوران حول Oz هستند. علامت نشان داده شده علامت تابع موج (که حقیقی است) است. برخلاف مورد (الف)، نمایش در (ب) بستگی به قسمت شعاعی تابع موج دارد (مورد انتخاب شده در اینجا متناظر با حالت $n = 2$ ام هیدروژن است).

p_x ، p_y ، و p_z قادر خواهیم بود اوربیتال p_u ای بسازیم که دارای همان شکل، در راستای محور اختیاری Ou باشد.

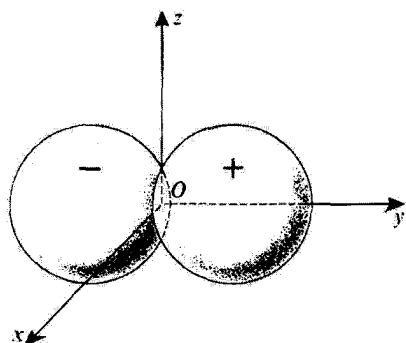
به فرض Ou محوری باشد که تشکیل زوایای θ ، β ، و γ نسبت به Ox ، Oy ، Oz می‌دهد. به‌وضوح داریم

$$\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma = 1 \quad (۶)$$

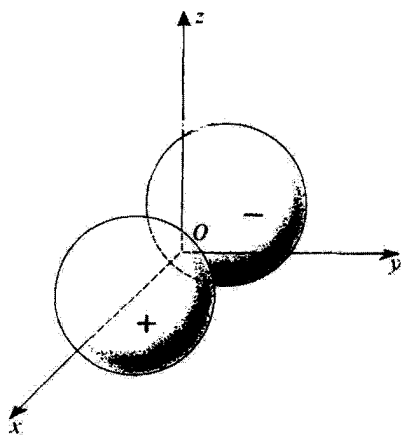
حالت زیر را در نظر می‌گیریم

$$\cos \alpha |np_x\rangle + \cos \beta |np_y\rangle + \cos \gamma |np_z\rangle \quad (۷)$$

که، برطبق (۶)، بهنجار شده است. می‌توانیم، با استفاده از (۵)، تابع موج متناظر را به شکل زیر



شکل ۴ بستگی زاویه‌ای اوربیتال p_y .



شکل ۳ بستگی زاویه‌ای اوربیتال p_z [نمایش انتخاب شده همان نمایش شکل ۲ (الف) است].

بنویسیم

$$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{n,1}(r) \frac{x \cos \alpha + y \cos \beta + z \cos \gamma}{r} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{n,1}(r) \frac{u}{r} \quad (8)$$

که

$$u = x \cos \alpha + y \cos \beta + z \cos \gamma \quad (9)$$

تصویر r روی محور Ou است. مقایسه با (δ) نشان می‌دهد که اوربیتالی که بدین طریق ساخته شده است در واقع یک اوربیتال p_u است.

بنابراین، هر برهم‌نهی خطی حقیقی و بهنجار شده از اوربیتالهای p_x ، p_y و p_z

$$\lambda \varphi_{np_x}(r) + \mu \varphi_{np_y}(r) + \nu \varphi_{np_z}(r) \quad (10)$$

می‌تواند یک اوربیتال p_u تلقی شود که در امتداد Ou ، که به صورت زیر تعریف می‌شود است

$$\begin{cases} \cos \alpha = \lambda \\ \cos \beta = \mu \\ \cos \gamma = \nu \end{cases} \quad (11)$$

۳. مثال: ساختار مولکولهای H_2N و H_2O

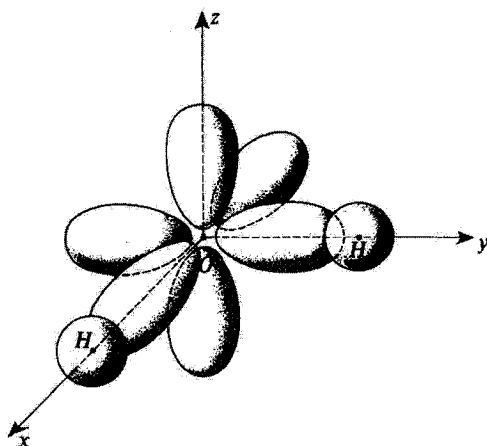
در تقریب اول (مکمل ۱ فصل ۱۴)، در اتم چندالکترونی، هر الکترون را می‌توان این‌طور در نظر گرفت که مستقل از دیگر الکترونها در پتانسیل مرکزی $V_c(r)$ می‌کند که برابر مجموع پتانسیل الکتروستاتیک جاذبه هسته و یک "پتانسیل میانگین" ناشی از دافعه الکترونهای دیگر است. بنابراین، هر الکترون می‌تواند در حالتی یافت شود که توسط سه عدد کوانتومی n ، l ، و m مشخص می‌شود. اما، چون پتانسیل $V_c(r)$ دیگر دقیقاً به صورت $1/r$ تغییر نمی‌کند، انرژی نه فقط به n بلکه به l نیز بستگی دارد. در مکمل ۱ فصل ۱۴ خواهیم دید که انرژی حالت $2s$ به‌طور جزئی کمتر از انرژی حالت $2p$ است. حالت $3s$ نیز پایینتر از حالت $3p$ است که این هم به نوبه خود پایینتر از حالت $3d$ است و غیره...

وجود اسپین و اصل پاولی (که در فصلهای ۹ و ۱۴ مطالعه خواهیم کرد) ایجاب می‌کنند که زیرلایه‌های $1s$ ، $2s$ ، می‌توانند شامل فقط دو الکترون باشند؛ زیرلایه‌های $2p$ ، $3p$ دارای شش الکترون و ...؛ زیرلایه‌های nl دارای $2(2l+1)$ الکترون هستند (عامل $2l+1$ از واگنی مربوط به L_z ناشی می‌شود، و عامل ۲، از اسپین الکترون).

بنابراین، برای اتم اکسیژن، که هشت الکترون دارد، زیرلایه‌های $1s$ ، $2s$ پر شده‌اند و جمعاً چهار الکترون دارند. چهار الکترون باقیمانده در زیرلایه $2p$ هستند؛ دو تا از آنها (با اسپینهای مخالف) می‌توانند یکی از سه اوربیتال $2p$ ، به‌عنوان مثال $2p_z$ را پر کنند؛ دو تای دیگر در اوربیتالهای باقیمانده $2p_x$ و $2p_y$ توزیع می‌شوند. این دو الکترون آخر الکترونهای ظرفیت هستند؛ آنها "جفت نشده" هستند، که می‌رساند که اوربیتالهای مربوط به آنها می‌توانند الکترون دیگری بپذیرند. بنابراین، تابع موجهای $2p_x$ و $2p_y$ الکترونهای ظرفیت اکسیژن، در امتداد دو محور متعام قرار دارند. اکنون می‌توان نشان داد که، هر چه همپوشی تابع موجهای دو الکترون شرکت‌کننده در یک پیوند شیمیایی بیشتر باشد، پایداری این پیوند بیشتر است. بنابراین، دو اتم هیدروژن که به اتم اکسیژن متصل می‌شوند تا یک مولکول آب تشکیل دهند باید مرکزشان به‌ترتیب روی محورهای Ox و Oy واقع شود. پس اوربیتال کروی $1s$ الکترون ظرفیت هر هیدروژن به‌طور ماکزیموم اوربیتالهای الکترونهای ظرفیت اکسیژن را همپوشی خواهد کرد. شکل ۵ نمایشگر شکل ابر احتمال وابسته به الکترونهای ظرفیت اتمهای اکسیژن و هیدروژن در مولکول آب است. نمایش نموداری به‌کار رفته شبیه به نمایش شکل ۲ (ب) است. برای هر الکترون سطحی را رسم کرده‌ایم که به‌صورت زیر تعریف می‌شود: چگالی احتمال در تمام نقاط این صفحه یکسان است؛ این مقدار طوری انتخاب می‌شود که احتمال کل موجود در داخل سطح یک مقدار ثابت نزدیک به ۱ (مثلاً ۰٫۹) داشته باشد.

استدلال بالا ما را قادر می‌سازد که شکل مولکول H_2O را درک کنیم. زاویه بین دو پیوند OH باید نزدیک به 90° باشد. در واقع، زاویه‌ای که به‌طور تجربی پیدا شده است برابر 104° است. انحراف از مقدار 90° ، تا حدی ناشی از دافعه الکتروستاتیک بین دو پروتون اتمهای هیدروژن است، که تمایل دارد زاویه بین دو پیوند OH را منفرجه سازد.^۱

۱. منفرجه شدن زاویه بین دو پیوند OH را می‌توان ناشی از یک هیبریدشدگی جزئی sp^2 از اوربیتالهای $2p$ و $2s$ دانست (بخش ۵) همین مکمل را ببینید.



شکل ۵ ساختار طرح‌واره‌ای مولکول آب H_2O . اوربیتالهای $2p_x$ و $2p_y$ بیوندهایی می‌دهند که یک زاویه تقریباً 90° می‌سازند (زاویه واقعی 104° است که به علت دافعه الکتروستاتیکی بین دو پروتون است).

استدلال مشابهی شکل هرمی مولکول NH_3 را توضیح می‌دهد. سه الکترون ظرفیت نیتروژن اوربیتالهای $2p_x$ ، $2p_y$ ، و $2p_z$ را اشغال می‌کنند که زوایای قائمه نسبت به یکدیگر می‌سازند. باز هم در اینجا دافعه الکتروستاتیک بین پروتونهاى سه اتم هیدروژن باعث می‌شود که زاویه پیوند از 90° به 108° افزایش یابد (به علت یک هیبریدشدگی جزئی اوربیتالهای $2p$ و $2s$).

ج) مقادیر دیگر l

تاکنون فقط اوربیتالهای s و p را در نظر گرفته‌ایم. مثلاً هر پایه راست‌هنجار از اوربیتالهای حقیقی را می‌توان برای هر مقدار از l ساخت. اگر توجه کنیم که [رابطه (۶-۱۰۵)]:

$$[Y_l^m(\theta, \varphi)]^* = (-1)^m Y_l^{-m}(\theta, \varphi) \quad (12)$$

فوراً می‌بینیم که (برای $m \neq 0$) دو تابع مختلط $\varphi_{n,l,m}(\mathbf{r})$ و $\varphi_{n,l,-m}(\mathbf{r})$ را می‌توان توسط دو تابع زیر جانشین کرد

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{n,l,m}(\mathbf{r}) + (-1)^m \varphi_{n,l,-m}(\mathbf{r})] \quad (13\text{-الف})$$

$$\frac{i}{\sqrt{2}} [\varphi_{n,l,m}(\mathbf{r}) - (-1)^m \varphi_{n,l,-m}(\mathbf{r})] \quad (13\text{-ب})$$

که حقیقی و راست‌هنجارند.

بنابراین، برای $l = 2$ ("اوربیتال‌های d ")، می‌توانیم پنج اوربیتال حقیقی بسازیم که بستگی زاویه‌ای آن توسط روابط زیر داده می‌شود

$$\sqrt{\frac{1}{2}}(3 \cos^2 \theta - 1), \sqrt{6} \sin \theta \cos \theta \cos \varphi, \sqrt{6} \sin \theta \cos \theta \sin \varphi$$

$$\sqrt{\frac{3}{2}} \sin^2 \theta \cos 2\varphi, \sqrt{\frac{3}{2}} \sin^2 \theta \sin 2\varphi$$

(اوربیتال‌های d_{xy} ، $d_{x^2-y^2}$ ، d_{zy} ، d_{zx} ، $d_{z^2-r^2}$).

شکل این اوربیتال‌ها از اوربیتال‌های s و p ، که در اینجا فقط به آنها می‌پردازیم، کمی پیچیده‌تر است. اما، می‌توانیم استدلالی مطابق آنچه در زیر آمده است در مورد آنها به‌کار ببریم.

۳. هیبریدشدگی sp

الف) معرفی اوربیتال‌های هیبریدی sp

باز می‌گردیم به اتم هیدروژن و زیرفضای $\mathcal{E}_{np} \otimes \mathcal{E}_{ns}$ را در نظر می‌گیریم که توسط چهار اوربیتال حقیقی $\varphi_{np_z}(\mathbf{r})$ ، $\varphi_{np_y}(\mathbf{r})$ ، $\varphi_{np_x}(\mathbf{r})$ ، $\varphi_{ns}(\mathbf{r})$ (که متناظر با انرژی‌های یکسانی هستند) تشکیل شده است. نشان خواهیم داد که از برهم‌نهی خطی اوربیتال‌های np و ns می‌توانیم اوربیتال‌های دیگری بسازیم که تشکیل یک پایهٔ راست‌هنجار در $\mathcal{E}_{ns} \otimes \mathcal{E}_{np}$ می‌دهند و دارای برخی خواص جالب‌اند.

ما از برهم‌نهی خطی مداری $\varphi_{np_z}(\mathbf{r})$ و $\varphi_{ns}(\mathbf{r})$ به تنهایی، بدون استفاده از $\varphi_{np_x}(\mathbf{r})$ و $\varphi_{np_y}(\mathbf{r})$ شروع خواهیم کرد. بنابراین دو تابع $\varphi_{np_z}(\mathbf{r})$ و $\varphi_{ns}(\mathbf{r})$ را توسط دو ترکیب خطی راست‌هنجار حقیقی جانشین می‌کنیم

$$\begin{cases} \cos \alpha \varphi_{ns}(\mathbf{r}) + \sin \alpha \varphi_{np_z}(\mathbf{r}) & (۱۴-الف) \\ \sin \alpha \varphi_{ns}(\mathbf{r}) - \cos \alpha \varphi_{np_z}(\mathbf{r}) & (۱۴-ب) \end{cases}$$

به‌علاوه، لازم می‌کنیم که دو اوربیتال (۱۴-الف) و (۱۴-ب) شکل هندسی یکسانی داشته باشند. چون این شکل فقط بستگی به مقادیر نسبی اوربیتال‌های s و p در برهم‌نهی خطی دارد،

فوراً ملاحظه می‌شود که باید داشته باشیم $\sin \alpha = \cos \alpha$ یعنی $\alpha = \pi/4$. بنابراین، دو اوربیتال جدیدی که معرفی می‌کنیم به شکل زیرند

$$\begin{cases} \varphi_{n,s,p_z}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_{ns}(\mathbf{r}) + \varphi_{np_z}(\mathbf{r})] & (۱۵-الف) \\ \varphi'_{n,s,p_z}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_{ns}(\mathbf{r}) - \varphi_{np_z}(\mathbf{r})] & (۱۵-ب) \end{cases}$$

که متناظر به چیزی است که "هیبریدشدگی sp " نامیده می‌شود. بدین ترتیب، یک پایهٔ راست هنجار جدید در $\mathcal{E}_{ns} \otimes \mathcal{E}_{np}$ ساخته‌ایم که از $\varphi_{n,s,p_z}(\mathbf{r})$ ، $\varphi'_{n,s,p_z}(\mathbf{r})$ ، $\varphi_{np_x}(\mathbf{r})$ و $\varphi_{np_y}(\mathbf{r})$ ترکیب یافته است.

ب) خواص اوربیتالهای هیبریدی sp

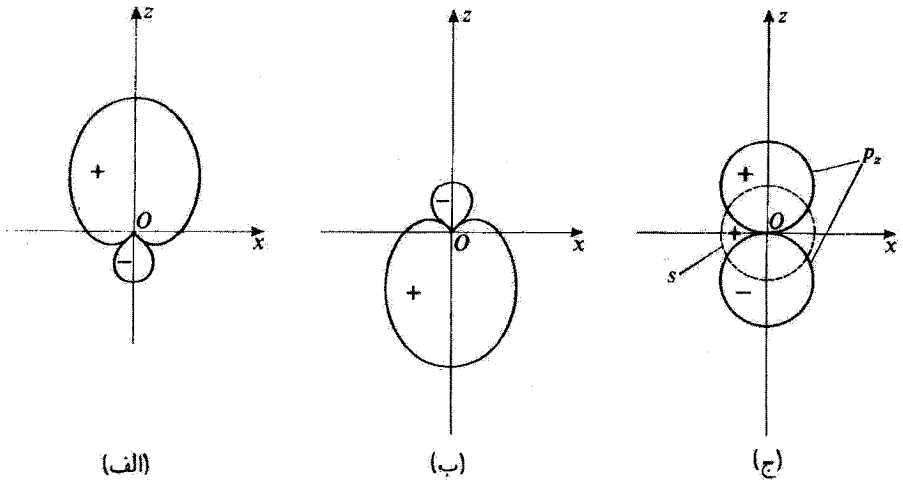
برای مطالعهٔ بستگی زاویه‌ای اوربیتالهای هیبریدی $\varphi_{n,s,p_z}(\mathbf{r})$ و $\varphi'_{n,s,p_z}(\mathbf{r})$ یک مقدار معین r از انتخاب می‌کنیم و قرار می‌دهیم

$$\begin{aligned} \lambda &= \sqrt{\frac{1}{4\pi}} R_{n,0}(r_0) \\ \mu &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{n,1}(r_0) \end{aligned} \quad (۱۶)$$

بنابراین، با استفاده از (۵) و (۱۵) توابع زاویه‌ای

$$\begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}(\lambda + \mu \cos \theta) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\lambda - \mu \cos \theta) \end{cases} \quad (۱۷)$$

را به دست می‌آوریم که آنها را، با استفاده از روش بخش ۲ [شکل ۲ (الف)]، با جدا کردن قطعه خطی به طول $|\lambda + \mu \cos \theta|/\sqrt{2}$ یا $|\lambda - \mu \cos \theta|/\sqrt{2}$ در امتداد هر راستایی با زوایای قطبی θ و φ ، نشان خواهیم داد و با علامت مثبت یا منفی برحسب اینکه تابع موج مثبت یا منفی باشد مشخص می‌کنیم. شکل ۶ مقطع سطوح به دست آمده را در صفحه xOz نمایش می‌دهد، که دارای تقارن استوانه‌ای نسبت به Oz هستند (فرض کرده‌ایم که $\mu > \lambda > 0$). اوربیتال $\varphi_{n,s,p_z}(\mathbf{r})$ می‌تواند توسط انعکاس نسبت به نقطهٔ O به $\varphi'_{n,s,p_z}(\mathbf{r})$ تبدیل شود. می‌توان دید که



شکل ۶ بستگی زاویه‌ای $\varphi_{n,s,p_z}(\mathbf{r})$ (الف) و $\varphi'_{n,s,p_z}(\mathbf{r})$ (ب)، اوربیتالهای هیبریدی به دست آمده از اوربیتالهای $\varphi_{ns}(\mathbf{r})$ و $\varphi_{np_z}(\mathbf{r})$ که پارته‌های مخالف دارند (ج). یک اوربیتال هیبریدی می‌تواند در برخی راستاها بیشتر از اوربیتالهای خالصی که از آنها حاصل می‌شود گسترش یابد.

اوربیتال $\varphi_{n,s,p_z}(\mathbf{r})$ تقارن ساده‌ای نسبت به نقطه O ندارد. این بی‌تقارنی ناشی از این واقعیت است که اوربیتالهای $\varphi_{ns}(\mathbf{r})$ و $\varphi_{np_z}(\mathbf{r})$ که از آنها تشکیل یافته است [و در شکل ۶ (ج)، نشان داده شده‌اند] پارته‌های مخالف دارند. در ناحیه $z > 0$ ، $\varphi_{ns}(\mathbf{r})$ و $\varphi_{np_z}(\mathbf{r})$ یک علامت دارند و با هم جمع می‌شوند، در صورتی که در ناحیه $z < 0$ ، $\varphi_{ns}(\mathbf{r})$ و $\varphi_{np_z}(\mathbf{r})$ علامتهای مخالف دارند و از هم کم می‌شوند. برای $\varphi'_{n,s,p_z}(\mathbf{r})$ عکس این نتایج صادق‌اند.

بنابراین، اوربیتال $\varphi_{n,s,p_z}(\mathbf{r})$ در جهت مثبت محور Oz بیشتر از جهت منفی گسترش می‌یابد زیرا، برای r ثابت، مقادیری که می‌گیرد (از لحاظ قدرمطلق) برای $\theta = 0$ بیشترند تا برای $\theta = \pi$. به‌طور کلی، برای مقادیر زیاد r ، λ و μ طوری هستند که مقادیری که اوربیتال $\varphi_{n,s,p_z}(\mathbf{r})$ در جهت مثبت محور Oz می‌گیرد بیشتر از مقادیری هستند که به‌طور مجزا اوربیتالهای $\varphi_{ns}(\mathbf{r})$ و $\varphi_{np_z}(\mathbf{r})$ می‌گیرند [همین نتایج برای اوربیتال $\varphi'_{n,s,p_z}(\mathbf{r})$ و جهت منفی محور Oz معتبرند].

این خاصیت نقش مهمی در مطالعه پیوند شیمیایی دارد. برای درک کیفی آن فرض کنید که، در یک اتم خاص A ، یکی از الکترونهاى ظرفیت بتواند اوربیتال ns یا یکی از اوربیتالهای np باشد. حال فرض کنید که اتم دیگر B در مجاورت اتم اولی باشد؛ خط واصل A و B را محور Oz می‌گیریم. اوربیتال $\varphi_{n,s,p_z}(\mathbf{r})$ مربوط به A ، اوربیتالهای الکترونهاى ظرفیت B را بیشتر از اوربیتالهای $\varphi_{ns}(\mathbf{r})$ یا $\varphi_{np_z}(\mathbf{r})$ می‌پوشاند. بنابراین، ملاحظه می‌کنیم که هیبرید شدن اوربیتالهای

A می‌تواند منجر به پایداری بیشتر پیوند شیمیایی شود، زیرا، همان‌طور که قبلاً متذکر شدیم، با همپوشانی اوربیتالهای الکترونیکی A و B که در پیوند دخالت دارند، این پایداری افزایش می‌یابد.

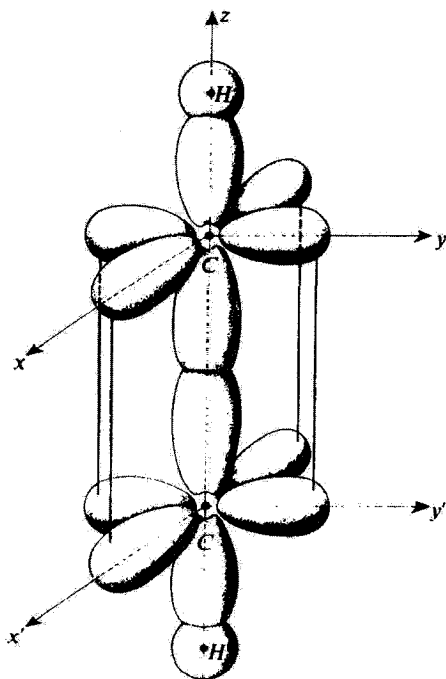
ج) مثال: ساختار استیلن

اتم کربن شش الکترون دارد. وقتی این اتم آزاد است، دو الکترون از این الکترونها در زیرلایه ۱s و دو تا در زیرلایه ۲s و دو تا در زیرلایه ۲p قرار دارند. فقط این دو الکترون آخر جفت نشده هستند و از این رو انتظار داریم که کربن دو ظرفیتی باشد. این در واقع آن چیزی است که در برخی از ترکیباتش مشاهده می‌شود. اما، کربن معمولاً به شکل چهار ظرفیتی وجود دارد. این ناشی از این واقعیت است که وقتی یک اتم کربن به اتمهای دیگر مقید است، یکی از الکترونها ۲s آن می‌تواند این زیرلایه را ترک کند و خود را در سومین اوربیتال ۲p، که در اتم کربن آزاد اشغال نشده است، قرار دهد. از این رو چهار الکترون جفت‌نشده وجود دارند که تابع موجهای آنها نتیجه هیبرید شدن چهار اوربیتال ۲s، ۲p_x، ۲p_y و ۲p_z هستند.

بنابراین، در مولکول استیلن C₂H₂، چهار الکترون ظرفیت هر اتم کربن به صورت زیر توزیع می‌شوند: دو الکترون در اوربیتالهای هیبریدی $\varphi_{2,s,p_z}(\mathbf{r})$ و $\varphi'_{1,s,p_z}(\mathbf{r})$ که اخیراً معرفی کردیم، و دو تای دیگر در اوربیتالهای $\varphi_{2p_x}(\mathbf{r})$ و $\varphi_{2p_y}(\mathbf{r})$ که در بخش ۲-ب مطالعه شدند. برطبق شکل‌های ۶ (الف) و ۶ (ب)، دو الکترون هر اتم کربن که اوربیتالهای هیبریدی $\varphi_{2,s,p_z}(\mathbf{r})$ و $\varphi'_{1,s,p_z}(\mathbf{r})$ را اشغال می‌کنند در پیوندهایی که از هم به اندازه ۱۸۰° فاصله دارند شرکت می‌کنند: اولین الکترون با اتم کربن دیگر، و دومین الکترون با یکی از دو اتم هیدروژن (که الکترونها ظرفیت آنها اوربیتالهای ۱s را اشغال می‌کنند). بنابراین، درک می‌کنیم چرا مولکول C₂H₂ خطی است (شکل ۷) را که در آن از همان نوع نمایش نموداری شکل ۵ استفاده کرده‌ایم ببینید.)
 راجع به اوربیتالهای ۲p_x که مرکز آنها در هر اتم کربن واقع است، این اوربیتالها یک همپوشی جانبی جزئی انجام می‌دهند، به‌مانند آنچه دو اوربیتال ۲p_y انجام می‌دهند، که در شکل ۷ با خطوط توپر نشان داده شده است. اینها در تقویت پایداری شیمیایی مولکول شرکت می‌کنند. بدین ترتیب، کربن تشکیل یک پیوند سه‌گانه بین خود می‌دهند: یک پیوند توسط اوربیتالهای هیبریدی $\varphi_{2,s,p_z}(\mathbf{r})$ و $\varphi'_{1,s,p_z}(\mathbf{r})$ که مرکز هر کدام روی یکی از دو اتم واقع است و نسبت به محور Oz تقارن استوانه‌ای دارند، ایجاد می‌شود (پیوند σ). دو پیوند توسط اوربیتالهای $\varphi_{2p_x}(\mathbf{r})$ و $\varphi_{2p_y}(\mathbf{r})$ که نسبت به صفحه‌های xOz و yOz متقارن هستند، ایجاد می‌شوند (پیوندهای π).

یادداشت:

همان‌طور که قبلاً متذکر شدیم، زیرلایه ۲p، در اتم چندالکترونی، دارای انرژی بیشتری از زیرلایه ۲s است. بنابراین، حرکت یک الکترون از زیرلایه ۲s به زیرلایه ۲p، از لحاظ انرژی مجاز نیست. اما، انرژی لازم برای این برانگیختگی کاملاً توسط افزایش در پایداری ناشی از اوربیتالهای هیبریدی درگیر در پیوندهای C-H و C-C جبران می‌شود.



شکل ۷ ساختار طرح‌واره‌ای مولکول استیلن C_2H_2 . برای هر اتم کربن، دو اوربیتالهای هیبریدی sp_2 (شکل ۶) هستند و در پیوندهای $C-H$ و $C-C$ (پیوند σ) شرکت می‌کنند. به علاوه، دو الکترون در اوربیتالهای p_y و p_x هستند و تشکیل پیوندهای اضافی بین دو اتم کربن می‌دهند (پیوندهای π)، که ضعیفتر از پیوندهای σ هستند، که با خطوط عمودی نشان داده شده‌اند. بنابراین، پیوند $C-C$ یک "پیوند سه‌گانه" است.

۴. هیبریدشدگی sp^2

الف) معرفی اوربیتالهای هیبریدی sp^2

اکنون به چهار اوربیتال $\varphi_{ns}(\mathbf{r})$ ، $\varphi_{np_x}(\mathbf{r})$ ، $\varphi_{np_y}(\mathbf{r})$ و $\varphi_{np_z}(\mathbf{r})$ برمی‌گردیم و سه اوربیتال اول را توسط سه ترکیب حقیقی زیر جانشین می‌کنیم

$$\begin{cases} \varphi_{n,s,p_x,p_y}(\mathbf{r}) = a \varphi_{ns}(\mathbf{r}) + b \varphi_{np_x}(\mathbf{r}) + c \varphi_{np_y}(\mathbf{r}) & \text{(الف-۱۸)} \\ \varphi'_{n,s,p_x,p_y}(\mathbf{r}) = a' \varphi_{ns}(\mathbf{r}) + b' \varphi_{np_x}(\mathbf{r}) + c' \varphi_{np_y}(\mathbf{r}) & \text{(ب-۱۸)} \\ \varphi''_{n,s,p_x,p_y}(\mathbf{r}) = a'' \varphi_{ns}(\mathbf{r}) + b'' \varphi_{np_x}(\mathbf{r}) + c'' \varphi_{np_y}(\mathbf{r}) & \text{(ج-۱۸)} \end{cases}$$

می‌خواهیم سه تابع موج (۱۸) هم‌ارز باشند، یعنی، تحت دوران حول Oz قابل تبدیل به یکدیگر باشند. در نتیجه، سهم اوربیتال $\varphi_{ns}(\mathbf{r})$ در هر کدام از آنها باید یکسان باشد

$$a = a' = a'' \quad (۱۹)$$

همیشه امکان دارد محورها را طوری انتخاب کرد که اولین اوربیتال (۱۸-الف) حول صفحه xOz متقارن باشد. بنابراین می‌توانیم انتخاب کنیم

$$c = 0 \quad (۲۰)$$

با در نظر گرفتن اینکه سه اوربیتال (۱۸) یه‌نجار و متعامد باشند، شش رابطه به‌دست می‌آوریم که ما را قادر می‌سازند، شش ضریب a, b, b', b'', c' و c'' را تعیین کنیم. یک محاسبه ساده به‌دست می‌دهد

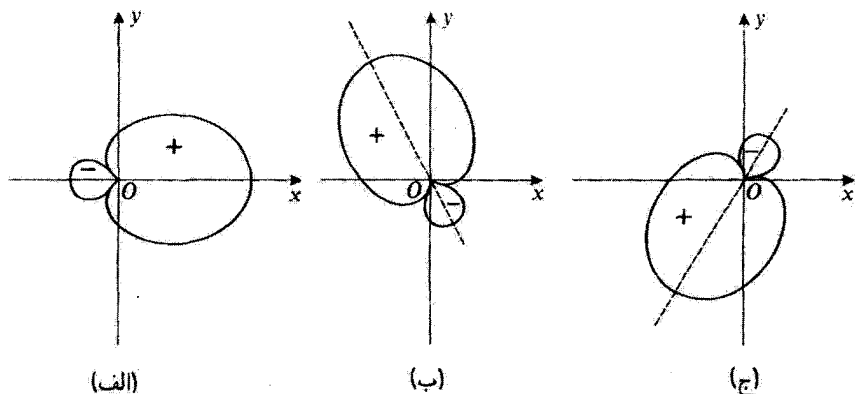
$$\begin{cases} \varphi_{n,s,p_x,p_y}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{3}}\varphi_{ns}(\mathbf{r}) + \sqrt{\frac{2}{3}}\varphi_{np_x}(\mathbf{r}) & (۲۱-الف) \\ \varphi'_{n,s,p_x,p_y}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{3}}\varphi_{ns}(\mathbf{r}) - \frac{1}{\sqrt{6}}\varphi_{np_x}(\mathbf{r}) + \frac{1}{\sqrt{2}}\varphi_{np_y}(\mathbf{r}) & (۲۱-ب) \\ \varphi''_{n,s,p_x,p_y}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{3}}\varphi_{ns}(\mathbf{r}) - \frac{1}{\sqrt{6}}\varphi_{np_x}(\mathbf{r}) - \frac{1}{\sqrt{2}}\varphi_{np_y}(\mathbf{r}) & (۲۱-ج) \end{cases}$$

بدین ترتیب، آنچه را که "هیبریدشدگی sp^2 " نامیده می‌شود تولید کرده‌ایم. سه اوربیتال هیبریدی (۲۱) و اوربیتال $\varphi_{np_x}(\mathbf{r})$ تشکیل یک پایهٔ راست‌هنجار جدید در فضای $\mathcal{E}_{ns} \otimes \mathcal{E}_{np}$ می‌دهند.

ب) خواص اوربیتالهای هیبریدی sp^2

از همان نمایش نموداری شکل ۶ استفاده خواهیم کرد.

اوربیتال $\varphi_{n,s,p_x,p_y}(\mathbf{r})$ نسبت به Ox تقارن استوانه‌ای دارد. شکل ۸ (الف) نمایشگر مقطع در صفحه xOy از سطحی است که بستگی زاویه‌ای این اوربیتال را به‌ازای r ثابت توصیف می‌کند. شکل منحنی به‌دست آمده کاملاً شبیه شکل ۶ (الف) است: اوربیتال در امتداد جهت مثبت محور Ox است.



شکل ۸ بستگی زاویه‌ای سه اوربیتال متعامد sp^2 اوربیتالهای φ_{n,s,p_x,p_y} ، φ'_{n,s,p_x,p_y} و φ''_{n,s,p_x,p_y} می‌توانند با دورانهایی به اندازه 120° حول Oz به یکدیگر تبدیل شوند.

با استفاده از عبارت (۴-ب) برای $\varphi_{np_x}(\mathbf{r})$ می‌توانیم به سهولت عمل عملگر $e^{-i\alpha L_z/\hbar}$ که سبب دورانی به اندازه α حول Oz می‌شود، را روی $|\varphi_{np_x}\rangle$ به دست آوریم

$$e^{-i\alpha L_z/\hbar} |\varphi_{np_x}\rangle = \cos \alpha |\varphi_{np_x}\rangle + \sin \alpha |\varphi_{np_y}\rangle \quad (22)$$

همچنین به وضوح داریم

$$e^{-i\alpha L_z/\hbar} |\varphi_{ns}\rangle = |\varphi_{ns}\rangle \quad (23)$$

بنابراین، فرمولهای (۲۱) نشان می‌دهند که

$$|\varphi'_{n,s,p_x,p_y}\rangle = e^{-2i(\pi/3)L_z/\hbar} |\varphi_{n,s,p_x,p_y}\rangle \quad (24\text{-الف})$$

$$|\varphi''_{n,s,p_x,p_y}\rangle = e^{2i(\pi/3)L_z/\hbar} |\varphi_{n,s,p_x,p_y}\rangle \quad (24\text{-ب})$$

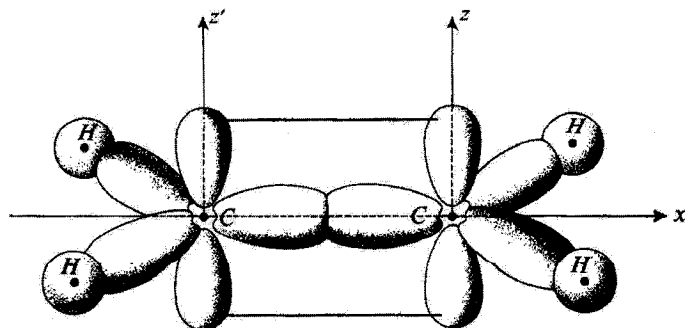
پس دو اوربیتال (۲۱-ب) و (۲۱-ج) را می‌توانیم با دورانهایی به اندازه زوایای $2\pi/3$ و $-2\pi/3$ حول Oz ، از اوربیتال (۲۱-الف) به دست آوریم. شکل‌های ۸ (الف) و ۸ (ج) نمایشگر مقطع در صفحه xOy از سطوحی هستند که بستگی زاویه‌ای این اوربیتالها را توصیف می‌کنند.

(ج) مثال: ساختار اتیلن

به مانند مولکول استیلن، هر کدام از دو اتم کربن مولکول اتیلن C_2H_4 دارای چهار الکترون ظرفیت (یک الکترون در زیرلایه $2s$ و سه الکترون در زیرلایه $2p$) هستند.

سه تا از این چهار الکترون اوربیتالهای هیبریدی sp^2 از نوع همانهایی که هم اکنون بررسی کردیم را اشغال می‌کنند. این الکترونها، همانهایی هستند که، برای هر اتم کربن، تشکیل پیوند با اتم کربن مجاور و دو اتم هیدروژن از گروه CH_2 می‌دهند. بنابراین، ملاحظه می‌کنیم چرا سه پیوند $C - C$ ، $C - H$ و $C - H$ که از یک اتم کربن منشعب می‌شوند، هم‌صفحه هستند و زوایای 120° با یکدیگر تشکیل می‌دهند (شکل ۹)، که در آن از همان نمایش نموداری مربوط به شکل‌های ۵ و ۷ استفاده کرده‌ایم را ببینید). الکترون یاقیمانده در هر اتم کربن اوربیتال $2p_z$ را اشغال می‌کند. اوربیتالهای $2p_z$ دو کربن یک همپوشی جانبی جزئی انجام می‌دهند که توسط خطوط توپر در شکل ۹ مشخص شده‌اند.

بنابراین، دو اتم کربن مولکول اتیلن با یک پیوند دوگانه متصل می‌شوند: یک پیوند که توسط دو اوربیتال هیبریدی از نوع sp^2 تشکیل می‌شود و نسبت به محور Ox اتصال‌دهندهٔ دو اتم کربن تقارن استوانه‌ای دارد (پیوند σ)، و یک پیوند که توسط دو اوربیتال $2p_z$ تشکیل می‌شود و نسبت به صفحه xOz تقارن دارد (پیوند π). این پیوند دوم است که مانع دوران یک گروه CH_2 نسبت به گروه دیگر می‌شود. اگر یکی از گروه‌های CH_2 نسبت به گروه دیگر، حول محور اتصال‌دهندهٔ دو کربن، دوران می‌کرد، دیگر محوره‌های دو اوربیتال $2p_z$ و $2p_z$ موازی نبودند. این از همپوشی جانبی آنها، و در نتیجه پایداری دستگاه می‌کاست. بدین ترتیب، ملاحظه می‌کنیم چرا شش اتم مولکول اتیلن در یک صفحه هستند.



شکل ۹. ساختار طرح‌واره‌ای مولکول اتیلن C_2H_4 . دو اتم کربن تشکیل یک پیوند دوگانه با یکدیگر می‌دهند: یک پیوند σ ناشی از اوربیتالهای sp^2 از نوع آنچه که در شکل ۸ نشان داده شده‌اند (دو اوربیتال هیبریدی دیگر sp^2 تحت 120° با این یکی تشکیل پیوندهای $C - H$ می‌دهند) و یک پیوند π ناشی از همپوشی اوربیتالهای p_z .

۵. هیبریدشدگی sp^3

الف) معرفی اوربیتالهای هیبریدی sp^3

اکنون از برهم‌نهی چهار اوربیتال $\varphi_{ns}(\mathbf{r})$ ، $\varphi_{np_x}(\mathbf{r})$ ، $\varphi_{np_y}(\mathbf{r})$ و $\varphi_{np_z}(\mathbf{r})$ چهار اوربیتال هیبریدی زیر را تشکیل می‌دهیم

$$\begin{cases} \varphi_{n,s,p_x,p_y,p_z}(\mathbf{r}) = a\varphi_{ns}(\mathbf{r}) + b\varphi_{np_x}(\mathbf{r}) + c\varphi_{np_y}(\mathbf{r}) + d\varphi_{np_z}(\mathbf{r}) & (۲۵-الف) \\ \varphi'_{n,s,p_x,p_y,p_z}(\mathbf{r}) = a'\varphi_{ns}(\mathbf{r}) + b'\varphi_{np_x}(\mathbf{r}) + c'\varphi_{np_y}(\mathbf{r}) + d'\varphi_{np_z}(\mathbf{r}) & (۲۵-ب) \\ \varphi''_{n,s,p_x,p_y,p_z}(\mathbf{r}) = a''\varphi_{ns}(\mathbf{r}) + b''\varphi_{np_x}(\mathbf{r}) + c''\varphi_{np_y}(\mathbf{r}) + d''\varphi_{np_z}(\mathbf{r}) & (۲۵-ج) \\ \varphi'''_{n,s,p_x,p_y,p_z}(\mathbf{r}) = a'''\varphi_{ns}(\mathbf{r}) + b'''\varphi_{np_x}(\mathbf{r}) + c'''\varphi_{np_y}(\mathbf{r}) + d'''\varphi_{np_z}(\mathbf{r}) & (۲۵-د) \end{cases}$$

مجدداً می‌خواهیم این چهار اوربیتال دارای یک شکل هندسی باشند، که می‌رساند که

$$a = a' = a'' = a''' \quad (۲۶)$$

می‌توانیم به‌طور اختیاری محور تقارن یکی از اوربیتالها، سپس صفحه شامل این محور و محور اوربیتال دوم را انتخاب کنیم. این باعث کاهش تعداد پارامترهای آزاد به 1° می‌شود: می‌توانیم آنها را با در نظر گرفتن اینکه چهار اوربیتال (۲۵) متعامد باشند پیدا کنیم.

در اینجا به ارائه یک مجموعه ممکن از این اوربیتالهای هیبریدی، که به‌صورت زیر تعریف می‌شوند، اکتفا می‌کنیم

$$\begin{cases} a = b = c = d = \frac{1}{4} \\ a' = -b' = -c' = d' = \frac{1}{4} \\ a'' = -b'' = c'' = -d'' = \frac{1}{4} \\ a''' = b''' = -c''' = -d''' = \frac{1}{4} \end{cases} \quad (۲۷)$$

که می‌توانیم به سهولت نشان دهیم که راست‌هنگار و با یک شکل هندسی هستند. تمام مجموعه‌های ممکن دیگر می‌توانند از روی این مجموعه با دوران به‌دست آیند.

بدین ترتیب، آنچه را که "هیبریدشدگی sp^3 " نامیده می‌شود ایجاد کرده‌ایم. چهار اوربیتال (۲۵) متناظر با ضرایب (۲۷) تشکیل یک پایه راست‌هنگار جدید در فضای $\mathcal{E}_{ns} \otimes \mathcal{E}_{np}$ می‌دهند.

ب) خواص اوربیتالهای هیبریدی sp^3

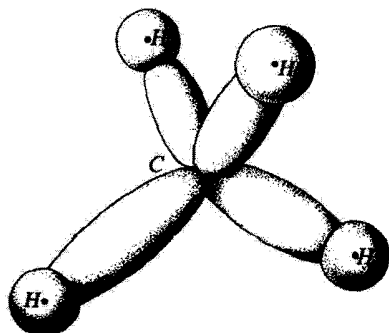
چهار اوربیتال ساخته شده در بخش ۵الف از لحاظ شکل شبیه اوربیتالهای مطالعه شده در بخشهای ۳ و ۴ همین مکمل هستند. آنها به ترتیب در راستای بردارهایی هستند که مؤلفه‌هایشان عبارتند از

$$\begin{cases} (1, 1, 1) \\ (-1, -1, 1) \\ (-1, 1, -1) \\ (1, -1, -1) \end{cases} \quad (28)$$

بنابراین، محورهای چهار اوربیتال sp^3 ، به مانند خطوط مستقیمی مرتب می‌شوند که مرکز یک چهاروجهی منظم را به چهار گوشهٔ این چهار وجهی متصل می‌کنند. زاویهٔ بین هر دو تا از این خطوط مستقیم برابر $109^\circ 28'$ است.

ج) مثال: ساختار متان

در مولکول متان CH_4 ، چهار الکترون ظرفیت اتم کربن، هر کدام یکی از چهار اوربیتال هیبریدی sp^3 که در بالا معرفی شدند را اشغال می‌کنند. این امر مستقیماً نشان می‌دهد که چرا چهار اتم هیدروژن، گوشه‌های یک چهاروجهی منظم به مرکز اتم کربن را تشکیل می‌دهند (شکل ۱۰).



شکل ۱۰ ساختار طرح‌واره‌ای مولکول متان. اوربیتالهای sp^3 پیوندهایی ایجاد می‌کنند که به مانند خطوط مستقیم ارتباط‌دهندهٔ مرکز چهاروجهی به چهار گوشهٔ آن (با زوایای $109^\circ 28'$) مرتب شده‌اند.

در مولکول اتان C_2H_6 ، یکی از اتمهای هیدروژن متان توسط یک گروه CH_3 جانشین می‌شود. بنابراین، دو اتم کربن با یک پیوند منفرد متصل می‌شوند، که توسط دو اوربیتال هیبریدی sp^3 که نسبت به خط واصل دو اتم کربن تقارن استوانه‌ای دارند، تشکیل می‌شود. عدم پیوند دوگانه عملاً دوران آزاد یک گروه CH_3 را نسبت به گروه دیگر اجازه می‌دهد.

مراجع برای مطالعه بیشتر

نمایشهای هندسی متنوع مدارها:

Levine (12.3), §6.6; Karplus and Porter (12.1), §3.10

مدارهای تلفیقی:

Karplus and Porter (12.1), §6.3; Alonso and Finn III (1.4), §5-5; Eyring et al (12.5), chap. XII, §12 b; Coulson (12.6), chap. VIII; Pauling (12.2), chap. III, §§13 and 14.

مکمل ۶

ترازهای ارتعاشی-دورانی مولکولهای دواتمی

۱. مقدمه

۲. جواب تقریبی معادله شعاعی

الف) حالت‌های با تکانه زاویه‌ای صفر ($l = 0$)

ب) مورد عمومی (l هر عدد صحیح مثبت)

ج) طیف ارتعاشی-دورانی

۳. محاسبه برخی از تصحیحات

الف) مطالعه دقیقتر شکل پتانسیل مؤثر $V_{\text{مؤثر}}(r)$

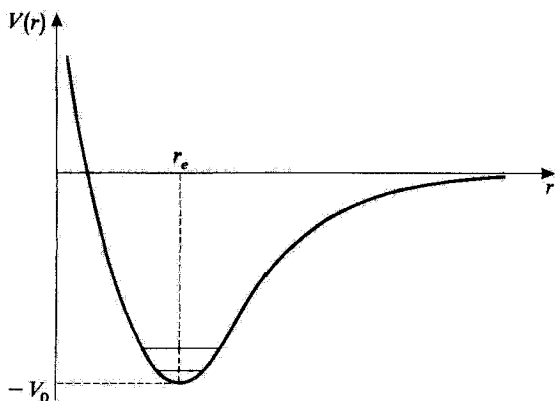
ب) ترازهای انرژی و تابع موجهای حالت‌های مانا

ج) تعبیر تصحیحات مختلف

۱. مقدمه

در این مکمل، از نتایج فصل ۷ در مطالعه مکانیک کوانتومی حالت‌های مانای دستگاه متشکل از دو هسته یک مولکول دواتمی استفاده خواهیم کرد. ما به‌طور همزمان تمام درجات آزادی دستگاه را به حساب خواهیم آورد: ارتعاش دو هسته حول مکان تعادلشان و دوران دستگاه حول مرکز جرمش. نشان خواهیم داد که نتایج به‌دست آمده در مکمل ۱ فصل ۵ و مکمل ۳ فصل ۶، که در آن هر بار یک درجه آزادی مورد نظر بود، در تقریب اول معتبر هستند. به‌علاوه، یک تعداد تصحیحات مربوط به "اعوجاج مرکزگریزی" مولکول و جفتیدگی ارتعاشی-دورانی را محاسبه و تعبیر می‌کنیم. در بخش ۱-الف از مکمل ۱ فصل ۵ (تقریب بورن-اوپنهایمر) دیدیم که انرژی پتانسیل $V(r)$ برهم‌کنش بین دو هسته فقط به فاصله r بین آنها بستگی دارد و به‌صورتی است که در شکل ۱ نشان داده شده است: $V(r)$ در فواصل زیاد جاذبه و در فواصل کم دافعه است، و در $r = r_e$ دارای یک مینیموم به عمق V_0 است. به‌فرض m_1 و m_2 جرمهای دو هسته باشند. چون $V(r)$ فقط بستگی به r دارد، می‌توانیم برطبق بخش ۷-۲، حرکت مرکز جرم (یک ذره آزاد به جرم $M = m_1 + m_2$) و حرکت نسبی در چارچوب مرجع مرکز جرم، که هم‌ارز حرکت نسبی یک ذره فرضی به جرم

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (1)$$



شکل ۱ تغییر انرژی پتانسیل برهم‌کنش $V(r)$ بین هسته‌های یک مولکول دواتمی برحسب فاصله r بین آنها، $V(r)$ مقدار مینیموم $-V_0$ خود را در $r = r_e$ می‌گیرد. اولین حالت‌های ارتعاشی با خطوط افقی از چاه پتانسیل نمایش داده شده‌اند.

واقع در پتانسیل $V(r)$ شکل ۱ است، را به‌طور مجزا مطالعه کنیم. اگر فقط به حرکت نسبی توجه داشته باشیم، حالت‌های مانای دستگاه، برطبق نتایج بخش ۷-۱، توسط تابع موجهای زیر توصیف می‌شوند

$$\varphi_{v,l,m}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r} u_{v,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (2)$$

که انرژیهای $E_{v,l}$ و توابع شعاعی $u_{v,l}(r)$ متناظر توسط معادله زیر داده می‌شوند

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] u_{v,l}(r) = E_{v,l} u_{v,l}(r) \quad (3)$$

یادداشت:

به بیان دقیق، به‌طور صریح در تمام این مکمل (مانند مکمل ۱ فصل ۵ و مکمل ۳ فصل ۶) فرض خواهیم کرد که تصویر تکانه زاویه‌ای مداری کل الکترونها روی محور بین هسته‌ای، به مانند اسپین کل آنها صفر است. پس تکانه زاویه‌ای کل فقط از دوران دو هسته ناشی می‌شود. این وضعیت، واقعاً در تمام مولکولهای دواتمی در حالت پایه پیدا می‌شود. در حالت کلی، جمله‌هایی نیز در انرژی برهم‌کنش هسته‌ای ظاهر می‌شوند که منحصراً به فاصله r بستگی ندارند. ■

۲. جواب تقریبی معادله شعاعی

معادله شعاعی همان شکل مطالعه ویژه مقادیرهای هامیلتونی مسئله یک بعدی را دارد که در آن ذره‌ای به جرم μ در پتانسیل مؤثر زیر قرار داده می‌شود

$$V_{\text{مؤثر}}(r) = V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \quad (۴)$$

الف) حالت‌های با تکانه زاویه‌ای صفر ($l = 0$)

به ازای $l = 0$ ، "پتانسیل مرکزگریزی"، $l(l+1)\hbar^2/2\mu r^2$ صفر است و در نتیجه $V_{\text{مؤثر}}(r)$ به همان صورت $V(r)$ است. در مجاورت مینیموم در $r = r_e$ ، $V(r)$ را می‌توان برحسب توانهای $r - r_e$ بسط داد

$$V(r) = -V_0 + f(r - r_e)^2 - g(r - r_e)^3 + \dots \quad (۵)$$

f و g مثبت‌اند چون $r = r_e$ یک مینیموم است و پتانسیل برای $r < r_e$ سریعتر از $r > r_e$ افزایش می‌یابد.

با صرفنظر از جمله مربوط به $(r - r_e)^3$ و جمله‌های با مرتبه بالاتر شروع می‌کنیم. بنابراین، پتانسیل کاملاً سهموی است، و ویژه حالتها و ویژه مقادیر هامیلتونی را می‌دانیم. اگر قرار دهیم

$$\omega = \sqrt{\frac{2f}{\mu}} \quad (۶)$$

ترازهایی به دست می‌آوریم که انرژی آنها عبارت‌اند از

$$E_{v,0} = -V_0 + \left(v + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad (۷)$$

$(v = 0, 1, 2, \dots)$

با تابع موجهای وابسته (فصل ۵، مکمل ۲)

$$u_v(r) = \left(\frac{\beta^r}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^v v!}} e^{-\beta^r(r-r_e)^{1/r}} H_v[\beta(r-r_e)] \quad (۸)$$

با

$$\beta = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}} \quad (9)$$

(H_0 یک چندجمله‌ای هرمیت است). در شکل ۱ دو تراز اول انرژی را با خطوط افقی نشان داده‌ایم. طول این خطوط برداشتی از گستردگی $(\Delta r)_0$ تابع موجهای متناظر به این حالتها را می‌دهد. یادآوری می‌کنیم [فصل پنجم، فرمول (۵-۹۷الف)] که

$$(\Delta r)_0 \simeq \sqrt{\left(v + \frac{1}{4}\right)} \frac{\hbar}{\mu\omega} \quad (10)$$

برای اینکه محاسبه بالا معتبر باشد. لازم است، در ناحیه‌ای به پهنای (Δr) حول $r = r_e$ جمله مربوط به $(r - r_e)^2$ در (۵) همیشه در مقابل جمله مربوط به $(r - r_e)^3$ قابل صرفنظر باشد. بنابراین باید داشته باشیم

$$f \gg g(\Delta r)_0 = g(\Delta r)_0 \sqrt{v + \frac{1}{4}} \quad (11)$$

که $(\Delta r)_0$ گستردگی حالت پایه است

$$(\Delta r)_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}} \quad (12)$$

این، به‌ویژه، ایجاب می‌کند که

$$f \gg g(\Delta r)_0 \quad (13)$$

شرط (۱۳) همیشه در عمل برقرار است. از این پس فرض می‌کنیم اعداد کوانتومی v به‌قدر کافی کوچک هستند به‌طوری که (۱۱) هم برقرار است.

یادداشت:

بسط (۵) به‌وضوح در $r = 0$ که $V(r)$ نامتناهی است معتبر نیست. استدلال بالا به‌طور ضمنی فرض می‌کند که

$$(\Delta r)_0 \ll r_e \quad (14)$$

در این مورد، تابع موجهای (۸) عملاً در مبدأ صفر می‌شوند و تقریباً با جوابهای دقیق معادله شعاعی (۳)، که باید در $r = 0$ دقیقاً صفر شوند یکسان می‌گردند (بخش ۷-۱-۲). ■

(ب) مورد عمومی (l هر عدد صحیح مثبت)

۱. محاسبه اثر پتانسیل مرکزگریزی

در $r = r_e$ ، پتانسیل مرکزگریزی برابر است

$$\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_e^2} = Bh l(l+1) \quad (15)$$

که

$$B = \frac{\hbar}{4\pi\mu r_e^2} \quad (16)$$

ثابت دورانی معرفی شده در مکمل ۳ فصل ۶ است. ما در آن مکمل متذکر شده‌ایم (بخش ۴-الف-۲) که انرژی $2B\hbar^2$ (فاصله بین دو خط مجاور از طیف دورانی محض) همیشه بسیار کمتر از $\hbar\omega$ (کوانتوم ارتعاشی) است

$$2B\hbar \ll \hbar\omega \quad (17)$$

ما در اینجا فقط اعداد کوانتومی دورانی l به قدر کافی کوچک را در نظر می‌گیریم به طوری که

$$Bh l(l+1) \ll \hbar\omega \quad (18)$$

در محدوده پهنای کوچک Δr حول $r = r_e$ تغییر پتانسیل مرکزگریزی از مرتبه زیر است

$$\frac{l(l+1)\hbar^2}{\mu r_e^2} \Delta r = 2Bh l(l+1) \frac{\Delta r}{r_e} \quad (19)$$

و تغییر پتانسیل $V(r)$ تقریباً برابر است با

$$f(\Delta r)^2 = \frac{1}{4}\mu\omega^2(\Delta r)^2 = \frac{1}{4}\hbar\omega \frac{(\Delta r)^2}{(\Delta r)_0^2} \quad (20)$$

که در آن از (۱۲) استفاده کرده‌ایم. از بخش ۲-الف می‌دانیم که گسترده‌گی Δr تابع موجهایی که در نظر خواهیم گرفت نسبت به r_e قابل صرفنظر است، ولی مسلماً حداقل از مرتبه 0 (Δr) است. در نتیجه، در ناحیه‌ای از فضا که در آن تابع موجها دامنه‌های قابل ملاحظه‌ای دارند، تغییر (۱۹) پتانسیل مرکزگریزی، برطبق (۱۸) بسیار کوچکتر از تغییر $V(r)$ (۲۰) است. بنابراین می‌توانیم، در تقریب اول پتانسیل مرکزگریزی در معادله (۴) را توسط مقدارش (۱۵) در $r = r_e$ جانشین کنیم که برای پتانسیل مؤثر می‌دهد

$$V_{\text{مؤثر}}(r) \simeq V(r) + Bh l(l+1) \quad (21)$$

۲. ترازهای انرژی و تابع موجهای مانا

با استفاده از (۲۱) و صرفنظر کردن از عبارتهای مرتبه بالاتر از دو در بسط (۵)، می‌توانیم معادله شعاعی (۳) را به شکل زیر بنویسیم

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{4} \mu \omega^2 (r - r_e)^2 \right] u_{v,l}(r) = [E_{v,l} + V_0 - Bh l(l+1)] u_{v,l}(r) \quad (22)$$

که کاملاً شبیه معادله ویژه مقدار نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی است

از اینجا، بلافاصله نتیجه می‌گیریم که عبارت داخل کروشه در طرف راست باید برابر $(v+1/2)\hbar\omega$ باشد که $v = 0, 1, 2, \dots$ که انرژیهای ممکن $E_{v,l}$ مولکول را می‌دهد

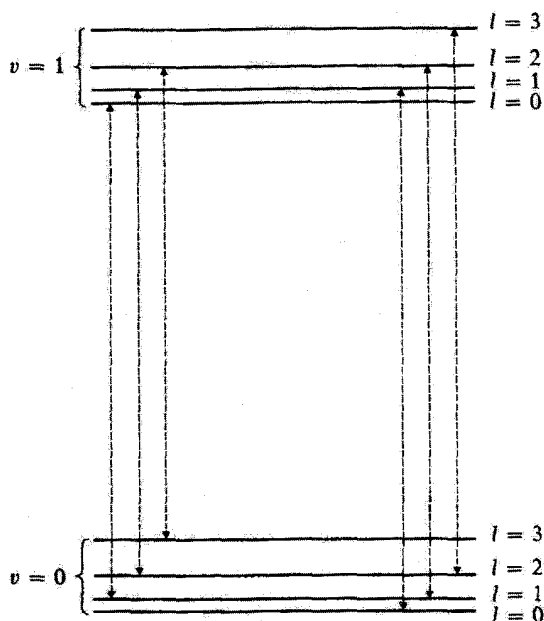
$$E_{v,l} = -V_0 + \left(v + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega + Bh l(l+1) \quad (23)$$

با

$$\begin{cases} v = 0, 1, 2, \dots \\ l = 0, 1, 2, \dots \end{cases}$$

راجع به توابع شعاعی، آنها بستگی به l ندارند، زیرا عملگر دیفرانسیلی در طرف چپ (۲۲) به l بستگی ندارد. در نتیجه، داریم

$$u_{v,l}(r) = u_v(r) \quad (24)$$



شکل ۲ نمودار نشاندهنده دو تراز ارتعاشی اول ($v = 1$ و $v = 0$) یک مولکول دواتمی و ساختار دورانی آنها. با تقریبی، این ساختار دورانی برای ترازهای ارتعاشی مختلف یکسان است. برای یک مولکول ناهمقطب گذارهای نشان داده شده توسط بیگانه‌های عمودی در شکل، خطوط طیف ارتعاشی-دورانی مولکول را نمایش می‌دهند. این خطوط در ناحیه فروسرخ می‌افتند. این گذارها از قاعده گزینش $\Delta l = l' - l = \pm 1$ پیروی می‌کنند.

که $u_v(r)$ در (۸) داده شده بود. پس عبارت (۲) برای تابع موجهای حالت‌های مانا را می‌توان، در این تقریب به صورت زیر نوشت

$$\varphi_{v,l,m}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r} u_v(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (25)$$

بنابراین، بدین ترتیب می‌بینیم که انرژیهای حالت‌های مانا عبارت‌اند از مجموع انرژیهای محاسبه شده در مکملهای ۱ فصل ۵ و ۳ فصل ۶، که در آنها هر بار فقط یک درجه آزادی (ارتعاشی یا دورانی) به حساب آمده بود. به علاوه، تابع موجهای با تقریب عامل $1/r$ عبارت‌اند از حاصلضرب تابع موجهایی که در این دو مکمل به دست آمدند

شکل ۲ دو تراز اول ارتعاشی $v = 1$ و $v = 0$ را، با ساختار دورانی آنها، مربوط به جمله $Bh l(l+1)$ ، نشان می‌دهد.

ج) طیف ارتعاشی-دورانی

ما فقط طیف جذبی یا گسیلی فروسرخ را مطالعه می‌کنیم، از این رو فرض می‌شود مولکول ناهمقرب باشد [وقتی با مولکولهای همقرب و اثر رامن سروکار داریم، محاسباتی شبیه به محاسبات ارائه شده در بخش ۱-ج-۲ از مکمل ۱ فصل ۵ و بخش ۴-ب از مکمل ۳ فصل ۶، می‌توانند انجام شوند].

۱. قواعد گزینش

متذکر می‌شویم که گشتاور دوقطبی $D(r)$ مولکول در راستای خط واصل دو هسته است و می‌توان آن را برحسب توانهای $(r - r_e)$ حول r_e بسط داد

$$D(r) = d_0 + d_1(r - r_e) + \dots \quad (26)$$

تصور این گشتاور دوقطبی روی Oz برابر است با $D(r) \cos \theta$ (که θ زاویه بین محور مولکول و Oz است).

می‌خواهیم طیف بسامدی امواج الکترومغناطیسی قطبیده در امتداد Oz را، که مولکول می‌تواند به علت تغییر دوقطبی الکتریکی‌اش جذب یا گسیل کند تعیین کنیم. همان‌طور که قبلاً چندین بار انجام داده‌ایم، بسامدهای بوری را جستجو می‌کنیم که می‌توانند در تحول زمانی مقدار میانگین $D(r) \cos \theta$ ظاهر شوند. پس آنچه باید انجام دهیم، یافتن آن است که برای چه مقادیری از (m', l', v') و (m, l, v) عنصر ماتریسی

$$\langle \varphi_{v', l', m'} | D(r) \cos \theta | \varphi_{v, l, m} \rangle \\ = \int r^2 dr d\Omega \varphi_{v', l', m'}^*(r, \theta, \varphi) D(r) \cos \theta \varphi_{v, l, m}(r, \theta, \varphi) \quad (27)$$

مخالف صفر است. با استفاده از عبارت (۲۵) برای تابع موجها، این عنصر ماتریسی را به شکل زیر می‌نویسیم

$$\left[\int_0^\infty dr u_{v'}^*(r) D(r) u_v(r) \right] \times \left[\int d\Omega Y_{l', m'}^*(\theta, \varphi) \cos \theta Y_l^m(\theta, \varphi) \right] \quad (28)$$

بنابراین، بدین ترتیب حاصلضرب از دو انتگرال به دست می‌آوریم که قبلاً در مکملهای ۱ فصل ۵ و ۳ فصل ۶ بررسی شده‌اند. انتگرال دوم فقط وقتی مخالف صفر است که

$$l' - l = +1, -1 \quad (29)$$

راجع به انتگرال اول، اگر به جمله‌های d_0 و d_1 از (۲۶) اکتفا کنیم، آن فقط وقتی مخالف صفر است که

$$v' - v = 0, +1, -1 \quad (30)$$

مجموعه خطوط متناظر با $v - v' = 0$ تشکیل طیف دورانی محض می‌دهد که در مکمل فصل ۶ مطالعه شد (شدت آن متناسب با d_0^2 است). راجع به خطوط $v' - v = \pm 1$ و $l' - l = \pm 1$ با شدت متناسب با d_1^2 ، آنها تشکیل یک طیف ارتعاشی-دورانی می‌دهند که اکنون به اختصار توضیح می‌دهیم.

یادداشت:

قاعده گزینش $l' - l = \pm 1$ از بستگی زاویه‌ای تابع موجها ناشی می‌شود. بنابراین مستقل از تقریب به‌کار رفته برای حل معادله شعاعی (۳) است، در حالی که (۳۰) فقط در تقریب هماهنگ معتبر است. ■

۲. شکل طیف

فرض کنید از دو عدد کوانتومی ارتعاشی مورد نظر v' عدد بزرگتر باشد ($v' = v + 1$). خطوط ارتعاشی-دورانی را می‌توان به دو گروه تقسیم کرد:

— خطوط $v' = v + 1$ و $l' = l + 1$ و $v \leftrightarrow l$ با بسامدهای

$$\frac{\omega}{2\pi} + B(l+1)(l+2) - Bl(l+1) = \frac{\omega}{2\pi} + 2B(l+1) \quad (31)$$

با $l' = 0, 1, 2, \dots$

(این خطوط متناظر با گذارهایی هستند که با پیکان در طرف راست شکل ۲ نشان داده شده‌اند)

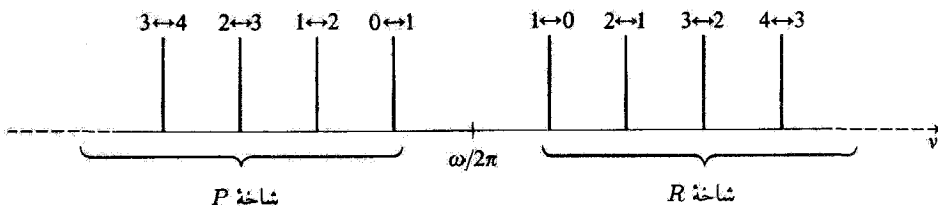
— خطوط $v' = v + 1$ و $l' = l - 1$ و $v \leftrightarrow l$ با بسامدهای

$$\frac{\omega}{2\pi} + Bl'(l'+1) - B(l'+1)(l'+2) = \frac{\omega}{2\pi} - 2B(l'+1) \quad (32)$$

با $l' = 0, 1, 2, \dots$

(گذارهایی که با پیکان در طرف چپ شکل ۲ نشان داده شده‌اند).

بنابراین، طیف ارتعاشی-دورانی به صورتی است که در شکل ۳ نشان داده شده است. این طیف شامل دو گروه خطوط هم فاصله است، که نسبت به بسامد ارتعاشی $\omega/2\pi$ متقارن هستند. تمام این خطوط با هم تشکیل یک "نوار" می‌دهند. گروه خطوط متناظر با بسامدهای (۳۱) را



شکل ۳ طیف ارتعاشی-دورانی برای یک مولکول ناهمقطب. چون گذارهای بین ترازهای شکل ۲ با یک مقدار l بنابر قواعد گزینش ممنوع است، هیچ خطی دارای بسامد ارتعاشی محض $\omega/2\pi$ نیست. گذارهایی که در آنها مولکول از تراز (v', l') به تراز $(v = v' - 1, l = l' - 1)$ می‌رود متناظر با بسامدهای $\omega/2\pi + 2B(l + 1)$ هستند (خطوط "شاخه R"). گذارهایی که در آنها مولکول از تراز (v', l') به تراز $v = v' - 1$ و $l = l' + 1$ می‌رود متناظر با بسامدهای $\omega/2\pi - 2B(l' + 1)$ هستند (خطوط "شاخه P"). در این شکل، خطوط مختلف با $l \leftrightarrow l'$ مشخص شده‌اند.

"شاخه R"، و گروه متناظر با بسامدهای (۳۲) را، "شاخه P" گویند. در هر شاخه، فاصله بین دو خط مجاور برابر $2B$ است. بازه مرکزی مجزاکننده دو شاخه به پهنای $4B$ است: در بسامد ارتعاشی محض $\omega/2\pi$ وجود ندارد (اغلب گفته می‌شود یک "خط گمشده" در طیف وجود دارد).

یادداشت:

بنابراین، طیف "ارتعاشی محض" که در مکمل ۱ فصل ۵ مطالعه شد و از یک خط منفرد در $\omega/2\pi$ ترکیب یافته است در عمل وجود ندارد. فقط وقتی از یک وسیله طیف‌نمایشی با توان تفکیک کم استفاده کنیم می‌توانیم از ساختار دورانی خط ارتعاشی-دورانی صرفنظر کنیم و نوار شکل ۳ را به مانند یک خط منفرد به مرکز $\omega/2\pi$ در نظر بگیریم توجه کنید که $(\omega/2\pi \gg 2B)$.

۳. محاسبه برخی از تصحیحات

محاسبات بخش قبل بر پایه تقریبی استوار است که شامل جانشینی پتانسیل مرکزگریزی توسط مقدارش در $r = r_e$ در معادله شعاعی است. آنگاه پتانسیل مؤثر $V_{\text{eff}}(r)$ می‌تواند از $V(r)$ با یک انتقال عمودی ساده به دست آید [فرمول (۲۱)].

در این بخش، تصحیحاتی را مطالعه خواهیم کرد که باید روی نتایج بخش ۲ صورت گیرند تا بتوان تغییر کند پتانسیل مرکزگریزی را حول $r = r_e$ به حساب آورد. برای این منظور، از بسط آن

برحسب توانهای $(r - r_e)$ استفاده خواهیم کرد

$$\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_e^2} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{\mu r_e^3}(r - r_e) + \frac{3l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_e^4}(r - r_e)^2 + \dots \quad (۳۳)$$

الف) مطالعه دقیقتر شکل پتانسیل مؤثر $V_{\text{مؤثر}}(r)$

اگر از (۵) و (۳۳) استفاده کنیم، بسط پتانسیل مؤثر (۴) در مجاورت $r = r_e$ را می‌توانیم به صورت زیر بنویسیم

$$V_{\text{مؤثر}}(r) = -V_0 + f(r - r_e) - g(r - r_e)^2 + \dots + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_e^2} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{\mu r_e^3}(r - r_e) + \frac{3l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_e^4}(r - r_e)^2 + \dots \quad (۳۴)$$

خواهیم دید که تغییر پتانسیل مرکزگریزی در مجاورت $r = r_e$ برای l مخالف صفر، اثرات زیر را ایجاد می‌کند:

۱. مکان \bar{r}_e مینیموم $V_{\text{مؤثر}}(r)$ دقیقاً بر r_e منطبق نیست.
۲. مقدار $V_{\text{مؤثر}}(\bar{r}_e)$ این مینیموم به‌طور جزئی متفاوت از $-V_0 + Bh l(l+1)$ است.
۳. انحنای $V_{\text{مؤثر}}(r)$ در $r = \bar{r}_e$ [که به مانند فرمول (۶)، بسامد زاویه‌ای نوسانگر هماهنگ معادل را تعیین می‌کند] دیگر دقیقاً توسط ضریب f داده نمی‌شود.

این اثرات مختلف را با استفاده از (۳۴) محاسبه خواهیم کرد. تا جایی که به دو اثر اول مربوط می‌شود، می‌توانیم از جمله‌های مرتبه بالاتر از ۲ در $V(r)$ و جمله‌های مرتبه بالاتر از ۱ در پتانسیل مرکزگریزی صرف‌نظر کنیم، چون فاصله $\bar{r}_e - r_e$ که پیدا خواهیم کرد بسیار کوچک است [حتی نسبت به (Δr) کوچک خواهد بود]. در واقع، قادر خواهیم بود از تجربه تحقیق کنیم که

$$g(\bar{r}_e - r_e) \ll f \quad (\text{الف-۳۵})$$

$$\frac{3l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_e^4}(\bar{r}_e - r_e) \ll \frac{l(l+1)\hbar^2}{\mu r_e^3} \quad (\text{ب-۳۵})$$

۱. مکان و مقدار مینیموم $V_{\text{مؤثر}}(r)$
- اگر در بسط (۳۴) فقط دو جمله اول $V(r)$ و دو جمله اول پتانسیل مرکزگریزی را حفظ کنیم، \bar{r}_e

توسط رابطه زیر داده می‌شود

$$\sqrt{f}(\bar{r}_e - r_e) \simeq \frac{l(l+1)\hbar^2}{\mu r_e^3} \quad (36)$$

یعنی

$$\bar{r}_e - r_e \simeq \frac{l(l+1)\hbar^2}{\sqrt{f}\mu r_e^3} = \frac{Bh l(l+1)}{f r_e} \quad (37)$$

برطبق (۶) و (۱۲)، داریم

$$\frac{\bar{r}_e - r_e}{(\Delta r)_0} \simeq \frac{\sqrt{f} Bh l(l+1) (\Delta r)_0}{\hbar \omega r_e} \ll 1 \quad (38)$$

که با احتساب (۱۳) و (۱۴)، (۳۵-الف) و (۳۵-ب) را اثبات می‌کند.
با جاگذاری این مقدار \bar{r}_e در بسط $V_{\text{موت}}(r)$ داریم

$$V_{\text{موت}}(\bar{r}_e) \simeq -V_0 + Bh l(l+1) - Gh[l(l+1)]^2 \quad (39)$$

با

$$G = \frac{\hbar^2}{8\pi\mu^2 r_e^3 f} \quad (40)$$

۲. انحنای $V_{\text{موت}}(r)$ در مینیموم آن
بنابراین، در مجاورت $r = \bar{r}_e$ می‌توانیم $V_{\text{موت}}(r)$ را به شکل زیر بنویسیم

$$V_{\text{موت}}(r) = V_{\text{موت}}(\bar{r}_e) + f'(r - \bar{r}_e)^2 - g'(r - \bar{r}_e)^3 + \dots \quad (41)$$

ضریب f' به انحنای $V_{\text{موت}}(r)$ در $r = \bar{r}_e$ مربوط است

$$f' = \frac{1}{2} \left[\frac{d^2}{dr^2} V_{\text{موت}}(r) \right]_{r=\bar{r}_e} \quad (42)$$

برای محاسبه تفاوت بین f' و f باید جمله برحسب $(r - r_e)^2$ از $V(r)$ را در بسط (۳۴)، و در نتیجه، جمله برحسب $(r - r_e)^2$ از پتانسیل مرکزگریزی را به حساب آوریم. آنگاه، یک محاسبه ساده، با استفاده از (۳۷)، می دهد

$$2f' \simeq 2f + \frac{3l(l+1)\hbar^2}{\mu r_e^2} - \frac{3gl(l+1)\hbar^2}{\mu r_e^2 f} \quad (43)$$

بنابراین، بسامد زاویه‌ای ω ی (۶) باید توسط مقدار زیر جانشین شود

$$\omega' = \sqrt{\frac{2f'}{\mu}} \quad (44)$$

با بسط ریشه دوم، به سهولت خواهیم داشت

$$\omega' = \omega - 2\pi\alpha_e l(l+1) \quad (45)$$

با

$$\alpha_e = \frac{3\hbar^2\omega}{\lambda\pi\mu r_e^2 f} \left[\frac{g}{f} - \frac{1}{r_e} \right] \quad (46)$$

می توانیم محاسبه مشابهی برای تعیین g' انجام دهیم. در واقع، چون جمله برحسب $(r - \bar{r}_e)^2$ از (۴۱) فقط یک تصحیح کوچک در نتایج به دست آمده از دو جمله اول اضافه می کند، ما از تغییر $d^2 V_{\text{مزر}}(r)/dr^2$ وقتی \bar{r}_e را به جای r_e می گذاریم، صرف نظر می کنیم و قرار می دهیم $g' \simeq g$. در نتیجه، می توانیم $V_{\text{مزر}}(r)$ را در مجاورت مینیموم آن، به شکل زیر بنویسیم

$$V_{\text{مزر}}(r) \simeq V_{\text{مزر}}(\bar{r}_e) + \frac{1}{2}\mu\omega'^2(r - \bar{r}_e)^2 - g(r - \bar{r}_e)^3 \quad (47)$$

که $V_{\text{مزر}}(\bar{r}_e)$ ، ω' و \bar{r}_e توسط (۳۷)، (۳۹)، و (۴۵) داده می شوند.

ب) ترازهای انرژی و تابع موجهای حالتهای مانا.

با استفاده از عبارت (۴۷) برای $V_{\text{مزر}}(r)$ ، تابع شعاعی می شود

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{2}\mu\omega'^2(r - \bar{r}_e)^2 - g(r - \bar{r}_e)^3 \right] u_{v,l}(r) = [E_{v,l} - V_{\text{مزر}}(\bar{r}_e)] u_{v,l}(r) \quad (48)$$

اگر، به مانند بخش ۲ از جمله برحسب $g(r - \bar{r}_e)^2$ صرفنظر کنیم، معادله ویژه مقدار نوسانگر هماهنگ یک بعدی با بسامد زاویه‌ای ω' را به دست می‌آوریم که مکان تعادل آن $r = \bar{r}_e$ است. از این رو، نتیجه می‌گیریم که تنها مقادیر ممکن عبارت داخل کروشه طرف راست عبارت‌اند از $\omega'(v + 1/2)$ با $v = 0, 1, 2, \dots$. بنابراین، برطبق (۳۹) داریم

$$E_{v,l} = -V_0 + \left(v + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega' + B h l(l+1) - G h [l(l+1)]^2 \quad (49)$$

راجع به تابع موجهای حالت‌های ما، آنها به همان صورت (۲۵) هستند. تمام آنچه که احتیاج داریم در بسط (۸) برای تابع شعاعی انجام دهیم، جانشینی r_e توسط \bar{r}_e و β توسط مقدار زیر است

$$\beta' = \sqrt{\frac{\mu \omega'}{\hbar}} \quad (50)$$

ما جمله برحسب $g(r - r_e)^2$ را در محاسبه بسامد زاویه‌ای جدید ω' به حساب آورده‌ایم. برای اینکه این محاسبه سازگار باشد، لازم است تصحیحات در ویژه‌مقدارها و ویژه‌تابعهای معادله شعاعی ناشی از حضور این جمله در طرف راست (۴۸) را به دست آوریم. این کار را در مکمل ۱ فصل ۱۱ با استفاده از نظریه اختلال انجام خواهیم داد. در اینجا، به بیان نتیجه مربوط به ویژه‌مقدارها اکتفا می‌کنیم؛ باید به جمله (۴۹) برای انرژی، جمله زیر را اضافه کنیم

$$\xi \hbar \omega' \left(v + \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{v}{\rho_0} \xi \hbar \omega' \quad (51)$$

که

$$\xi = -\frac{15}{4} \frac{g^2 \hbar}{\mu^2 \omega'^5} \quad (52)$$

یک کمیت بدون بُعد بسیار کوچکتر از ۱ است (از این رو می‌توان به جای ω' در این جمله تصحیحی ω را گذاشت).

ج) تعبیر تصحیحات مختلف

۱. اعوجاج مرکزگرایی مولکول

بحث بخش ۳-الف-۱ نشان می‌دهد که فاصله بین دو هسته، وقتی مولکول می‌چرخد، افزایش

می‌یابد. برطبق (۳۷)، این افزایش در فاصلهٔ وقتی $l(l+1)$ بزرگتر می‌شود، یعنی وقتی مولکول سریعتر می‌چرخد، زیادتر می‌شود. این کاملاً قابل درک است: از دیدگاه کلاسیک، می‌توان گفت که "نیروی مرکزگری" تمایل به جدا کردن دو هسته دارد تا اینکه توسط نیروی بازگرداننده $2f(\bar{r}_e - r_e)$ مربوط به پتانسیل $V(r)$ موازنه شود.

بنابراین، مولکول در واقع یک "چرخندهٔ صلب" نیست. تغییر $(\bar{r}_e - r_e)$ مربوط به فاصلهٔ میانگین بین هسته‌ها ایجاد یک افزایش در گشتاور لختی مولکول، و در نتیجه، یک کاهش (با تکانهٔ زاویه‌ای ثابت) در انرژی دورانی می‌کند. این کاهش فقط به‌طور جزئی توسط افزایش در انرژی پتانسیل $V(\bar{r}_e) - V(r_e)$ جبران می‌شود. این منشأ فیزیکی تصحیح انرژی، $^2 Gh l^2 (l+1)$ در (۴۹) است. این تصحیح، که علامت آن منفی است، با l بسیار سریعتر از انرژی دورانی $Bh l(l+1)$ افزایش می‌یابد. این را می‌توان به‌طور تجربی مشاهده کرد: خطوط طیف دورانی محض دقیقاً هم‌فاصله نیستند؛ وقتی l افزایش می‌یابد، فاصلهٔ خطوط کاهش می‌یابد.

۲. جفتیدگی ارتعاشی-دورانی

جملات دوم و سوم (۴۹) را دست‌بندی می‌کنیم و ω' را از عبارت (۴۵) جاگذاری می‌کنیم. به‌دست می‌آوریم

$$\left(v + \frac{1}{4}\right) \hbar \omega' + Bh l(l+1) = \left(v + \frac{1}{4}\right) \hbar \omega + Bh l(l+1) - \alpha_e h l(l+1) \left(v + \frac{1}{4}\right) \quad (53)$$

دو جملهٔ اول طرف راست (۵۳) عبارت‌اند از انرژیهای ارتعاشی و دورانی که در مکملهای ۱ فصل ۵ و ۳ فصل ۶ محاسبه شده‌اند. جملهٔ سوم، که به دو عدد کوانتومی v و l بستگی دارد، بیانگر اثرات جفتیدگی درجات آزادی ارتعاشی و دورانی است.

می‌توان (۵۳) را به شکل زیر نوشت

$$\left(v + \frac{1}{4}\right) \hbar \omega + B_v h l(l+1) \quad (54)$$

با

$$B_v = B - \alpha_e \left(v + \frac{1}{4}\right) \quad (55)$$

این طور به نظر می رسد که گویی هر تراز ارتعاشی دارای یک ثابت دورانی مؤثر B_v است که به v بستگی دارد.

برای توضیح این جفتیدگی ارتعاش و دوران مولکول، به طور کلاسیک استدلال خواهیم کرد. ثابت ارتعاشی B متناسب با $1/r^2$ است [فرمول (۱۶)]. وقتی مولکول ارتعاش می کند، r و در نتیجه B نیز تغییر می کند. چون بسامدهای ارتعاشی بسیار بزرگتر از بسامدهای دورانی هستند، می توانیم یک ثابت دورانی مؤثر برای مولکول در یک حالت ارتعاشی معینی تعریف کنیم: این ثابت میانگین B روی یک بازه زمانی که بسیار بزرگتر از دوره ارتعاشی است خواهد بود. بنابراین، باید متوسط زمانی $1/r^2$ را در حالت ارتعاشی مورد نظر به حساب آوریم.

به این طریق، می توانیم دو جمله با علامت مخالف را که در عبارت α_e (۴۶) ظاهر می شوند تعبیر کنیم. اولین جمله، که متناسب با g است، مربوط به ناهماهنگ بودن پتانسیل $V(r)$ است که با دامنه ارتعاش افزایش می یابد. (یعنی، در واقع با v). با توجه به صورت نامتقارن $V(r)$ (شکل ۱)، مولکول در ناحیه $r > r_e$ "وقت بیشتری صرف می کند" تا در ناحیه $r < r_e$. نتیجه می شود که مقدار متوسط $1/r^2$ کمتر از $1/r_e^2$ است: ناهماهنگ بودن باعث کاهش ثابت دورانی مؤثر می شود. این را می توان در فرمولهای (۵۵) و (۴۶) دید. در واقع، حتی اگر حرکت ارتعاشی نسبت به r_e کاملاً متقارن باشد (یعنی g صفر باشد)، مقدار متوسط $1/r^2$ برابر با $1/r_e^2$ نخواهد بود، زیرا

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle \neq \frac{1}{\langle r \rangle^2} \quad (۵۶)$$

این منشأ جمله دوم عبارت (۴۶) است: وقتی متوسط $1/r^2$ گرفته شود، مقادیر کم r مطلوبتر هستند. به طوری که $\langle 1/r^2 \rangle$ بزرگتر از $1/\langle r \rangle^2$ است؛ علامت این تصحیح دوم از اینجا تعیین می شود.

علامت کلی α_e از رقابت بین دو اثر بالا نتیجه می شود. به طور کلی، برتری با جمله ناهماهنگ است، به طوری که α_e مثبت است و B_v کمتر از B است.

یادداشت:

۱. جفتیدگی ارتعاشی-دورانی حتی در حالت پایه ارتعاشی $v = 0$ وجود دارد

$$B_0 = B - \frac{1}{4}\alpha_e \quad (۵۷)$$

این نشانه دیگری از گستردگی محدود (Δr) تابع موج حالت $v = 0$ است.

۲. به طور تجربی، جفتیدگی ارتعاشی-دورانی به طریق زیر ظاهر می شود: اگر α_e مثبت باشد، ساختار دورانی در حالت ارتعاشی بالاتر v' کمی متراکمتر از حالت ارتعاشی پایینتر $v = v' - 1$ است. به سهولت

می‌توان نشان داد که شاخه‌های P و R از شکل ۳ به‌طور متفاوت متأثر می‌شوند. خطوط مجاور دیگر کاملاً هم‌فاصله نیستند و، به‌طور متوسط در شاخهٔ R به‌هم نزدیک‌ترند تا در شاخهٔ P . ■

در مجموع، انرژی یک تراز ارتعاشی-دورانی یک مولکول دواتمی که با اعداد کوانتومی l و v مشخص شده است، توسط فرمول زیر داده می‌شود

$$E_{v,l} = -V_0 + \left(v + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega + \left[B - \alpha_e \left(v + \frac{1}{2}\right)\right] \hbar l(l+1) - Gh l^2(l+1)^2 + \xi \left(v + \frac{1}{2}\right)^2 \hbar\omega + \frac{\gamma}{\epsilon_0} \xi \hbar\omega \quad (58)$$

V_0 : انرژی تجزیهٔ مولکول.

$\omega/2\pi$: بسامد ارتعاشی.

B : ثابت دورانی داده شده توسط (۱۶).

G, α_e, ξ : ثابتهای بدون بُعد داده شده توسط (۴۰)، (۴۶) و (۵۲).

مراجع برای مطالعهٔ بیشتر

طیف‌مولکولی:

Eisberg and Resnick (1.3), chap. 12; Pauling and Wilson (1.9), chap. X; Karplus and Porter (12.1), chap. 7; Herzberg (12.4), Vol. I, chap. III, §§ 2 b and 2 c; Landau and Lifshitz (1.19), chaps. XI and XIII.

ارتعاش و دوران هسته‌ای:

Valentin (16.1), §VII-2.

مکمل ۷

تمرینات

۱. ذره در یک پتانسیل متقارن استوانه‌ای

به فرض ρ, φ, z مختصات استوانه‌ای یک ذره بدون اسپین باشند $x = \rho \cos \varphi, y = \rho \sin \varphi$ ؛
 $0 \leq \varphi < 2\pi, \rho \geq 0$. فرض کنید که انرژی پتانسیل این ذره فقط بستگی به ρ داشته باشد.
 نه به φ و z . متذکر می‌شویم که

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

الف) در مختصات استوانه‌ای، عملگر دیفرانسیلی وابسته به هامیلتونی را بنویسید. نشان دهید
 که H با L_z و P_z جابه‌جاپذیر است. از روی این نشان دهید که تابع موجهای وابسته به حالت‌های
 مانای ذره می‌توانند به شکل زیر انتخاب شوند

$$\varphi_{n,m,k}(\rho, \varphi, z) = f_{n,m}(\rho) e^{im\varphi} e^{ikz}$$

که مقادیری که شاخصهای m و k می‌توانند بگیرند باید مشخص شوند.

ب) در مختصات استوانه‌ای، معادله ویژه مقدار هامیلتونی H ذره را بنویسید. از روی آن معادله
 دیفرانسیلی که $f_{n,m}(\rho)$ را می‌دهد، نتیجه بگیرید.

ج) فرض کنید Σ_y عملگری باشد که عمل آن، در نمایش $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ تعویض y به $-y$ باشد
 (انعکاس نسبت به صفحه xOz). آیا Σ_y با H جابه‌جاپذیر است؟ نشان دهید که Σ_y با L_z
 پادجابه‌جاپذیر است و از روی آن نشان دهید که $\Sigma_y | \varphi_{n,m,k} \rangle$ ویژه‌بردار L_z است. ویژه‌مقدار
 متناظر چقدر است؟ در مورد واگنی ترازهای انرژی ذره چه نتیجه‌ای گرفته می‌شود؟ آیا این نتیجه
 را می‌توان مستقیماً از معادله دیفرانسیل به دست آمده در (ب) پیش‌بینی کرد؟

۲. نوسانگر هماهنگ سه‌بعدی در میدان مغناطیسی یکنواخت

توجه: منظور از این تمرین مطالعه یک دستگاه فیزیکی ساده است که برای آن اثر میدان مغناطیسی
 یکنواخت می‌تواند دقیقاً محاسبه شود. بنابراین، در این مورد امکان دارد به‌طور دقیق اهمیت نسبی
 جمله‌های "پارامغناطیسی" و "دیامغناطیسی" را مقایسه کرد، و تغییر تابع موج حالت پایه ناشی

از اثر جمله دیامغناطیس را به تفصیل مطالعه کرد. (خواننده می‌تواند به مکملهای ۴، فصل ۶ و ۲ فصل ۷ مراجعه کند).

ذره‌ای به جرم μ در نظر بگیرید که هامیلتونی آن عبارت است از

$$H_0 = \frac{\mathbf{P}^2}{2\mu} + \frac{1}{2} \mu \omega_0^2 \mathbf{R}^2$$

(یک نوسانگر هماهنگ سه‌بعدی همسانگرد)، که ω_0 یک ثابت مثبت معلوم است.

الف) ترازهای انرژی ذره و مرتبه واگنی آنها را پیدا کنید. آیا امکان دارد پایه‌ای از ویژه‌حالت‌های مشترک H_0 ، L^2 و L_z ساخت؟

ب) اکنون، فرض می‌کنیم ذره، که دارای بار q است، در یک میدان مغناطیسی یکنواخت B موازی با Oz قرار داده شود. قرار می‌دهیم $\omega_L = -qB/2\mu$. پس هامیلتونی H ذره، اگر بیامانه $\mathbf{A} = -(\hbar/2)\mathbf{r} \times \mathbf{B}$ را انتخاب کنیم، می‌شود

$$H = H_0 + H_1(\omega_L)$$

که H_1 عبارت است از مجموع دو عملگر که یکی به‌طور خطی (جمله پارامغناطیسی) و دیگری به‌طور مجذوری (جمله دیامغناطیسی) به ω_L بستگی دارد. نشان دهید که حالت‌های مانای جدید دستگاه و مرتبه واگنی آنها می‌توانند به‌طور دقیق تعیین شوند.
ج) نشان دهید اگر ω_L خیلی کوچکتر از ω_0 باشد اثر جمله دیامغناطیس در مقایسه با جمله پارامغناطیس ناچیز است.

د) حال اولین حالت برانگیخته نوسانگر را در نظر می‌گیریم، یعنی حالت‌هایی را که انرژی آنها وقتی $\omega_L \rightarrow 0$ به $\omega_L/2$ نزدیک می‌شود. با در نظر گرفتن جمله‌های مرتبه اول ω_L/ω_0 ، ترازهای انرژی در حضور میدان B و مرتبه‌های واگنی آنها چقدر است (اثر زیمان برای نوسانگر هماهنگ سه‌بعدی)؟

ه) حال حالت پایه را در نظر بگیرید. انرژی آن برحسب ω_L چگونه تغییر می‌کند؟ (اثر دیامغناطیس بر حالت پایه) پذیرفتاری مغناطیسی این حالت، χ ، را حساب کنید؟ آیا حالت پایه در حضور میدان B ، ویژه‌بردار L_x ، L_y ، یا L_z است؟ شکل تابع موج و جریان احتمال وابسته به آن را حساب کنید؟ نشان دهید که اثر میدان B تراکم تابع موج حول Oz (به نسبت $[1 + (\omega_L/\omega_0)^2]^{1/2}$) و القای جریان است.

پیوست الف

سری فوریه و تبدیلات فوریه

۱. سری فوریه

الف. توابع تناوبی

ب. بسط یک تابع تناوبی به سری فوریه

ج. رابطهٔ پسل-پارسوال

۲. تبدیلات فوریه

الف. تعاریف

ب. خواص ساده

ج. فرمول پارسوال-پلاشرل

د. مثالها

ه. تبدیلات فوریه در فضای سه‌بعدی

در این پیوست، چند تعریف، فرمول و خاصیت را که در مکاتیک کوانتومی مفیدند، مرور خواهیم کرد. در اینجا نه قصد ورود به جزئیات محاسبات را داریم و نه اثبات دقیق قضایای ریاضی را ذکر می‌کنیم.

۱. سری فوریه

الف. توابع تناوبی

یک تابع $f(x)$ از یک متغیر را تناوبی می‌گوییم در صورتی که یک عدد حقیقی غیر صفر مانند L وجود داشته باشد که به‌ازاء تمام x ها:

$$\boxed{f(x + L) = f(x)} \quad (۱)$$

L را دوره تناوب تابع $f(x)$ می‌نامند.

اگر $f(x)$ تابعی تناوبی با دوره تناوب L باشد، تمام اعداد nL که n عددی صحیح مثبت یا منفی است، نیز دوره تناوبهای $f(x)$ خواهند بود. دوره تناوب اصلی L چنین تابعی، بنابر تعریف کوچکترین دوره تناوب مثبت آن است (اصطلاح "دوره تناوب" در فیزیک اغلب به همان دوره تناوب اصلی تابع اطلاق می‌شود).

یادداشت:

می‌توانیم تابعی مانند $f(x)$ را که فقط در فاصله متناهی $[a, b]$ از محور حقیقی تعریف شده است در نظر بگیریم و تابعی مانند $f_p(x)$ بسازیم که در داخل $[a, b]$ برابر با $f(x)$ و با دوره تناوب $(b - a)$ ، تناوبی باشد $f_p(x)$ در صورتی پیوسته است که $f(x)$ پیوسته باشد و داشته باشیم

$$f(b) = f(a) \quad (۲)$$

می‌دانیم که توابع مثلثاتی تناوبی‌اند، بخصوص:

$$\cos 2\pi \frac{x}{L} \quad \text{و} \quad \sin 2\pi \frac{x}{L} \quad (۳)$$

دارای دوره تناوبهای اصلی برابر با L هستند.

از جمله مثالهای مخصوصاً مهم توابع تناوبی، توابع نمایی تناوبی‌اند. شرط لازم و کافی برای اینکه تابع نمایی $e^{\alpha x}$ دارای دوره تناوب L باشد، بنابر تعریف (۱)، این است که:

$$e^{\alpha L} = 1 \quad (۴)$$

یعنی:

$$\alpha L = 2in\pi \quad (۵)$$

که n یک عدد صحیح است. از این رو دو تابع نمایی با دوره تناوب اصلی L وجود دارد:

$$e^{\pm i 2\pi x/L} \quad (۶)$$

که علاوه بر این، به توابع مثلثاتی (۳) که دوره تناوبهای یکسانی دارند، نیز مربوط اند:

$$e^{\pm i 2\pi x/L} = \cos 2\pi \frac{x}{L} \pm i \sin 2\pi \frac{x}{L} \quad (۷)$$

تابع نمایی $e^{i n \pi x/L}$ نیز دوره تناوبی برابر با L دارد، اما دوره تناوب اصلی آن L/n است. ■

ب. بسط یک تابع تناوبی به سری فوریه
فرض کنید $f(x)$ تابعی تناوبی، با دوره تناوب اصلی L باشد. اگر این تابع در شرایط ریاضی معینی صدق کند (همان طوری که همواره در فیزیک این چنین است)، آن را می توان برحسب سری ای از توابع نمایی موهومی یا توابع مثلثاتی بسط داد.

۱. سری توابع نمایی موهومی
می توانیم $f(x)$ را به صورت زیر بنویسیم:

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n e^{i k_n x} \quad (۸)$$

که:

$$k_n = n \frac{2\pi}{L} \quad (۹)$$

ضرایب c_n سری فوریه (۸) از فرمول زیر به دست می آیند:

$$c_n = \frac{1}{L} \int_{x_0}^{x_0+L} dx e^{-i k_n x} f(x) \quad (۱۰)$$

که در آن x_0 یک عدد حقیقی دلخواه است.

برای اثبات فرمول (۱۰)، (۸) را در $e^{-ik_p x}$ ضرب می‌کنیم و از آن بین x_0 و $x_0 + L$ انتگرال می‌گیریم:

$$\int_{x_0}^{x_0+L} dx e^{-ik_p x} f(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n \int_{x_0}^{x_0+L} dx e^{i(k_n - k_p)x} \quad (11)$$

انتگرال طرف راست به‌ازاء $n \neq p$ برابر صفر و به‌ازاء $n = p$ برابر L است. از این‌رو همان فرمول (۱۰) به‌دست می‌آید. به‌آسانی می‌توان نشان داد که مقدار به‌دست آمده برای c_n مستقل از عدد انتخابی x_0 است.

مجموعه مقادیر $|c_n|$ را، طیف فوریه $f(x)$ می‌نامند. توجه کنید که $f(x)$ حقیقی است اگر و فقط اگر:

$$c_{-n} = c_n^* \quad (12)$$

۲. سریهای سینوسی و کسینوسی

اگر، در سری (۸) جملات مربوط به n های مساوی و مختلف‌العلامت را دسته‌بندی کنیم، رابطه:

$$f(x) = c_0 + \sum_{n=1}^{\infty} (c_n e^{ik_n x} + c_{-n} e^{-ik_n x}) \quad (13)$$

را به‌دست می‌آوریم. یعنی، با توجه به (۷):

$$f(x) = a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos k_n x + b_n \sin k_n x) \quad (14)$$

که:

$$a_0 = c_0$$

$$\left. \begin{aligned} a_n &= c_n + c_{-n} \\ b_n &= i(c_n - c_{-n}) \end{aligned} \right\} n > 0 \quad (15)$$

بنابراین فرمولهایی را که ضرایب a_n و b_n را می‌دهند می‌توان از فرمول (۱۰) به دست آورد:

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{1}{L} \int_{x_0}^{x_0+L} dx f(x) \\ a_n &= \frac{2}{L} \int_{x_0}^{x_0+L} dx f(x) \cos k_n x \\ b_n &= \frac{2}{L} \int_{x_0}^{x_0+L} dx f(x) \sin k_n x \end{aligned} \quad (۱۶)$$

اگر $f(x)$ پاریته معینی داشته باشد. بسط (۱۴) مخصوصاً راحت است، زیرا:

$$b_n = 0 \quad \text{اگر } f(x) \text{ زوج باشد} \quad (۱۷)$$

$$a_n = 0 \quad \text{اگر } f(x) \text{ فرد باشد}$$

به علاوه، اگر $f(x)$ حقیقی باشد، ضرایب a_n و b_n حقیقی‌اند.

ج. رابطهٔ بسل-پارسوال

با توجه به سری فوریه (۸) به راحتی می‌توان نشان داد که:

$$\frac{1}{L} \int_{x_0}^{x_0+L} dx |f(x)|^2 = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |c_n|^2 \quad (۱۸)$$

این مطلب را می‌توان با استفاده از معادلهٔ (۸) نشان داد:

$$\frac{1}{L} \int_{x_0}^{x_0+L} dx |f(x)|^2 = \sum_{n,p} c_p^* c_n \frac{1}{L} \int_{x_0}^{x_0+L} dx e^{i(k_n - k_p)x} \quad (۱۹)$$

نظیر (۱)، انتگرال طرف راست برابر است با $L\delta_{np}$ ، که رابطهٔ (۱۸) را اثبات می‌کند.

وقتی بسط (۱۴) را به کار می‌بریم، رابطهٔ بسل-پارسوال (۱۸) را می‌توانیم به صورت زیر نیز

بنویسیم:

$$\frac{1}{L} \int_{x_0}^{x_0+L} dx |f(x)|^2 = |a_0|^2 + \frac{1}{4} \sum_{n=1}^{\infty} (|a_n|^2 + |b_n|^2) \quad (۲۰)$$

اگر دو تابع $f(x)$ و $g(x)$ با دوره تناوبهای یکسان L داشته باشیم، که ضرایب فوریه آنها به ترتیب c_n و d_n باشد، رابطه (۱۸) را می‌توانیم به صورت زیر تعمیم دهیم:

$$\frac{1}{L} \int_{x_0}^{x_0+L} dx g^*(x) f(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} d_n^* c_n \quad (21)$$

۲. تبدیلات فوریه

الف. تعاریف

۱. انتگرال فوریه به عنوان حد یک سری فوریه

حال، یک تابع $f(x)$ را که الزاماً تناوبی نیست، در نظر بگیرید. تابع تناوبی $f_L(x)$ با دوره تناوب L را طوری تعریف می‌کنیم که در فاصله $[-L/2, L/2]$ برابر $f(x)$ باشد. $f_L(x)$ را می‌توان به یک سری فوریه بسط داد:

$$f_L(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n e^{ik_n x} \quad (22)$$

که، k_n با فرمول (۹) تعریف می‌شود، و:

$$c_n = \frac{1}{L} \int_{x_0}^{x_0+L} dx e^{-ik_n x} f_L(x) = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{+L/2} dx e^{-ik_n x} f(x) \quad (23)$$

وقتی L به بینهایت می‌گراید، $f_L(x)$ به $f(x)$ تبدیل می‌شود. از این رو در عبارات فوق، L را به بینهایت میل می‌دهیم.

به این ترتیب، بنابر تعریف (۹) برای k_n داریم:

$$k_{n+1} - k_n = \frac{2\pi}{L} \quad (24)$$

حال در رابطه (۲۳) به جای $1/L$ عبارت آن را بر حسب $(k_{n+1} - k_n)$ قرار می‌دهیم و مقدار c_n را که به این ترتیب به دست می‌آید در سری (۲۲) قرار می‌دهیم:

$$f_L(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{k_{n+1} - k_n}{2\pi} e^{ik_n x} \int_{-L/2}^{+L/2} d\xi e^{-ik_n \xi} f(\xi) \quad (25)$$

وقتی $L \rightarrow \infty$ ، $k_{n+1} - k_n$ به صفر می‌گراید [فرمول (۲۴) را ببینید]، به طوری که جمع‌بندی روی n به یک انتگرال معین تبدیل می‌شود. $f_L(x)$ به $f(x)$ میل می‌کند. انتگرال موجود در (۲۵)، به تابعی از تغییر پیوسته k تبدیل می‌شود. اگر قرار دهیم:

$$\tilde{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ikx} f(x) \quad (26)$$

رابطه (۲۵)، در حد $L \rightarrow \infty$ ، را می‌توانیم به این صورت بنویسیم:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{ikx} \tilde{f}(k) \quad (27)$$

$f(x)$ و $\tilde{f}(k)$ را تبدیلات فوریه یکدیگر می‌نامند.

۲. تبدیلات فوریه در مکانیک کوانتومی

در واقع، در مکانیک کوانتومی، قرارداد نسبتاً متفاوتی را به کار می‌بریم. اگر $\psi(x)$ یک تابع موج (یک‌بعدی) باشد، تبدیل فوریه $\bar{\psi}(p)$ آن به این صورت تعریف می‌شود:

$$\bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ipx/\hbar} \psi(x) \quad (28)$$

و فرمول عکس آن به صورت زیر است:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{ipx/\hbar} \bar{\psi}(p) \quad (29)$$

برای اینکه از (۲۶) و (۲۷) به (۲۸) و (۲۹) برسیم، قرار می‌دهیم:

$$p = \hbar k \quad (30)$$

(اگر x طول باشد، p دارای ابعاد تکانه است)، و:

$$\bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \tilde{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \tilde{\psi}\left(\frac{p}{\hbar}\right) \quad (31)$$

در این پیوست، همان طور که در مکانیک کوانتومی متداول است، به جای تعریف مرسوم (۲۶)، تعریف (۲۸) تبدیل فوریه را به کار خواهیم برد. علاوه بر این، برای اینکه به تعریف اخیر برگردیم کافی است که در تمامی روابط بعدی، \hbar را با 1 و p را با $\hbar k$ جایگزین کنیم.

ب. خواص ساده

روابط (۲۸) و (۲۹) را در نمادگذاری فشرده به صورت زیر بیان می‌کنیم:

$$\bar{\psi}(p) = \mathcal{F}[\psi(x)] \quad (\text{الف-۳۲})$$

$$\psi(p) = \overline{\mathcal{F}[\bar{\psi}(p)]} \quad (\text{ب-۳۲})$$

خواص زیر را می‌توان به سهولت ثابت کرد:

$$(I) \quad \bar{\psi}(p) = \mathcal{F}[\psi(x)] \implies \bar{\psi}(p - p_0) = \mathcal{F}[e^{ip_0 x/\hbar} \psi(x)] \quad (۳۳)$$

$$e^{-ipx_0/\hbar} \bar{\psi}(p) = \mathcal{F}[\psi(x - x_0)]$$

این مطلب، مستقیماً از تعریف (۲۸) نتیجه می‌شود.

$$(II) \quad \bar{\psi}(p) = \mathcal{F}[\psi(x)] \implies \mathcal{F}[\psi(cx)] = \frac{1}{|c|} \bar{\psi}\left(\frac{p}{c}\right) \quad (۳۴)$$

برای پی بردن به این خاصیت، کافی است متغیر انتگرال‌گیری را به صورت زیر تغییر دهیم:

$$u = cx \quad (۳۵)$$

بخصوص

$$\mathcal{F}[\psi(-x)] = \bar{\psi}(-p) \quad (۳۶)$$

بنابراین، اگر تابع $\psi(x)$ پاریته معینی داشته باشد، تبدیل فوریه آن نیز همان پاریته را خواهد داشت.

$$(III) \quad \psi(x) \quad \text{حقیقی} \leftrightarrow [\bar{\psi}(p)]^* = \bar{\psi}(-p) \quad (\text{الف-۳۷})$$

$$\psi(x) \quad \text{موهومی محض} \leftrightarrow [\bar{\psi}(p)]^* = -\bar{\psi}(-p) \quad (\text{ب-۳۷})$$

این عبارتها در صورت جابه‌جایی ψ و $\bar{\psi}$ نیز معتبرند.

(IV) اگر $f^{(n)}$ معرف مشتق مرتبه n تابع f باشد، مشتق‌گیرهای متوالی در داخل جمع‌بندی، بنابر (۲۸) و (۲۹)، نتیجه می‌دهد:

$$\mathcal{F}[\psi^{(n)}(x)] = \left(\frac{ip}{\hbar}\right)^n \bar{\psi}(p) \quad (الف-۳۸)$$

$$\bar{\psi}^{(n)}(p) = \mathcal{F}\left[\left(-\frac{ix}{\hbar}\right)^n \psi(x)\right] \quad (ب-۳۸)$$

پیمایش دو تابع $\psi_1(x)$ و $\psi_2(x)$ ، بنابر تعریف، تابعی است مانند $\psi(x)$ که برابر است با:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dy \psi_1(y) \psi_2(x-y) \quad (۳۹)$$

تبدیل فوریه $\psi(x)$ یا حاصلضرب معمولی تبدیلات $\psi_1(x)$ و $\psi_2(x)$ متناسب است:

$$\bar{\psi}(p) = \sqrt{2\pi\hbar} \bar{\psi}_1(p) \bar{\psi}_2(p) \quad (۴۰)$$

این مطلب را می‌توان به شرح زیر نشان داد.

تبدیل فوریه عبارت (۳۹) را در نظر می‌گیریم:

$$\bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ipx/\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dy \psi_1(y) \psi_2(x-y) \quad (۴۱)$$

و متغیرهای انتگرال‌گیری را تغییر می‌دهیم:

$$\{x, y\} \Rightarrow \{u = x - y, y\} \quad (۴۲)$$

اگر در $e^{ipy/\hbar}$ ضرب و بر آن تقسیم کنیم، به دست می‌آوریم:

$$\bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-ipy/\hbar} \psi_1(y) \int_{-\infty}^{+\infty} du e^{ipu/\hbar} \psi_2(u) \quad (۴۳)$$

که رابطه (۴۰) را اثبات می‌کند.

(VI) وقتی $\psi(x)$ تابعی قله‌ای با پهنا Δx باشد، پهنا Δp ی $\bar{\psi}(p)$ در رابطه زیر صدق

می‌کند:

$$\Delta x \cdot \Delta p \gtrsim \hbar \quad (۴۴)$$

تحلیل این نامساوی را در بخش ۲ فصل ۱ و مکمل CIII را ببینید.

ج. فرمول پارسوال-پلانشرل
هنجار یک تابع و تبدیل فوریه آن یکسان است:

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x)|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dp |\bar{\psi}(p)|^2} \quad (۴۵)$$

برای اثبات این مطلب، کافی است (۲۸) و (۲۹) را به طریق زیر مورد استفاده قرار دهیم:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x)|^2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{ipx/\hbar} \bar{\psi}(p) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dp \bar{\psi}(p) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{ipx/\hbar} \psi^*(x) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dp \bar{\psi}^*(p) \bar{\psi}(p) \end{aligned} \quad (۴۶)$$

مانند بخش ۱، فرمول پارسوال-پلانشرل را می‌توان به صورت زیر تعمیم داد:

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} dx \varphi^*(x) \psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \bar{\varphi}^*(p) \bar{\psi}(p)} \quad (۴۷)$$

د. مثالها

مطالعه خود را به سه مثال از تبدیلات فوریه، که برای آنها محاسبات سراسر است. محدود خواهیم ساخت.

(۱) تابع مربعی

$$\bar{\psi}(x) = \begin{cases} \frac{1}{a} & \text{برای } -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ = 0 & \text{برای } |x| > \frac{a}{2} \end{cases} \iff \bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{\sin\left(\frac{pa}{2\hbar}\right)}{\frac{pa}{2\hbar}} \quad (۴۸)$$

(۲) تابع نمایی نزولی

$$\psi(x) = e^{-|x|/a} \iff \bar{\psi}(p) = \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \frac{1/a}{(p^2/\hbar^2) + (1/a^2)} \quad (۴۹)$$

(۳) تابع گاوسی

$$\psi(x) = e^{-x^2/a^2} \iff \bar{\psi}(p) = \frac{a}{\sqrt{2\hbar}} e^{-p^2 a^2 / 2\hbar^2} \quad (50)$$

به این نکته مهم توجه کنید که تابع گاوسی شکل خود را در تبدیل فوریه حفظ می‌کند.

یادداشت:

در هر یک از این سه مورد، پهنایهای Δx و Δp را می‌توان به ترتیب برای $\psi(x)$ و $\bar{\psi}(p)$ تعریف کرد، و اینها، نامساوی (۴۴) را تأیید می‌کنند.

۵. تبدیلات فوریه در فضای سه بعدی

برای توابع موج $\psi(\mathbf{r})$ که به سه متغیر فضایی x, y, z بستگی دارند. (۲۸) و (۲۹) توسط روابط زیر جایگزین می‌شوند:

$$\bar{\psi}(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \psi(\mathbf{r}) \quad (\text{الف-51})$$

$$\bar{\psi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \bar{\psi}(\mathbf{p}) \quad (\text{ب-51})$$

خواص مذکور در بالا (بخشهای b-۲ و c-۲ در جلد اول فارسی) را می‌توان به آسانی به سه بعد تعمیم داد.

اگر ψ فقط به مدول بردار شعاع \mathbf{r} ، یعنی به r ، بستگی داشته باشد، $\bar{\psi}$ فقط به مدول p تکانه \mathbf{p} بستگی خواهد داشت و می‌توان آن را از رابطه زیر محاسبه کرد:

$$\bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{2}{p} \int_0^\infty r dr \sin \frac{pr}{\hbar} \psi(r) \quad (52)$$

ابتدا، با استفاده از (الف-۵۱)، مقدار $\bar{\psi}$ را برای یک بردار \mathbf{p}' که تحت دوران دلخواه \mathcal{R} از \mathbf{p} به دست می‌آید، پیدا می‌کنیم

$$\mathbf{p}' = \mathcal{R}\mathbf{p} \quad (53)$$

$$\bar{\psi}(\mathbf{p}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r e^{-i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}/\hbar} \psi(\mathbf{r}) \quad (54)$$

در این انتگرال، متغیر \mathbf{r} را با \mathbf{r}' تعویض می‌کنیم و قرار می‌دهیم:

$$\mathbf{r}' = \mathcal{R}\mathbf{r} \quad (55)$$

چون عنصر حجم، تحت دوران پایسته است:

$$d^3 r' = d^3 r \quad (56)$$

به علاوه، تابع ψ بدون تغییر می ماند، زیرا مدول r' با r برابر می ماند؛ بالاخره:

$$\mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}' = \mathbf{p} \cdot \mathbf{r} \quad (57)$$

زیرا حاصلضرب اسکالر بر اثر دوران ناورداست. به این ترتیب به دست می آوریم:

$$\bar{\psi}(\mathbf{p}') = \bar{\psi}(\mathbf{p}) \quad (58)$$

یعنی، $\bar{\psi}$ فقط به مدول \mathbf{p} بستگی دارد و مستقل از جهت آن است. پس می توانیم \mathbf{p} را در امتداد Oz انتخاب، و $\bar{\psi}(p)$ را محاسبه کنیم:

$$\begin{aligned} \bar{\psi}(p) &= \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^{3/2}} \int d^3 r e^{-ipz/\hbar} \psi(r) \\ &= \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^{3/2}} \int_0^\infty r^2 dr \psi(r) \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta e^{-ipr \cos\theta/\hbar} \\ &= \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^{3/2}} \int_0^\infty r^2 dr \psi(r) 2\pi \frac{2\hbar}{pr} \sin \frac{pr}{\hbar} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{2}{p} \int_0^\infty r dr \psi(r) \sin \frac{pr}{\hbar} \end{aligned} \quad (59)$$

که (۲۵) را اثبات می کند.

مراجع پیشنهادات برای مطالعه بیشتر

See, for example, Arfken (10.4), chaps. 14 and 15, or Butkov (10.8), chaps. 4 and 7; Bass (10.1), vol. I, chaps. XVIII through XX; section 10 of the bibliography, especially the subsection "Fourier transforms; distributions".

پیوست ب

”تابع“ δ ی دیراک

۱. مقدمه: خواص اصلی
الف. آشنایی با ”تابع“ δ
ب. توابعی که به δ میل می‌کنند
ج. خواص δ
۲. ”تابع“ δ و تبدیل فوریه
الف. تبدیل فوریه δ
ب. کاربردها
۳. انتگرال و مشتقهای ”تابع“ δ
الف. δ به عنوان مشتق ”تابع پله‌ای واحد“
ب. مشتقهای δ
۴. ”تابع“ δ در فضای سه‌بعدی

تابع δ ، در واقع، یک توزیع است. معذک، مانند اغلب فیزیکدانها، آن را مانند یک تابع معمولی در نظر خواهیم گرفت. این روش، هر چند از نظر ریاضی دقیق نیست، ولی برای کاربردهای کوانتوم مکانیکی کافی است.

۱. مقدمه: خواص اصلی

الف. آشنایی با "تابع" δ

تابع $\delta^{(\epsilon)}(x)$ را که به صورت زیر داده می شود در نظر بگیرید (شکل ۱):

$$\delta^{(\epsilon)}(x) = \begin{cases} \frac{1}{\epsilon} & \text{برای } -\frac{\epsilon}{2} < x < \frac{\epsilon}{2} \\ = 0 & \text{برای } |x| > \frac{\epsilon}{2} \end{cases} \quad (1)$$

که ϵ عددی مثبت است. انتگرال زیر را برآورد می کنیم:

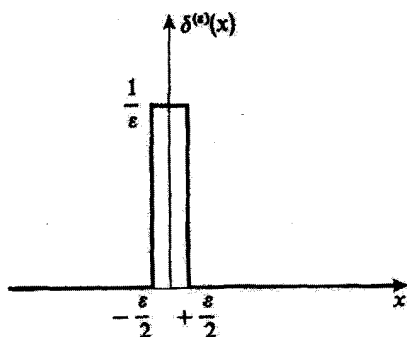
$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta^{(\epsilon)}(x) f(x) \quad (2)$$

که در آن $f(x)$ تابع دلخواهی است که به ازاء $x = 0$ خوش تعریف است. اگر ϵ به حد کافی کوچک باشد، تغییر $f(x)$ روی فاصله مؤثر انتگرال گیری $[-\epsilon/2, \epsilon/2]$ ناچیز است و عملاً برابر $f(0)$ می ماند. از این رو:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta^{(\epsilon)}(x) f(x) \simeq f(0) \int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta^{(\epsilon)}(x) = f(0) \quad (3)$$

هر چه ϵ کوچکتر باشد، این تقریب بهتر است. از این رو حد $\epsilon = 0$ را بررسی و "تابع" δ را توسط رابطه زیر تعریف می کنیم:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x) f(x) = f(0) \quad (4)$$



شکل ۱. تابع $\delta^{(\epsilon)}(x)$: تابعی مربعی با پهنای ϵ و ارتفاع $1/\epsilon$ ، متمرکز در $x = 0$.

که برای هر تابع $f(x)$ که در مبدأ تعریف شده باشد معتبر است. به طور عامتر، $\delta(x - x_0)$ را به این صورت تعریف می‌کنیم:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x - x_0) f(x) = f(x_0) \quad (5)$$

یادداشت:

۱. در واقع، نمادگذاری انتگرالی در (۵) از نظر ریاضی موجه نیست. δ دقیقاً به صورت یک توزیع تعریف شده است نه به صورت یک تابع. از نظر فیزیکی، این تمایز، اساسی نیست چون به محض اینکه ε در مقایسه با تمام فواصل دخیل در یک مسئله فیزیکی مفروض، قابل اغماض شود، غیرممکن است که بتوان بین $\delta(x)$ و $\delta^{(\varepsilon)}(x)$ فرض گذاشت*: هر تابع $f(x)$ که در نظر بگیریم، در فاصله طولی ε تغییر عمده‌ای نمی‌کند. در صورت بروز اشکال ریاضی، کافی است فرض کنیم که $\delta(x)$ در واقع همان $\delta^{(\varepsilon)}(x)$ [یا تابعی مشابه ولی منظمتر، مثلاً، یکی از توابع داده شده در (۷)، (۸)، (۹)، (۱۰)، (۱۱)] است، که در آن ε فوق‌العاده کوچک است ولی دقیقاً صفر نیست.
۲. برای حدود انتگرال‌گیری دلخواه a و b ، داریم:

$$\int_a^b dx \delta(x) f(x) = f(x_0) \quad \text{اگر } x_0 \in [a, b]$$

$$= 0 \quad \text{اگر } x_0 \notin [a, b] \quad (6)$$

ب. توابعی که به δ میل می‌کنند

به آسانی می‌توان نشان داد که، علاوه بر $\delta^{(\varepsilon)}(x)$ که توسط (۱) تعریف کردیم، توابع زیر نیز، وقتی پارامتر ε از طرف مثبت به سمت صفر میل کند، به $\delta(x)$ میل می‌کنند، یعنی در (۵) صدق می‌کنند:

$$(i) \quad \frac{1}{2\varepsilon} e^{-|x|/\varepsilon} \quad (7)$$

$$(ii) \quad \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} \quad (8)$$

$$(iii) \quad \frac{1}{\varepsilon\sqrt{\pi}} e^{-x^2/\varepsilon^2} \quad (9)$$

* دقت اندازه‌گیریهای فیزیکی امروزی، در هیچ موردی، اجازه نمی‌دهد تا پدیده‌ها را در مقیاسی کوچکتر از کسری از یک فرمی (10^{-16}m) بررسی کنیم.

$$(iv) \quad \frac{1}{\pi} \frac{\sin\left(\frac{x}{\varepsilon}\right)}{x} \quad (10)$$

$$(v) \quad \frac{\varepsilon}{\pi} \frac{\sin^{\gamma}\left(\frac{x}{\varepsilon}\right)}{x^{\gamma}} \quad (11)$$

همچنین اتحادی را ذکر می‌کنیم که اغلب در مکانیک کوانتومی (بخصوص در نظریه برخورد) مفید است:

$$\text{Lim}_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \mathcal{P} \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x) \quad (12)$$

که در آن \mathcal{P} معرف قسمت اصلی کوشی است که با رابطه زیر تعریف می‌شود * $f(x)$ تابعی است که در $x = 0$ منظم است:

$$\mathcal{P} \int_{-A}^{+B} \frac{dx}{x} f(x) = \text{Lim}_{\eta \rightarrow 0^+} \left[\int_{-A}^{-\eta} + \int_{+\eta}^{+B} \right] \frac{dx}{x} f(x); \quad A, B > 0 \quad (13)$$

برای اثبات (۱۲)، قسمت‌های حقیقی و موهومی $1/(x \pm i\varepsilon)$ را جدا می‌کنیم:

$$\frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \frac{x \mp i\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} \quad (14)$$

چون قسمت موهومی با تابع (۸) متناسب است، داریم:

$$\text{Lim}_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \mp i \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} = \mp i\pi \delta(x) \quad (15)$$

* اغلب از یکی از روابط زیر استفاده می‌کنیم:

$$\begin{aligned} \mathcal{P} \int_{-A}^{+B} \frac{dx}{x} f(x) &= \int_{-B}^{+B} dx \frac{f_-(x)}{x} + \int_{-A}^{-B} dx \frac{f(x)}{x} \\ &= \int_{-A}^{+B} dx \frac{f(x) - f(0)}{x} + f(0) \text{Log} \frac{B}{A} \end{aligned}$$

که در آن قسمت فرد $f_-(x) = [f(x) - f(-x)]/2$ است. این فرمولها به ما اجازه می‌دهند تا واگرایی در مبدأ را به‌طور صریح حذف کنیم.

اما برای قسمت حقیقی، آن را در یک تابع $f(x)$ که در مبدأ منظم است ضرب می‌کنیم و روی x انتگرال می‌گیریم:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x dx}{x^2 + \varepsilon^2} f(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left[\int_{-\infty}^{-\eta} + \int_{-\eta}^{+\eta} + \int_{+\eta}^{+\infty} \right] \frac{x dx}{x^2 + \varepsilon^2} f(x) \quad (۱۶)$$

انتگرال دوم صفر است:

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\eta}^{+\eta} \frac{x dx}{x^2 + \varepsilon^2} f(x) = f(0) \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\eta} [\text{Log}(x^2 + \varepsilon^2)]_{-\eta}^{+\eta} = 0 \quad (۱۷)$$

حال اگر ترتیب محاسبه حدها را در (۱۶) عوض کنیم، حد $\varepsilon \rightarrow 0$ هیچ اشکالی در دو انتگرال دیگر به وجود نمی‌آورد. بنابراین:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x dx}{x^2 + \varepsilon^2} f(x) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left[\int_{-\infty}^{-\eta} + \int_{+\eta}^{+\infty} \right] \frac{dx}{x} f(x) \quad (۱۸)$$

که اتحاد (۱۲) را برقرار می‌سازد.

ج. خواص δ

خواصی را که اکنون بیان خواهیم کرد می‌توان با استفاده از (۵) نشان داد. هر دو طرف معادلات زیر را در یک تابع $f(x)$ ضرب می‌کنیم و انتگرال می‌گیریم، ملاحظه می‌کنیم که نتایج به دست آمده، در واقع، مساوی‌اند.

$$(i) \quad \delta(-x) = \delta(x) \quad (۱۹)$$

$$(ii) \quad \delta(cx) = \frac{1}{|c|} \delta(x) \quad (۲۰)$$

و به‌طور کلیتر:

$$\delta[g(x)] = \sum_j \frac{1}{|g'(x_j)|} \delta(x - x_j) \quad (۲۱)$$

که $g'(x)$ ، مشتق $g(x)$ است و x_j ها صفرهای ساده تابع $g(x)$ هستند:

$$\begin{aligned} g(x_j) &= 0 \\ g'(x_j) &\neq 0 \end{aligned} \quad (22)$$

جمع‌بندی، روی تمام صفرهای ساده $g(x)$ انجام می‌گیرد. اگر $g(x)$ دارای چندین صفر باشد آنگاه، برای آنها $g'(x_j)$ نیز صفر است، عبارت $\delta[g(x)]$ بی‌معناست.

$$(iii) \quad x\delta(x - x_0) = x_0\delta(x - x_0) \quad (23)$$

و بخصوص:

$$x\delta(x) = 0 \quad (24)$$

عکس آن نیز درست است و می‌توان نشان داد که معادله:

$$x u(x) = 0 \quad (25)$$

دارای جواب عمومی زیر است:

$$u(x) = c\delta(x) \quad (26)$$

که در آن c یک ثابت دلخواه است.
به‌طور عمومیتر:

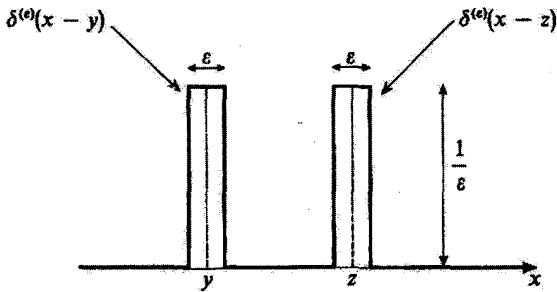
$$g(x)\delta(x - x_0) = g(x_0)\delta(x - x_0) \quad (27)$$

$$(iv) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x - y)\delta(x - z) = \delta(y - z) \quad (28)$$

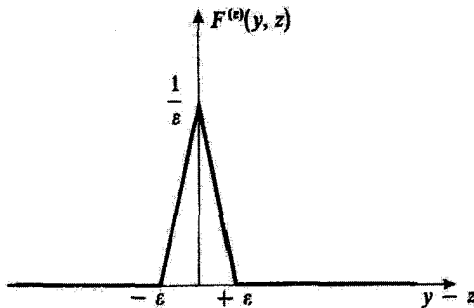
معادله (۲۸) را می‌توان با بررسی توابع $\delta^{(\varepsilon)}(x)$ مانند تابع نشان داده شده در شکل ۱، درک کرد.

انتگرال:

$$F^{(\varepsilon)}(y, z) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta^{(\varepsilon)}(x - y)\delta^{(\varepsilon)}(x - z) \quad (29)$$



شکل ۲. توابع $\delta^{(\epsilon)}(x - y)$ و $\delta^{(\epsilon)}(x - z)$: دو تابع مربعی با پهنای ϵ و ارتفاع $1/\epsilon$ ، که به ترتیب در $x = y$ و $x = z$ متمرکزند.



شکل ۳. تغییرات حاصلضرب اسکالر $F^{(\epsilon)}(y, z)$ دو تابع مربعی نمایش یافته در شکل ۲، نسبت به $y - z$. این حاصلضرب وقتی دو تابع همپوشی نکنند ($|y - z| \geq \epsilon$)، صفر و وقتی بر هم منطبق باشند ماکزیمم است. وقتی $\epsilon \rightarrow 0$ ، $F^{(\epsilon)}(y, z)$ به $\delta(y - z)$ میل می‌کند.

مادامی که $|y - z| < \epsilon$ ، یعنی، مادامی که دو تابع مربعی همپوشی نکنند (شکل ۲)، صفر است. ماکزیمم مقدار انتگرال، که به ازاء $y = z$ به دست می‌آید، برابر است با $1/\epsilon$. تغییرات $F^{(\epsilon)}(y, z)$ نسبت به $y - z$ بین این مقدار ماکزیمم و صفر، خطی است (شکل ۳). بلافاصله می‌بینیم که وقتی $\epsilon \rightarrow 0$ ، $F^{(\epsilon)}(y, z)$ به $\delta(y - z)$ میل می‌کند.

یادداشت:

مجموع توابع δ یی که به فواصل منظم از یکدیگر قرار دارند:

$$\sum_{q=-\infty}^{+\infty} \delta(x - qL) \quad (30)$$

می توان به عنوان یک "تابع" تناوبی با دوره تناوب L در نظر گرفت. با به کار بردن فرمولهای (۸) و (۹) و (۱۰) پیوست I، می توانیم این مجموع را به صورت زیر بنویسیم:

$$\sum_{q=-\infty}^{+\infty} \delta(x - qL) = \frac{1}{L} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{i\pi n x/L} \quad (31)$$

۲. "تابع" δ و تبدیل فوریه

الف. تبدیل فوریه δ

تعریف (۲۸) پیوست I و معادله (۵) ما را قادر می سازند تا مستقیماً تبدیل فوریه $\delta(x - x_0)$ ی $\bar{\delta}_{x_0}(p)$ را محاسبه کنیم:

$$\bar{\delta}_{x_0}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ipx/\hbar} \delta(x - x_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx_0/\hbar} \quad (32)$$

بخصوص، تبدیل فوریه $\delta(x)$ یک مقدار ثابت است:

$$\bar{\delta}_{x_0}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad (33)$$

سپس تبدیل فوریه عکس [فرمول (۲۹) پیوست I] می دهد:

$$\delta(x - x_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{ip(x-x_0)/\hbar} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{ik(x-x_0)} \quad (34)$$

این نتیجه را می توان با به کار بردن تابع $\delta^{(\varepsilon)}(x)$ که توسط (۱) تعریف کردیم، یا هر یک از توابع داده شده در بخش b - ۱ جلد اول فارسی نیز، به دست آورد. مثلاً، رابطه (۴۸) پیوست I ما را قادر می سازد تا بنویسیم:

$$\delta^{(\varepsilon)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{ipx/\hbar} \frac{\sin\left(\frac{p\varepsilon}{2\hbar}\right)}{\frac{p\varepsilon}{2\hbar}} \quad (35)$$

اگر ε را به سمت صفر میل دهیم. یقیناً به رابطه (۳۴) می رسیم.

ب. کار بردها

عبارت (۳۴) برای تابع δ ، اغلب اوقات بسیار مناسب است. مثلاً نشان خواهیم داد که این عبارت

چگونه یافتن تبدیل فوریه عکس و رابطه پارسوال-پلانشرل [فرمولهای (۲۹) و (۴۵) پیوست I] را ساده می‌کنند.
با شروع از:

$$\bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ipx/\hbar} \psi(x) \quad (۳۶)$$

انتگرال زیر را محاسبه می‌کنیم:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{ipx/\hbar} \bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \psi(\xi) \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{ip(x-\xi)/\hbar} \quad (۳۷)$$

در انتگرال دوم، $\delta(x - \xi)$ را تشخیص می‌دهیم، بنابراین:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{ipx/\hbar} \bar{\psi}(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \psi(\xi) \delta(x - \xi) = \psi(x) \quad (۳۸)$$

که فرمول عکس تبدیل فوریه است.

همچنین:

$$|\bar{\psi}(p)|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{ipx/\hbar} \psi^*(x) \int_{-\infty}^{+\infty} dx' e^{-ipx'/\hbar} \psi(x') \quad (۳۹)$$

اگر از این عبارت روی p انتگرال بگیریم، خواهیم داشت:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp |\bar{\psi}(p)|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \psi(x') \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{ip(x-x')/\hbar} \quad (۴۰)$$

یعنی، بنا بر (۳۴):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp |\bar{\psi}(p)|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \psi(x') \delta(x - x') = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x)|^2 \quad (۴۱)$$

که چیزی جز فرمول پارسوال-پلانشرل نیست.

می‌توان به طریق مشابهی، تبدیل فوریه یک حاصلضرب پیچشی [فرمولهای (۳۹) و (۴۰) پیوست I] را به دست آورد.

۳. انتگرال و مشتقهای "تابع" δ

الف. δ ، به عنوان مشتق "تابع پله‌ای واحد" انتگرال زیر را برآورد می‌کنیم:

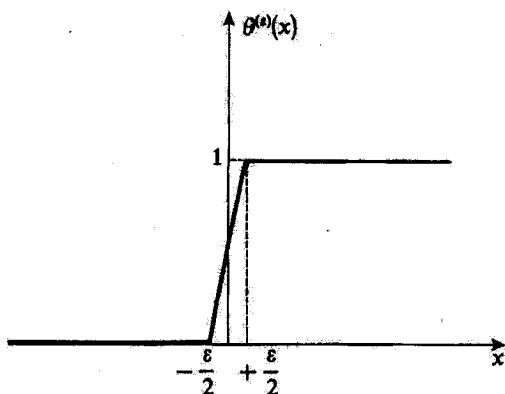
$$\theta^{(\varepsilon)}(x) = \int_{-\infty}^x \delta^{(\varepsilon)}(x') dx' \quad (42)$$

که تابع $\delta^{(\varepsilon)}(x)$ در (۱) تعریف شده است. به آسانی می‌توان دید که $\theta^{(\varepsilon)}(x)$ ، به ازاء $x \leq -\varepsilon/2$ برابر صفر، به ازاء $x \geq \varepsilon/2$ برابر ۱، و به ازاء $-\varepsilon/2 \leq x \leq \varepsilon/2$ برابر $1/\varepsilon(x + \varepsilon/2)$ است. تغییرات $\theta^{(\varepsilon)}(x)$ را نسبت به x در شکل ۴ نشان داده‌ایم. وقتی $\varepsilon \rightarrow 0$ ، $\theta^{(\varepsilon)}(x)$ به سمت "تابع پله‌ای" هویساید $\theta(x)$ میل می‌کند، که بنابر تعریف برابر است با

$$\begin{aligned} \theta(x) &= 1 & \text{اگر } x > 0 \\ \theta(x) &= 0 & \text{اگر } x < 0 \end{aligned} \quad (43)$$

$\delta^{(\varepsilon)}(x)$ مشتق $\theta^{(\varepsilon)}(x)$ است. با در نظر گرفتن حد $\varepsilon \rightarrow 0$ ، ملاحظه می‌کنیم که $\delta(x)$ مشتق $\theta(x)$ است:

$$\frac{d}{dx} \theta(x) = \delta(x) \quad (44)$$



شکل ۴. تغییرات تابع $\theta^{(\varepsilon)}(x)$ ، که مشتق آن، $\delta^{(\varepsilon)}(x)$ ، در شکل ۱ نشان داده شده است. وقتی $\varepsilon \rightarrow 0$ ، $\theta^{(\varepsilon)}(x)$ به سمت تابع پله‌ای هویساید $\theta(x)$ میل می‌کند.

حال، یک تابع $g(x)$ را در نظر بگیرید که در $x = 0$ دارای ناپیوستگی σ_0 باشد:

$$\lim_{x \rightarrow 0^+} g(x) - \lim_{x \rightarrow 0^-} g(x) = \sigma_0. \quad (45)$$

چنین تابعی را می‌توان به صورت $g(x) = g_1(x)\theta(x) + g_2(x)\theta(-x)$ نوشت، که در آن $g_1(x)$ و $g_2(x)$ توابع پیوسته‌ای هستند که در رابطه $g_1(0) - g_2(0) = \sigma_0$ صدق می‌کنند. اگر با استفاده از (۴۴)، از این عبارت مشتق بگیریم، بنابر خواص (۱۹) و (۲۷) از δ ، به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} g'(x) &= g'_1(x)\theta(x) + g'_2(x)\theta(-x) + g_1(x)\delta(x) - g_2(x)\delta(-x) \\ &= g'_1(x)\theta(x) + g'_2(x)\theta(-x) + \sigma_0\delta(x) \end{aligned} \quad (46)$$

یعنی، برای یک تابع ناپیوسته، به مشتق معمولی [دو جمله اول (۴۶)]، جمله‌ای متناسب با تابع δ افزوده می‌شود، که ضریب تناسب، عبارت از مقدار ناپیوستگی تابع است.*

یادداشت:

تبدیل فوریه تابع پله‌ای $\theta(k)$ را می‌توان به آسانی از (۱۲) به دست آورد. خواهیم داشت:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \theta(k)e^{ikx} dk = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_0^{\infty} dk e^{ik(x+i\varepsilon)} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{i}{x+i\varepsilon} = i\mathcal{P}\frac{1}{x} + \pi\delta(x) \quad (47)$$

■

ب. مشتقات δ

با مقایسه با عبارت انتگرال‌گیری جزء به جزء، مشتق تابع δ ، $\delta'(x)$ ، توسط رابطه زیر تعریف می‌شود**

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta'(x)f(x) = - \int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x)f'(x) = -f'(0) \quad (48)$$

* البته، اگر تابع در $x = x_0$ ناپیوسته باشد، جمله اضافی به صورت زیر است:

$$[g_1(x_0) - g_2(x_0)]\delta(x - x_0)$$

** $\delta'(x)$ را می‌توان به عنوان حد مشتق یکی از توابع داده شده در بخش b-۱، در جلد اول فارسی به‌اراء $\varepsilon \rightarrow 0$ ، در نظر گرفت.

از این تعریف، بلافاصله داریم:

$$\delta'(-x) = -\delta'(x) \quad (۴۹)$$

و

$$x\delta'(x) = -\delta(x) \quad (۵۰)$$

برعکس، می توان نشان داد که جواب عمومی معادله:

$$xu(x) = \delta(x) \quad (۵۱)$$

را می توان به صورت زیر نوشت:

$$u(x) = -\delta'(x) + c\delta(x) \quad (۵۲)$$

که در آن جمله دوم، از معادله همگن حاصل می شود [فرمولهای (۲۵) و (۲۶)].
معادله (۳۴) به ما امکان می دهد که $\delta'(x)$ را به صورت زیر بنویسیم:

$$\delta'(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \left(\frac{ip}{\hbar} \right) e^{ipx/\hbar} = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} k dk e^{ikx} \quad (۵۳)$$

مشتق مرتبه n ، $\delta^{(n)}(x)$ ، را می توان به همین طریق تعریف کرد:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta^{(n)}(x) f(x) = (-1)^n f^{(n)}(0) \quad (۵۴)$$

روابط (۴۹) و (۵۰) را می توانیم به شکلهای زیر تعمیم دهیم:

$$\delta^{(n)}(-x) = (-1)^n \delta^{(n)}(x) \quad (۵۵)$$

و

$$x\delta^{(n)}(x) = -n\delta^{(n-1)}(x) \quad (۵۶)$$

۴. "تابع" δ در فضای سه بعدی

"تابع" δ در فضای سه بعدی، که آن را به صورت $\delta(\mathbf{r})$ می نویسیم توسط عبارتی مشابه با (۴) تعریف می شود:

$$\int d^3r \delta(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{0}) \quad (57)$$

و به طور عمومیتر:

$$\int d^3r \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}_0) \quad (58)$$

$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ را می توان به حاصلضرب سه تابع یک بعدی تجزیه کرد:

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(z - z_0) \quad (59)$$

یا، اگر از مختصات قطبی استفاده کنیم:

$$\begin{aligned} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) &= \frac{1}{r^2 \sin \theta} \delta(r - r_0) \delta(\theta - \theta_0) \delta(\varphi - \varphi_0) \\ &= \frac{1}{r^2} \delta(r - r_0) \delta(\cos \theta - \cos \theta_0) \delta(\varphi - \varphi_0) \end{aligned} \quad (60)$$

از این رو خواصی که در بالا برای $\delta(x)$ بیان کردیم، به آسانی برای $\delta(\mathbf{r})$ نیز قابل تعمیم اند. علاوه بر این، رابطه مهم زیر را ذکر می کنیم:

$$\Delta \left(\frac{1}{r} \right) = -4\pi \delta(\mathbf{r}) \quad (61)$$

که در آن Δ ، عملگر لاپلاسی است.

اگر به خاطر آوریم که در الکتروستاتیک، بار الکتریکی نقطه‌ای q واقع در مبدأ را می توان توسط یک چگالی حجمی $\rho(\mathbf{r})$ به صورت

$$\rho(\mathbf{r}) = q \delta(\mathbf{r}) \quad (62)$$

توصیف کرد، معادله (۶۱) را می توان به آسانی فهمید می دانیم که پتانسیل الکتروستاتیکی ایجاد شده توسط این بار عبارت است از:

$$U(\mathbf{r}) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \quad (63)$$

بنابراین، معادله (۶۱) همان معادله پواسن، برای این مورد خاص، است:

$$\Delta U(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\epsilon_0} \rho(\mathbf{r}) \quad (64)$$

برای اثبات دقیق (۶۱)، لازم است که از نظریه توزیع ریاضی استفاده کنیم. در اینجا مطالعه خود را به یک "اثبات" مقدماتی محدود خواهیم ساخت.

قبل از هر چیز توجه کنید که لاپلاسی $1/r$ همه جا به جز، شاید در مبدأ، که نقطه‌ای تکیه است، صفر است:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) \frac{1}{r} = 0 \quad \text{برای} \quad r \neq 0 \quad (65)$$

فرض کنید $g_\epsilon(\mathbf{r})$ تابعی باشد که وقتی \mathbf{r} در خارج کره S_ϵ ، به مرکز O و شعاع ϵ ، است، برابر $1/r$ و وقتی \mathbf{r} در داخل این کره است، دارای مقادیری (از مرتبه $1/\epsilon$) است به گونه‌ای که $g_\epsilon(\mathbf{r})$ به قدر کافی منظم است (پیوسته، مشتق‌پذیر و غیره). فرض کنید $f(\mathbf{r})$ تابع دلخواهی از \mathbf{r} باشد که آن نیز در تمامی نقاط فضا منظم است. حال، حد انتگرال:

$$I(\epsilon) = \int d^3r f(\mathbf{r}) \Delta g_\epsilon(\mathbf{r}) \quad (66)$$

را به ازاء $\epsilon \rightarrow 0$ ، پیدا می‌کنیم. بنابر (۶۵)، این انتگرال می‌تواند فقط سهمهایی از داخل کره S_ϵ دریافت دارد، و:

$$I(\epsilon) = \int_{r \leq \epsilon} d^3r f(\mathbf{r}) \Delta g_\epsilon(\mathbf{r}) \quad (67)$$

ϵ را آن قدر کوچک انتخاب می‌کنیم که تغییرات $f(\mathbf{r})$ در داخل S_ϵ ناچیز باشد. در این صورت:

$$I(\epsilon) \simeq f(0) \int_{r \leq \epsilon} d^3r \Delta g_\epsilon(\mathbf{r}) \quad (68)$$

با تبدیل انتگرالی که به این ترتیب به دست می‌آید، به انتگرالی روی سطح \mathcal{S}_ϵ کره S_ϵ ، به دست می‌آوریم:

$$I(\epsilon) \simeq f(0) \int_{\mathcal{S}_\epsilon} \nabla g_\epsilon(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{n} \quad (69)$$

حال، چون $g_\epsilon(\mathbf{r})$ روی سطح \mathcal{S}_ϵ پیوسته است، داریم:

$$[\nabla g_\epsilon(\mathbf{r})]_{r=\epsilon} = \left[-\frac{1}{r^2} \right]_{r=\epsilon} \mathbf{e}_r = -\frac{1}{\epsilon^2} \mathbf{e}_r \quad (70)$$

(که بردار یکه \mathbf{e}_r بردار یکه \mathbf{r}/r است). از اینجا حاصل می‌شود:

$$\begin{aligned} I(\epsilon) &\simeq f(0) \times 4\pi\epsilon^2 \times \left[-\frac{1}{\epsilon^2} \right] \\ &\simeq -4\pi f(0) \end{aligned} \quad (71)$$

یعنی:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int d^3r \Delta g_{\epsilon}(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) = -4\pi f(\mathbf{0}) \quad (72)$$

مطابق تعریف (۵۷)، این رابطه، همان (۶۱) است.

معادله (۶۱) را می‌توان، به‌عنوان مثال، برای به‌دست آوردن عبارتی که در نظریهٔ برخورد مفید است، مورد استفاده قرار داد (فصل ۸ را ببینید):

$$(\Delta + k^2) \frac{e^{\pm ikr}}{r} = -4\pi \delta(\mathbf{r}) \quad (73)$$

برای این منظور، کافی است $e^{\pm ikr}/r$ را به‌صورت یک حاصلضرب در نظر بگیریم:

$$\Delta \left[\frac{e^{\pm ikr}}{r} \right] = \frac{1}{r} \Delta(e^{\pm ikr}) + e^{\pm ikr} \Delta \left(\frac{1}{r} \right) + 2\nabla \left(\frac{1}{r} \right) \cdot \nabla(e^{\pm ikr}) \quad (74)$$

حال

$$\nabla(e^{\pm ikr}) = \pm ik e^{\pm ikr} \mathbf{r}/r$$

$$\Delta(e^{\pm ikr}) = -k^2 e^{\pm ikr} \pm \frac{2ik}{r} e^{\pm ikr} \quad (75)$$

بنابراین، نهایتاً، بر طبق (۷۷)، خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} (\Delta + k^2) \frac{e^{\pm ikr}}{r} &= \left[-\frac{k^2}{r} \pm \frac{2ik}{r^2} - 4\pi \delta(\mathbf{r}) - \frac{2}{r^2} \times (\pm ik) + \frac{k^2}{r} \right] e^{\pm ikr} \\ &= -4\pi e^{\pm ikr} \delta(\mathbf{r}) \\ &= -4\pi \delta(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (76)$$

بعلاوه، معادله (۶۱) را می‌توان تعمیم داد: لاپلاسی تابع $Y_l^m(\theta, \varphi)/r^{l+1}$ شامل مشتقات مرتبه l ام $\delta(\mathbf{r})$ است. مثلاً $\cos\theta/r^2$ را در نظر بگیرید. می‌دانیم که پتانسیل الکتروستاتیکی ناشی از یک دوقطبی الکتریکی که گشتاور \mathbf{D} ی آن در امتداد Oz است، در یک نقطه دور عبارت است از: $D/4\pi\epsilon_0 \cos\theta/r^2$. اگر q قدرمطلق هر یک از دو بار دوقطبی و a فاصلهٔ بین آنها باشد، مدول D ی گشتاور دوقطبی برابر حاصلضرب qa خواهد بود و چگالی بار مربوط را می‌توان به‌صورت زیر نوشت:

$$\rho(\mathbf{r}) = qa \delta \left(\mathbf{r} - \frac{q}{r} \mathbf{e}_z \right) - qa \delta \left(\mathbf{r} + \frac{a}{r} \mathbf{e}_z \right) \quad (77)$$

(که در آن e_z معرف بردار یکه محور Oz است). اگر a را به سمت صفر میل دهیم، و در عین حال $D = qa$ را متناهی نگه داریم، این چگالی بار، می‌شود:

$$\rho(\mathbf{r}) \xrightarrow{a \rightarrow 0} D \frac{\partial}{\partial z} \delta(\mathbf{r}) \quad (78)$$

از این رو، در حدی که $a \rightarrow 0$ ، معادله پواسن (۶۴)، می‌دهد:

$$\Delta \left(\frac{\cos \theta}{r^2} \right) = -4\pi \frac{\partial}{\partial z} \delta(\mathbf{r}) \quad (79)$$

البته، این فرمول را می‌توانیم، به همان طریقی که (۶۱) را توجیه کردیم، توجیه، یا توسط نظریه توزیع، ثابت کنیم. استدلال مشابهی را می‌توانیم برای تابع $Y_l^m(\theta, \varphi)/r^{l+1}$ ، که پتانسیل حاصل از یک گشتاور چندقطبی الکتریکی \mathcal{D}_l^m واقع در مبدأ را به دست می‌دهد، (مکمل E_x)، به کار ببریم.

مراجع پیشنهادات برای مطالعه بیشتر

مرجهای زیر را ببینید.

Dirac (1.13) §15, and, for example, Butkov (10.8), chap. 6, or Bass (10.1), vol.I, §§21.7 and 21.8; section 10 of the bibliography, especially the subsection "Fourier transforms; distributions".

پیوست ج

لاگرانژی و هامیلتونی در مکانیک کلاسیک

۱. مروری بر قوانین نیوتون

الف. دینامیک ذره نقطه‌ای

ب. سیستم‌های ذرات نقطه‌ای

ج. قضایای بنیادی

۲. لاگرانژی و معادلات لاگرانژ

۳. هامیلتونی و معادلات بندادی

الف. تکانه‌های همیوچ مختصات

ب. معادلات بندادی هامیلتون-ژاکوبی

۴. مثالهایی از کاربرد صورتبندی هامیلتونی

الف. ذره‌ای در پتانسیل مرکزی

ب. ذره باردار واقع در یک میدان الکترومغناطیسی

۱. توصیف میدان الکترومغناطیسی. پیمانه‌ها

۲. معادلات حرکت و لاگرانژی

۳. تکانه. هامیلتونی کلاسیک

۵. اصل کمترین کنش

الف. نمایش هندسی حرکت یک سیستم

ب. بیان اصل کمترین کنش

ج. معادلات لاگرانژ به عنوان نتیجه‌ای از اصل کمترین کنش

در اینجا تعریف و خواص اصلی لاگرانژی و هامیلتونی را در مکانیک کلاسیک یادآور می‌شویم. منظور از این پیوست مسلماً تدریس مکانیک تحلیلی نیست، بلکه مقصود نشان دادن پایه‌های کلاسیکی است که از روی آن بتوان قواعد کوانتس (فصل III) را در مورد یک سیستم فیزیکی به‌کار برد. بخصوص، توجه خود را به سیستمهای ذرات نقطه‌ای معطوف خواهیم داشت.

۱. مروری بر قوانین نیوتون

الف. دینامیک یک ذره نقطه‌ای

مکانیک کلاسیک غیرنسبیتی بر این فرضیه مبتنی است که لااقل یک چارچوب هندسی به نام چارچوب گالیه‌ای یا لختی وجود دارد که قانون زیر در آن معتبر است:

قانون اساسی دینامیک: یک ذره نقطه‌ای همیشه دارای شتابی برابر γ است که با برآیند F نیروهای وارد بر آن متناسب است:

$$F = m\gamma \quad (1)$$

ثابت m یک خاصیت ذاتی ذره است و جرم لختی نامیده می‌شود.

به سهولت می‌توان نشان داد که اگر یک چارچوب گالیه‌ای وجود داشته باشد، تمام چارچوبهایی که نسبت به آن حرکت انتقالی یکنواخت دارند، نیز چارچوبهای گالیه‌ای‌اند. این مطلب به اصل نسبیت گالیه‌ای منجر می‌شود: چارچوب مطلق وجود ندارد؛ هیچ آزمایشی وجود ندارد که بتواند به یک چارچوب لخت، نقشی ممتاز نسبت به سایر چارچوبها بدهد.

ب. سیستمهای ذرات نقطه‌ای

اگر با سیستمی متشکل از n ذره نقطه‌ای سروکار داشته باشیم، قانون اساسی دینامیک را در مورد

هر یک از آنها به کار می‌بریم*:

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{F}_i \quad ; \quad i = 1, 2, 3, \dots, n \quad (2)$$

نیروهای وارد بر این ذرات را می‌توان به دو دسته طبقه‌بندی کرد: نیروهای داخلی که برهم‌کنش ذرات سیستم را نشان می‌دهند، و نیروهای خارجی که از خارج سیستم نشأت می‌گیرند. به‌عنوان یک اصل موضوع قبول می‌کنیم که اصل کنش و واکنش در مورد نیروهای داخلی صادق است: نیروی وارد از ذره (i) به ذره (j) با نیروی وارد از (j) به (i) مساوی و در جهت خلاف آن است. این اصل در مورد نیروهای گرانشی (قانون نیوتون) و نیروهای الکتروستاتیکی صادق است ولی برای نیروهای مغناطیسی (که مبدأ نسبیته دارند) برقرار نیست.

اگر تمام نیروها مشتق از یک پتانسیل باشند، معادلات حرکت، (۲)، را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = -\nabla_i V \quad (3)$$

که ∇ گرادیان نسبت به مختصات \mathbf{r}_i ، و انرژی پتانسیل V به شکل زیر است:

$$V = \sum_{i=1}^n V_i(\mathbf{r}_i) + \sum_{i < j} V_{ij}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \quad (4)$$

جمله اول در این عبارت مربوط به نیروهای خارجی و جمله دوم، مربوط به نیروهای داخلی است). بنابراین، حرکت سیستم در مختصات دکارتی با $3n$ معادله دیفرانسیل زیر توصیف می‌شود:

$$\left. \begin{aligned} m_i \ddot{x}_i &= -\frac{\partial V}{\partial x_i} \\ m_i \ddot{y}_i &= -\frac{\partial V}{\partial y_i} \\ m_i \ddot{z}_i &= -\frac{\partial V}{\partial z_i} \end{aligned} \right\} i = 1, 2, \dots, n \quad (5)$$

* معمولاً در مکانیک، برای مشتق‌گیری نسبت به زمان، از نمادهای ساده‌شده استفاده می‌کنند؛ بنا بر تعریف:

$$\dot{U} = \frac{du}{dt}, \ddot{U} = \frac{d^2 U}{dt^2}, \dots$$

ج. قضایای بنیادی

ابتدا تعاریف چندی را یادآوری می‌کنیم. مرکز جرم یا گرانیگاه یک سیستم، عبارت است از نقطه G که مختصات آن از این قرارند:

$$\mathbf{r}_G = \frac{\sum_{i=1}^n m_i \mathbf{r}_i}{\sum_{i=1}^n m_i} \quad (۶)$$

انرژی جنبشی کل این سیستم برابر است با:

$$T = \sum_{i=1}^n \frac{1}{2} m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2 \quad (۷)$$

که $\dot{\mathbf{r}}_i$ سرعت ذره (i) است. تکانه زاویه‌ای نسبت به مبدأ عبارت است از بردار:

$$\mathcal{L} = \sum_{i=1}^n \mathbf{r}_i \times m_i \dot{\mathbf{r}}_i \quad (۸)$$

پس قضایای زیر را می‌توان به راحتی اثبات کرد:

۱. مرکز جرم یک سیستم، مانند ذره‌ای نقطه‌ای که جرمی برابر با جرم کل سیستم دارد و تحت تأثیر نیرویی معادل با برآیند نیروهای دخیل در سیستم است، حرکت می‌کند:

$$\left[\sum_{i=1}^n m_i \right] \ddot{\mathbf{r}}_G = \sum_{i=1}^n \mathbf{F}_i \quad (۹)$$

۲. مشتق نسبت به زمان تکانه زاویه‌ای در یک نقطه ثابت برابر است با گشتاور نیروها نسبت به این نقطه:

$$\dot{\mathcal{L}} = \sum_{i=1}^n \mathbf{r}_i \times \mathbf{F}_i \quad (۱۰)$$

۳. تغییر انرژی جنبشی بین دو لحظه t_1 و t_2 برابر است با کار انجام شده توسط مجموع نیروها در خلال حرکت بین این دو لحظه:

$$T(t_2) - T(t_1) = \int_{t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^n \mathbf{F}_i \cdot \dot{\mathbf{r}}_i dt \quad (۱۱)$$

اگر نیروهای داخلی، اصل کنش و واکنش را برقرار سازند، و اگر این نیروها در امتداد خطوط مستقیم و اصل بین ذرات برهم‌کنشی باشند، سهمشان در برآیند [معادله (۹)] و در گشتاور نسبت به مبدأ [معادله (۱۰)] صفر است. به علاوه، اگر سیستم مورد مطالعه منزوی باشد (یعنی هیچ نیروی خارجی بر آن وارد نیاید)، تکانه زاویه‌ای کل \mathcal{L} ثابت است و مرکز جرم دارای یک حرکت مستقیم‌الخط یکنواخت خواهد بود. این بدان معناست که تکانه مکانیکی کل:

$$\sum_{i=1}^n m_i \dot{\mathbf{r}}_i \quad (۱۲)$$

نیز یک ثابت حرکت است.

۲. لاگرانژی و معادلات لاگرانژ

سیستمی متشکل از n ذره را در نظر بگیرید که در آن نیروها مشتق از یک انرژی پتانسیل [فرمول (۴)] باشند، که آن را به $V(\mathbf{r}_i)$ نمایش می‌دهیم. لاگرانژی، یا تابع لاگرانژ این سیستم تابعی از $6n$ متغیر

$$\{x_i, y_i, z_i, \dot{x}_i, \dot{y}_i, \dot{z}_i; i = 1, 2, \dots, n\}$$

است که توسط رابطه زیر داده می‌شود:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\mathbf{r}_i, \dot{\mathbf{r}}_i) &= T - V \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2 - V(\mathbf{r}_i) \end{aligned} \quad (۱۳)$$

بی‌درنگ می‌توان نشان داد که معادلات حرکت (۵)، با معادلات لاگرانژ یکسان‌اند:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_i} &= 0 \\ \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{y}_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y_i} &= 0 \\ \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{z}_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial z_i} &= 0 \end{aligned} \quad (۱۴)$$

یک ویژگی بسیار مهم معادلات لاگرانژ این است که این معادلات، مستقل از نوع مختصات به کار رفته، (دکارتی یا غیر آن)، همواره دارای یک شکل‌اند. علاوه بر این، این معادلات را می‌توان در مورد سیستم‌هایی که کلی‌تر از سیستم‌های ذرات هستند، به کار برد. بسیاری از سیستم‌های فیزیکی (از جمله، به عنوان مثال، یک یا چند جسم جامد) را می‌توان در یک لحظه معین t توسط مجموعه‌ای از N پارامتر مستقل $q_i (i = 1, 2, \dots, N)$ ، به نام مختصات تعمیم‌یافته توصیف کرد. با دانستن q_i مکان هر نقطه از سیستم را در فضا می‌توان محاسبه کرد. از این رو با معین کردن N تابع نسبت به زمان $q_i(t)$ ، حرکت این سیستم مشخص می‌شود. مشتقات زمانی $\dot{q}_i(t)$ ، سرعت‌های تعمیم‌یافته نامیده می‌شوند. بنابراین، حالت سیستم در یک لحظه معین t_0 توسط مجموعه $q_i(t_0)$ و $\dot{q}_i(t_0)$ تعریف می‌شود. اگر نیروهای وارد بر سیستم از یک انرژی پتانسیل $V(q_1, q_2, \dots, q_N)$ مشتق شوند، لاگرانژی $\mathcal{L}(q_1, q_2, \dots, q_N; \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_N)$ باز برابر است با تفاضل انرژی جنبشی کل T و انرژی پتانسیل V . می‌توان نشان داد که معادلات حرکت، برای هر مختصات انتخابی q_i ، همواره به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = 0 \quad (15)$$

که d/dt معرف مشتق کامل نسبت به زمان است

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^n \dot{q}_i \frac{\partial}{\partial q_i} + \sum_{i=1}^N \ddot{q}_i \frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} \quad (16)$$

معدّلک برای اینکه بتوانیم یک لاگرانژی تعریف کنیم و معادلات لاگرانژ را به کار ببریم، واقعاً لازم نیست که نیروها مشتق از یک پتانسیل باشند (مثالی از این حالت را در بخش $b - 4$ خواهیم دید). در حالت کلی، لاگرانژی تابعی از مختصات q_i و سرعت‌های \dot{q}_i است و می‌تواند صریحاً به زمان نیز بستگی داشته باشد.* پس داریم:

$$\mathcal{L}(q_i, \dot{q}_i; t) \quad (17)$$

* لاگرانژی یکتا نیست: دو تابع $\mathcal{L}'(q_i, \dot{q}_i; t)$ و $\mathcal{L}(q_i, \dot{q}_i; t)$ ممکن است، با استفاده از (15)، به یک معادله منتهی شوند. این وضع، بخصوص، وقتی بیش می‌آید که تفاضل \mathcal{L}' و \mathcal{L} مشتق کامل نسبت به زمان یک تابع $F(q_i; t)$ باشد:

$$\mathcal{L}' - \mathcal{L} = \frac{d}{dt} F(q_i; t) \equiv \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_i \dot{q}_i \frac{\partial F}{\partial q_i}$$

معادلات لاگرانژ به دلایل متعدد در مکانیک کلاسیک اهمیت دارند. از یک سو، مطابق آنچه که گذشت، این معادلات، مستقل از مختصاتی که به کار می‌بریم، دارای یک شکل هستند. علاوه بر این، هنگامی که سیستم پیچیده است، این معادلات مناسبتر از معادلات نیوتون‌اند و بالاخره، چون این معادلات شالوده صورتبندی هامیلتونی را تشکیل می‌دهند، (رک بخش ۳ در زیر)، و از یک اصل وردشی (بخش ۵) به دست می‌آیند، از لحاظ نظری اهمیت دارند. از دیدگاه مکانیک کوانتومی، دو نکته اول در درجه دوم اهمیت قرار دارند. زیرا مکانیک کوانتومی، سیستمهای ذرات را تقریباً به طور انحصاری مطالعه می‌کند، و قواعد تنش در مختصات دکارتی بیان می‌شوند (رک فصل III بخش ۵ - B در جلد اول فارسی). ولی، نکته آخر نکته‌ای اصلی است، زیرا صورتبندی هامیلتونی، نقطه عزیمت برای کوانتس سیستمهای فیزیکی را تشکیل می‌دهد.

۳. هامیلتونی و معادلات بنیادی

برای یک سیستم فیزیکی که با N مختصه تعمیم یافته توصیف می‌شود، معادلات لاگرانژ، (۱۵)، از N معادله دیفرانسیل مرتبه دوم جفتیده را با N تابع مجهول $q_i(t)$ تشکیل می‌دهند. خواهیم دید که می‌توان این سیستم را با سیستمی از $2N$ معادله دیفرانسیل مرتبه اول با $2N$ تابع مجهول، جایگزین کرد.

الف. تکانه‌های همیوخ مختصات

تکانه همیوخ p_i مختصه تعمیم یافته q_i ، با فرمول زیر تعریف می‌شود:

$$p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \quad (18)$$

p_i را تکانه تعمیم یافته هم می‌گویند. در مورد سیستم ذراتی که برای آن نیروها مشتق از یک انرژی پتانسیل هستند، تکانه‌های همیوخ متغیرهای مکانی $\mathbf{r}_i(x_i, y_i, z_i)$ [رابطه (۱۳)]، همان تکانه‌های مکانیکی‌اند:

$$\mathbf{p}_i = m_i \dot{\mathbf{r}}_i \quad (19)$$

اما، در بخش (۴-ب-۳) خواهیم دید که در حضور یک میدان مغناطیسی این مطلب درست نیست.

از این پس، به جای تعریف حالت سیستم در یک لحظه معین t با N مختصه $q_i(t)$ و N سرعت $\dot{q}_i(t)$ آن را با $2N$ تغییر

$$\{q_i(t), p_i(t); i = 1, 2, \dots, N\} \quad (20)$$

مشخص خواهیم کرد. این برمیگردد به اینکه فرض کنیم از $2N$ پارامتر $q_i(t)$ و $p_i(t)$ می توان $\dot{q}_i(t)$ را به طور منحصر به فرد تعیین کرد.

ب. معادلات بنیادی هامیلتون-ژاکوبی
هامیلتونی کلاسیک یا تابع هامیلتون سیستم، بنا بر تعریف عبارت است از:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N p_i \dot{q}_i - \mathcal{L} \quad (21)$$

برطبق قرارداد (۲۰)، \dot{q}_i ها را حذف می کنیم و هامیلتونی را به صورت تابعی از مختصات و تکانه های همیوگ آنها در نظر می گیریم. \mathcal{H} نیز مانند \mathcal{L} می تواند صریحاً به زمان بستگی داشته باشد:

$$\mathcal{H}(q_i, p_i; t) \quad (22)$$

دیفرانسیل کامل تابع \mathcal{H} :

$$d\mathcal{H} = \sum_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} dq_i + \sum_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} dt \quad (23)$$

با استفاده از تعاریف (۲۱) و (۱۸) برابر است با:

$$\begin{aligned} d\mathcal{H} &= \sum_i [p_i dq_i + \dot{q}_i dp_i] - \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} dq_i - \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt \\ &= \sum_i \dot{q}_i dp_i - \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} dp_i - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt \end{aligned} \quad (24)$$

با مساوی قراردادن (۲۳) و (۲۴)، ملاحظه می کنیم که از تبدیل متغیرهای $\{q_i, \dot{q}_i\}$ به متغیرهای

داریم: $\{q_i, p_i\}$

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} \quad (\text{الف-۲۵})$$

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} = \dot{q}_i \quad (\text{ب-۲۵})$$

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} \quad (\text{ج-۲۵})$$

از طرف دیگر، با استفاده از (۱۸) و (الف-۲۵)، می‌توان معادلات لاگرانژ (۱۵) را به صورت زیر نوشت:

$$\frac{d}{dt} p_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \quad (۲۶)$$

با دسته‌بندی (ب-۲۵) و (۲۶)، معادلات حرکت را به صورت زیر به دست می‌آوریم:

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{dq_i}{dt} &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \\ \frac{dp_i}{dt} &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \end{aligned}} \quad (۲۷)$$

که معادلات بنیادی هامیلتون-ژاکوبی نامیده می‌شوند. همان‌طور که گفتیم، (۲۷) دستگاهی با $2N$ معادله دیفرانسیل مرتبه اول و $2N$ تابع مجهول $q_i(t)$ و $p_i(t)$ است. برای یک سیستم n ذره‌ای با انرژی پتانسیل $V(\mathbf{r}_i)$ ، بنابر (۱۳) داریم:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_{i=1}^n \mathbf{p}_i \cdot \dot{\mathbf{r}}_i - \mathcal{L} \\ &= \sum_{i=1}^n \mathbf{p}_i \cdot \dot{\mathbf{r}}_i - \frac{1}{\gamma} \sum_{i=1}^n m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2 + V(\mathbf{r}_i) \end{aligned} \quad (۲۸)$$

برای بیان هامیلتونی برحسب متغیرهای \mathbf{r}_i و \mathbf{p}_i ، از (۱۹) استفاده می‌کنیم. نتیجه می‌شود:

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i) = \sum_{i=1}^n \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + V(\mathbf{r}_i) \quad (۲۹)$$

توجه کنید که به این ترتیب، هامیلتونی برابر است با انرژی کل سیستم. معادلات بندادی:

$$\begin{aligned} \frac{dr_i}{dt} &= \frac{p_i}{m_i} \\ \frac{dp_i}{dt} &= -\nabla_i V \end{aligned} \quad (30)$$

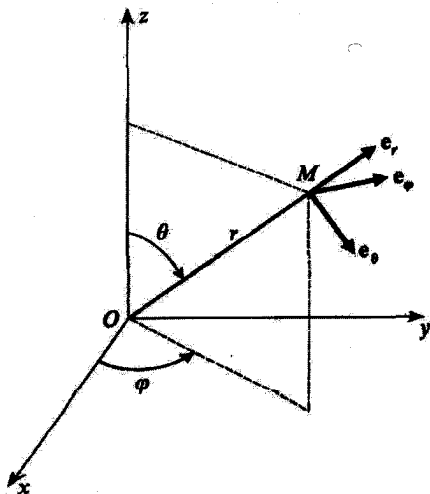
با معادلات نیوتون (۳) هم‌ارزند.

۴. مثالهایی از کاربرد صورتبندی هامیلتونی

الف. ذره‌ای در پتانسیل مرکزی

سیستمی متشکل از یک تک‌ذره به جرم m را در نظر بگیرید که انرژی پتانسیل $V(r)$ آن فقط به فاصله از مبدأ مختصات بستگی دارد. در مختصات قطبی (r, θ, φ) ، مؤلفه‌های سرعت ذره روی محورهای موضعی (شکل ۱) عبارت‌اند از:

$$\begin{aligned} v_r &= \dot{r} \\ v_\theta &= r\dot{\theta} \\ v_\varphi &= r \sin \theta \dot{\varphi} \end{aligned} \quad (31)$$



شکل ۱. بردارهای یک e_θ, e_φ, e_r و e_φ محورهای موضعی وابسته به نقطه M ، که M با مختصات کروی (r, θ, φ) آن مشخص می‌شود.

به طوری که لاگرانژی (۱۳)، را می توان به صورت زیر نوشت:

$$\mathcal{L}(r, \theta, \varphi; \dot{r}, \dot{\theta}, \dot{\varphi}) = \frac{1}{2} m \left[\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2 + r^2 \sin^2 \theta \dot{\varphi}^2 \right] - V(r) \quad (۳۲)$$

به این ترتیب، تکانه های همیوگ سه متغیر r, θ, φ را می توان به صورت زیر محاسبه کرد:

$$p_r = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} = m \dot{r} \quad (\text{الف-۳۳})$$

$$p_\theta = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\theta}} = m r^2 \dot{\theta} \quad (\text{ب-۳۳})$$

$$p_\varphi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}} = m r^2 \sin^2 \theta \dot{\varphi} \quad (\text{ج-۳۳})$$

برای به دست آوردن هامیلتونی ذره، کافی است $V(r)$ را به انرژی جنبشی که بر حسب r, θ, φ و p_r, p_θ, p_φ بیان می شود، اضافه کنیم. خواهیم داشت:

$$\mathcal{H}(r, \theta, \varphi; p_r, p_\theta, p_\varphi) = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{1}{2mr^2} \left(p_\theta^2 + \frac{p_\varphi^2}{\sin^2 \theta} \right) + V(r) \quad (۳۴)$$

دستگاه معادلات بنیادی [فرمولهای (۲۷)] را در اینجا می توان به صورت زیر نوشت:

$$\frac{dr}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_r} = \frac{p_r}{m} \quad (\text{الف-۳۵})$$

$$\frac{d\theta}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_\theta} = \frac{p_\theta}{mr^2} \quad (\text{ب-۳۵})$$

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_\varphi} = \frac{p_\varphi}{mr^2 \sin^2 \theta} \quad (\text{ج-۳۵})$$

$$\frac{dp_r}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial r} = \frac{1}{mr^3} \left(p_\theta^2 + \frac{p_\varphi^2}{\sin^2 \theta} \right) - \frac{\partial V}{\partial r} \quad (\text{د-۳۵})$$

$$\frac{dp_\theta}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \theta} = \frac{p_\varphi^2 \cos \theta}{mr^2 \sin^3 \theta} \quad (\text{ه-۳۵})$$

$$\frac{dp_\varphi}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \varphi} = 0 \quad (\text{و-۳۵})$$

سه معادله اول این معادلات، به سادگی (۳۳) را می دهند؛ سه معادله آخر هم همان معادلات واقعی حرکت اند.

حال تکانه زاویه‌ای ذره را نسبت به مبدأ در نظر می گیریم:

$$\mathcal{L} = \mathbf{r} \times m\mathbf{v} \quad (36)$$

مؤلفه‌های موضعی \mathcal{L} را می توان به آسانی از (۳۱) محاسبه کرد:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_r &= 0 \\ \mathcal{L}_\theta &= -mr\dot{\varphi} = -mr^2 \sin\theta \dot{\varphi} = -\frac{p_\varphi}{\sin\theta} \\ \mathcal{L}_\varphi &= mr\dot{\theta} = mr^2 \dot{\theta} = p_\theta \end{aligned} \quad (37)$$

به طوری که:

$$\mathcal{L}^2 = p_\theta^2 + \frac{p_\varphi^2}{\sin^2\theta} \quad (38)$$

بنابر قضیه تکانه زاویه‌ای [فرمول (۱۰)]، می دانیم که \mathcal{L} نسبت به زمان برداری ثابت است، زیرا نیرو که مشتق از پتانسیل $V(r)$ است، مرکزی است، یعنی در هر لحظه با بردار \mathbf{r} همراستاست. با مقایسه (۳۴) و (۳۸)، مشاهده می کنیم که هامیلتونی \mathcal{H} فقط از طریق \mathcal{L}^2 به متغیرهای زاویه‌ای و تکانه‌های همیوگ آنها بستگی دارد:

$$\mathcal{H}(r, \theta, \varphi; p_r, p_\theta, p_\varphi) = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{1}{2mr^2} \mathcal{L}^2(\theta, p_\theta, p_\varphi) + V(r) \quad (39)$$

حال فرض می کنیم که تکانه زاویه‌ای اولیه ذره \mathcal{L} باشد. چون تکانه زاویه‌ای ثابت می ماند، هامیلتونی (۳۹) و معادله حرکت (۳۵-د) مانند معادلات مربوط به ذره‌ای به جرم m در یک مسأله تک بعدی، که در پتانسیل مؤثر

$$V_{\text{مؤثر}}(r) = V(r) + \frac{\mathcal{L}^2}{2mr^2} \quad (40)$$

قرار گرفته است، خواهند بود.

* این نتیجه را می توان از (۳۵-ه) و (۳۵-و)، با محاسبه مشتق زمانی مؤلفه‌های \mathcal{L} بر روی محوره‌های ثابت Ox, Oy به دست آورد.

ب. ذره باردار واقع در یک میدان الکترومغناطیسی حال، ذره‌ای به جرم m و بار q را در نظر بگیرید که در یک میدان الکترومغناطیسی، که با بردار میدان الکتریکی $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ و بردار میدان مغناطیسی $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ مشخص می‌شود، قرار گرفته است.

۱. توصیف میدان الکترومغناطیسی. پیمانه‌ها $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ و $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ در معادلات ماکسول صدق می‌کنند.

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (\text{الف-۴۱})$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (\text{ب-۴۱})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (\text{ج-۴۱})$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j} + \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (\text{د-۴۱})$$

که $\rho(\mathbf{r}, t)$ و $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ چگالی بار حجمی و چگالی جریان‌اند که میدان الکترومغناطیسی را ایجاد می‌کنند. میدانهای \mathbf{E} و \mathbf{B} را می‌توان با یک پتانسیل اسکالر $U(\mathbf{r}, t)$ و یک پتانسیل برداری $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ توصیف کرد، زیرا معادله (ج-۴۱) حاکی از آن است که یک میدان برداری وجود دارد که:

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (۴۲)$$

لذا (ب-۴۱) را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\nabla \times \left[\mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right] = 0 \quad (۴۳)$$

در نتیجه، تابع اسکالری مانند $U(\mathbf{r}, t)$ وجود دارد، به طوری که:

$$\mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\nabla U(\mathbf{r}, t) \quad (۴۴)$$

پتانسیلهای $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ و $U(\mathbf{r}, t)$ مجموعه‌ای را تشکیل می‌دهند که آن را پیمانه توصیف میدان الکترومغناطیسی، می‌نامیم. میدانهای الکتریکی و مغناطیسی را می‌توان از پیمانه $\{\mathbf{A}, U\}$ ، توسط

روابط زیر محاسبه کرد:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (۴۵\text{-الف})$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla U(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (۴۵\text{-ب})$$

یک میدان الکترومغناطیسی مفروض، یعنی، یک زوج میدان $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ و $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ را می‌توان با پیمانه‌های بی‌شمار توصیف کرد، که، به‌این دلیل، آنها را معادل می‌گوییم. اگر یکی از این پیمانه‌ها، $\{\mathbf{A}, U\}$ ، که میدانهای \mathbf{E} و \mathbf{B} را می‌دهد، بشناسیم، تمام پیمانه‌های معادل، $\{\mathbf{A}', U'\}$ ، را می‌توانیم از فرمولهای تبدیل پیمانه بیابیم:

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \nabla \chi(\mathbf{r}, t) \quad (۴۶\text{-الف})$$

$$U'(\mathbf{r}, t) = U(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \chi(\mathbf{r}, t) \quad (۴۶\text{-ب})$$

که $\chi(\mathbf{r}, t)$ یک تابع اسکالر دلخواه است.

قبل از هر چیز، می‌توان به‌آسانی از (۴۶) نشان داد که:

$$\begin{cases} \nabla \times \mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \\ -\nabla U'(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) = -\nabla U(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \end{cases} \quad (۴۷)$$

بنابراین، هر پیمانه، $\{\mathbf{A}', U'\}$ ، که در (۴۶) صدق کند همان میدانهای الکتریکی و مغناطیسی‌ای را می‌دهد که $\{\mathbf{A}, U\}$ می‌دهد.

برعکس، نشان خواهیم داد که اگر دو پیمانه $\{\mathbf{A}, U\}$ و $\{\mathbf{A}', U'\}$ معادل باشند، باید یک تابع $\chi(\mathbf{r}, t)$ وجود داشته باشد که روابط (۴۶) را بین آنها برقرار سازد. چون بنابه فرض:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) \quad (۴۸)$$

داریم:

$$\nabla \times (\mathbf{A}' - \mathbf{A}) = \mathbf{0} \quad (۴۹)$$

این رابطه حاکی از آن است که $\mathbf{A}' - \mathbf{A}$ ، گرادیان یک تابع اسکالر است:

$$\mathbf{A}' - \mathbf{A} = \nabla \chi(\mathbf{r}, t) \quad (۵۰)$$

$\chi(\mathbf{r}, t)$ ، فعلاً فقط با تقریب تابعی دلخواه از t ، $f(t)$ ، تعیین شده است. به علاوه، این واقعیت که دو پیمانه معادلند، بدین معنی است که:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla U(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = -\nabla U'(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) \quad (51)$$

یعنی:

$$\nabla(U' - U) + \frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{A}' - \mathbf{A}) = 0 \quad (52)$$

بنابر (۵۰)، باید داشته باشیم

$$\nabla(U' - U) = -\nabla \frac{\partial}{\partial t} \chi(\mathbf{r}, t) \quad (53)$$

در نتیجه، توابع $U' - U$ و $-\partial/\partial t \chi(\mathbf{r}, t)$ می‌توانند فقط در تابعی از t اختلاف داشته باشند؛ بنابراین، $f(t)$ را می‌توانیم طوری انتخاب کنیم که آنها را برابر سازد:

$$U' - U = -\frac{\partial}{\partial t} \chi(\mathbf{r}, t) \quad (54)$$

این امر، تعیین تابع $\chi(\mathbf{r}, t)$ را (با تقریب یک ثابت جمع‌پذیر) کامل می‌کند. از این رو دو پیمانه معادل، باید در روابطی به شکل (۴۶) صدق کنند.

۲. معادلات حرکت و لاگرنژی

ذره باردار، در میدان الکترومغناطیسی، تحت تأثیر نیروی لورنتس:

$$\mathbf{F} = q[\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}] \quad (55)$$

قرارداد (که در آن \mathbf{v} سرعت ذره در زمان t است). بنابراین، قانون نیوتون معادلات حرکت را به صورت زیر به دست می‌دهد:

$$m\ddot{\mathbf{r}} = q[\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)] \quad (56)$$

با تصویر کردن این معادله روی محور Ox و استفاده از (۴۵)، به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} m\ddot{x} &= q[E_x + \dot{y}B_z - \dot{z}B_y] \\ &= q \left[-\frac{\partial U}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial t} + \dot{y} \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) - \dot{z} \left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) \right] \quad (57) \end{aligned}$$

به آسانی می‌توان نشان داد که این معادلات را می‌توان، با به‌کار بردن (۱۵)، از لاگرانژی زیر به‌دست آورد:

$$\mathcal{L}(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t) = \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{r}}^2 + q \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) - qU(\mathbf{r}, t) \quad (58)$$

بنابراین، با وجود اینکه نیروی لورنتس از یک انرژی پتانسیل مشتق نشده است، می‌توانیم یک لاگرانژی برای این مسأله بیابیم.

حال نشان می‌دهیم که معادلات لاگرانژ (۱۵)، با استفاده از لاگرانژی (۵۸)، همان معادلات حرکت (۵۶) را به‌دست می‌دهند. برای این منظور، ابتدا محاسبهٔ زیر را انجام می‌دهیم:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} &= m\dot{x} + qA_x(\mathbf{r}, t) \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} &= q\dot{\mathbf{r}} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) - q \frac{\partial}{\partial x} U(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (59)$$

بنابراین، معادلهٔ لاگرانژ برای مختصهٔ x را می‌توان به‌صورت زیر نوشت:

$$\frac{d}{dt} [m\dot{x} + qA_x(\mathbf{r}, t)] - q\dot{\mathbf{r}} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + q \frac{\partial}{\partial x} U(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (60)$$

با نوشتن این معادله به‌طور صریح، و بهره‌گیری از (۱۶)، مجدداً به عبارت (۵۷) می‌رسیم:

$$\begin{aligned} m\ddot{x} + q \left[\frac{\partial A_x}{\partial t} + \dot{x} \frac{\partial A_x}{\partial x} + \dot{y} \frac{\partial A_x}{\partial y} + \dot{z} \frac{\partial A_x}{\partial z} \right] \\ - q \left[\dot{x} \frac{\partial A_x}{\partial x} + \dot{y} \frac{\partial A_y}{\partial x} + \dot{z} \frac{\partial A_z}{\partial x} \right] + q \frac{\partial U}{\partial x} = 0 \end{aligned} \quad (61)$$

یعنی:

$$m\ddot{x} = q \left[-\frac{\partial U}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial t} + \dot{y} \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) - \dot{z} \left(\frac{\partial A_z}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial z} \right) \right] \quad (62)$$

۳. تکانه. هامیلتونی کلاسیک

لاگرانژی (۵۸) ما را قادر می‌سازد تا تکانه‌های همیوگ مختصات دکارتی x ، y ، z ذره را محاسبه کنیم. مثلاً:

$$p_x = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} + qA_x(\mathbf{r}, t) \quad (63)$$

تکانه ذره، که بنابر تعریف، برداری با مؤلفه‌های (p_x, p_y, p_z) است، دیگر مانند (۱۹)، با تکانه مکانیکی $m\dot{\mathbf{r}}$ برابر نیست:

$$\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{r}} + q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (۶۴)$$

بالاخره، هامیلتونی کلاسیک زیر را خواهیم نوشت:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) &= \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{r}} - \mathcal{L} \\ &= \mathbf{p} \cdot \frac{1}{m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A}) - \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 - \frac{q}{m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A}) \cdot \mathbf{A} + qU \end{aligned} \quad (۶۵)$$

یعنی:

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = \frac{1}{2m}[\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)]^2 + qU(\mathbf{r}, t) \quad (۶۶)$$

یادداشت:

بنابراین، صورتبندی هامیلتونی، میدانهای \mathbf{E} و \mathbf{B} را مستقیماً مورد استفاده قرار نمی‌دهد بلکه از پتانسیلهای \mathbf{A} و U استفاده می‌کند. نتیجه این است که، توصیف ذره به پیمانه انتخابی بستگی دارد. معذالک، چون نیروی لورنتس برحسب میدانهای \mathbf{E} و \mathbf{B} بیان می‌شود، معقول است که انتظار داشته باشیم که پیش‌بینیهای مربوط به رفتار فیزیکی ذره، برای دو پیمانه هم‌ارز، یکی باشند. اصطلاحاً گفته می‌شود که پی‌آمدهای فیزیکی صورتبندی هامیلتونی، ناوردای پیمانه‌ای‌اند. مفهوم ناوردایی پیمانه‌ای را در مکمل H_{III} در جلد اول فارسی به تفصیل، تحلیل کرده‌ایم.

۵. اصل کمترین کنش

مکانیک کلاسیک، می‌تواند مبتنی بر یک اصل وردشی، اصل کمترین کنش، باشد. موضوع کنش، علاوه بر اهمیت نظری آن، به‌عنوان بنیاد فرمولبندی لاگرانژی مکانیک کوانتومی (مکمل J_{III} در جلد اول فارسی را ببینید) به‌کار گرفته می‌شود. به این جهت، اکنون اصل کمترین کنش را به‌اختصار مورد بحث قرار داده و نشان می‌دهیم که چگونه این اصل ما را به معادلات لاگرانژ هدایت می‌کند.

الف. نمایش هندسی حرکت یک سیستم

ابتدا، ذره‌ای را در نظر بگیرید که مقید به حرکت در امتداد محور Ox است. حرکت این ذره را می‌توان با ردیابی منحنی تعریف شده توسط قانون حرکت که $x(t)$ را به دست می‌دهد، در صفحه (x, t) ، نمایش داد. به‌طور کلیتر، سیستمی فیزیکی را مطالعه می‌کنیم که با N مختصهٔ تعمیم‌یافتهٔ q_i توصیف می‌شود (برای یک سیستم n ذره‌ای در فضای سه‌بعدی، $N = 3n$). بهتر است که q_i ها را به‌عنوان مختصات نقطه‌ای مانند Q در فضای اقلیدسی N بعدی، R_N ، تغییر کنیم. در این صورت، بین مواضع سیستم و نقاط R_N تناظری یک به یک وجود دارد. با هر حرکت سیستم، یک حرکت از نقطهٔ Q در R_N وابسته است، که یا تابع برداری N بعدی $Q(t)$ که مؤلفه‌های آن $q_i(t)$ هستند، مشخص می‌شود. مانند مورد سادهٔ یک ذرهٔ منفرد که در یک بعد حرکت می‌کند، حرکت نقطهٔ Q ، یعنی، حرکت سیستم، را می‌توان توسط نمودار $Q(t)$ ، که منحنی‌ای در فضا-زمان $(N + 1)$ بعدی است (محور زمان به N بعد R_N افزوده می‌شود)، نمایش داد. این منحنی، حرکت مورد مطالعه را مشخص می‌کند.

ب. اصل کمترین کنش

$q_i(t)$ را می‌توان به دلخواه مشخص کرد؛ به این ترتیب، نقطهٔ Q و سیستم حرکتی دلخواه می‌یابد. اما رفتار حقیقی آنها توسط شرایط اولیه و معادلات حرکت تعریف می‌شود. فرض کنید می‌دانیم که، در خلال حرکت واقعی، (همان طوری که به‌طور طرح‌وار در شکل ۲ نشان داده‌ایم)، Q در زمان t_1 در Q_1 و در زمان بعدی t_2 در Q_2 است (شکل ۲ را ببینید):

$$\begin{aligned} Q(t_1) &= Q_1 \\ Q(t_2) &= Q_2 \end{aligned} \quad (67)$$

بینهایت حرکت ممکن پیشینی وجود دارند که در شرایط (۶۷) صدق می‌کنند. این حرکتها، توسط تمام منحنیها،* یا مسیرهایی در فضا-زمان که نقاط (Q_1, t_1) و (Q_2, t_2) را بهم متصل می‌کنند (شکل ۲) نشان داده می‌شوند.

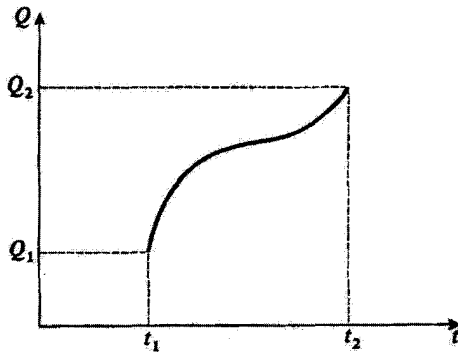
مسیر Γ را در جاسگاه در نظر بگیرید، و فرض کنید که این مسیر توسط تابع برداری $Q(t)$ که در (۶۷) صدق می‌کند، مشخص می‌شود، اگر:

$$\mathcal{L}(q_1, q_2, \dots, q_N; \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_N; t) \equiv \mathcal{L}(Q, \dot{Q}; t) \quad (68)$$

لاگرانژی سیستم باشد، کنش S_Γ که با مسیر Γ متناظر است، بنا بر تعریف عبارت است از:

$$S_\Gamma = \int_{t_1}^{t_2} dt \mathcal{L}[Q_\Gamma(t), \dot{Q}_\Gamma(t); t] \quad (69)$$

* البته، به‌استثناء منحنیهایی که "بعقب برمی‌گردند" یعنی، آنهایی که به‌ازاء یک زمان معین t ، دو نقطهٔ متمایز Q را می‌دهند.



شکل ۲. مسیر وابسته به یک حرکت مفروض از سیستم فیزیکی در جلگاه. محور x معرف زمان و "محور Q " معرف Q است (که مجموعه مختصات تعمیم یافته q_i را نمایش می دهد).

[تابعی که باید از آن انتگرال گرفت فقط به t بستگی دارد؛ این تابع از جایگزین کردن q_i و \dot{q}_i توسط مختصات وابسته به زمان $Q_F(t)$ و $\dot{Q}_F(t)$ ، در لاگرانژی (۶۸) به دست می آید].

در این صورت، اصل کمترین کنش را می توان به طریق زیر بیان کرد: از تمام مسیرهایی که در فضا-زمان، (Q_1, t_1) و (Q_2, t_2) متصل می کنند، مسیری که عملاً طی می شود (یعنی، مسیری که حرکت واقعی سیستم را مشخص می کند) مسیری است که برای آن کنش، کمترین مقدار را دارد. به عبارت دیگر، وقتی از مسیری که عملاً طی می شود به مسیری که بینهایت به آن نزدیک است برویم، کنش، تا مرتبه اول، تغییری نمی کند. به پایستگی این اصل با سایر اصول وردشی، نظیر اصل فرما در اپتیک، توجه کنید.

ج. معادلات لاگرانژ به عنوان پیامدی از اصل کمترین کنش

در خاتمه، نشان می دهیم که چگونه می توانیم معادلات لاگرانژ را از اصل کمترین کنش به دست آوریم. فرض کنید که حرکت واقعی سیستم مورد نظر، با N تابع $q_i(t)$ ، یعنی توسط مسیر اصلی نقاط (Q_1, t_1) و (Q_2, t_2) در فضا-زمان Γ مشخص شده باشد. حال یک مسیر دیگر Γ' را در نظر بگیرید که بینهایت به آن نزدیک است (شکل ۳)، و مختصات تعمیم یافته آن عبارت اند از:

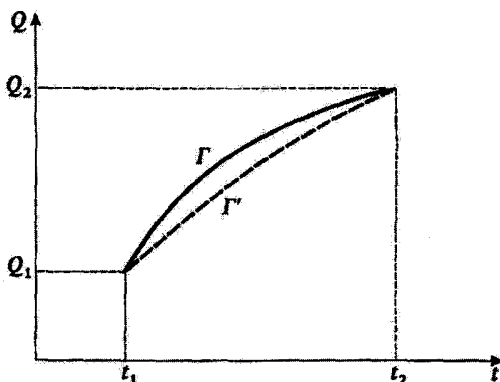
$$\dot{q}'_i(t) = \dot{q}_i(t) + \delta q_i(t) \quad (70)$$

که $\delta q_i(t)$ بینهایت کوچک اند و در شرایط (۶۷) صدق می کنند، یعنی:

$$\delta q_i(t_1) = \delta q_i(t_2) = 0 \quad (71)$$

سرعت های تعمیم یافته $\dot{q}'_i(t)$ متناظر با Γ' را می توان با مشتق گیری از روابط (۷۰) به دست آورد:

$$\dot{q}'_i(t) = \dot{q}_i(t) + \frac{d}{dt} \delta q_i(t) \quad (72)$$



شکل ۳. دو مسیر جلگه، که از نقاط (Q_1, t_1) و (Q_2, t_2) می‌گذرند: منحنی خطیر مسیر وابسته به حرکت واقعی سیستم، و منحنی خط چین یک مسیر دیگر بینهایت نزدیک به آن است.

بنابراین، نوهای $\delta \dot{q}_i(t)$ عبارت‌اند از:

$$\delta \dot{q}_i(t) = \frac{d}{dt} \delta q_i(t) \quad (۷۳)$$

حال، بنابر (۷۳)، وردش کنش را هنگام رفتن از مسیر Γ به مسیر Γ' محاسبه می‌کنیم:

$$\begin{aligned} \delta S &= \int_{t_1}^{t_2} dt \delta \mathcal{L} \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} \delta q_i + \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \delta \dot{q}_i \right] \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} \delta q_i + \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \frac{d}{dt} \delta q_i \right] \end{aligned} \quad (۷۴)$$

اگر از جمله دوم به روش جزء به جزء انتگرال بگیریم، به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} \delta S &= \left[\sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \delta q_i \right]_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_i \delta q_i \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \right] \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_i \delta q_i \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \right] \end{aligned} \quad (۷۵)$$

زیرا، به خاطر شرایط (۷۱)، جمله انتگرال گرفته شده صفر است.

اگر Γ مسیری در فضا-زمان باشد که عملاً در خلال حرکت واقعی سیستم طی می‌شود، بنابر اصل کمترین کنش، نوکنش، δS ، صفر است. بدین منظور، شرط لازم و کافی این است که:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = 0 \quad ; \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (۷۶)$$

بدیهی است که این شرط کافی است. این شرط لازم نیز هست. زیرا، اگر فاصله زمانی وجود می‌داشت که در خلال آن عبارت (۷۶) به‌ازاء یک مقدار مفروض k از شاخص i ، غیرصفر می‌بود، $\delta q_i(t)$ را می‌توانستیم طوری انتخاب کنیم که نمود δS مربوطه را مخالف صفر بسازد. (مثلاً کافی بود که، آنها را طوری انتخاب می‌کردیم که حاصلضرب $\delta q_k [\partial \mathcal{L} / \partial q_k - d/dt \partial \mathcal{L} / \partial \dot{q}_k]$ همواره مثبت یا صفر باشد). در نتیجه، اصل کمترین کنش، با معادلات لاگرانژ هم‌ارز است.

مراجع و پیشنهادات برای مطالعه بیشتر

رجوع کنید به بخش ۶ کتابشناسی، بخصوص:

in particular Marion (6.4), Goldstein (6.6) Landau and Lifshitz (6.7).

برای یک ارائه ساده از کاربرد اصول وردشی در فیزیک به مأخذ زیر مراجعه کنید:

For a simple presentation of the use of variational principles in physics, see Feynman II(7.2), chap. 19.

برای صورتبندی لاگرانژی که به یک میدان کلاسیک اعمال شده است به مأخذ زیر مراجعه کنید:

For Lagrangian formalism applied to a classical field, see Bogoliubov and Chirkov (2.15), chap.I.

کتابنامه

۱. مکانیک کوانتومی: مراجع عمومی کتابهای مقدماتی فیزیک کوانتومی

- (1.1) E. H. WICHMANN, *Berkeley Physics Course, Vol. 4: Quantum Physics*, McGraw-Hill, New York (1971).
- (1.2) R. P. FEYNMAN, R. B. LEIGHTON and M. SANDS, *The Feynman Lectures on Physics, Vol. III: Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1965).
- (1.3) R. EISBERG and R. RESNICK, *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei and Particles*, Wiley, New York (1974).
- (1.4) M. ALONSO and E. J. FINN, *Fundamental University Physics, Vol. III: Quantum and Statistical Physics*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1968).
- (1.5) U. FANO and L. FANO, *Basic Physics of Atoms and Molecules*, Wiley, New York (1959).
- (1.6) J. C. SLATER, *Quantum Theory of Matter*, McGraw-Hill, New York (1968).

مکانیک کوانتومی

- (1.7) S. BOROWITZ, *Fundamentals of Quantum Mechanics*, Benjamin, New York (1967).
- (1.8) S. I. TOMONAGA, *Quantum Mechanics, Vol. 1: Old Quantum Theory*, North Holland, Amsterdam (1962).
- (1.9) L. PAULING and E. B. WILSON JR., *Introduction to Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, New York (1935).
- (1.10) Y. AYANT et E. BELORIZKY, *Cours de Mécanique Quantique*, Dunod, Paris (1969).
- (1.11) P. T. MATTHEWS, *Introduction to Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, New York (1963).
- (1.12) J. AVERY, *The Quantum Theory of Atoms, Molecules and Photons*, McGraw-Hill, London (1972).

کتابهای پیشرفته‌تر

- (1.13) P. A. M. DIRAC, *The Principles of Quantum Mechanics*, Oxford University Press (1958).
- (1.14) R. H. DICKE and J. P. WITTKE, *Introduction to Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1966).
- (1.15) D. I. BLOKHINTSEV, *Quantum Mechanics*, D. Reidel, Dordrecht (1964).
- (1.16) E. MERZBACHER, *Quantum Mechanics*, Wiley, New York (1970).

- (1.17) A. MESSIAH, *Mécanique Quantique*, Vols 1 and 2, Dunod, Paris (1964). English translation : *Quantum Mechanics*, North Holland, Amsterdam (1961).
- (1.18) L. I. SCHIFF, *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, New York (1968).
- (1.19) L. D. LANDAU and E. M. LIFSHITZ, *Quantum Mechanics, Nonrelativistic Theory*, Pergamon Press, Oxford (1965).
- (1.20) A. S. DAVYDOV, *Quantum Mechanics*, Translated, edited and with additions by D. Ter HAAR, Pergamon Press, Oxford (1965).
- (1.21) H. A. BETHE and R. W. JACKIW, *Intermediate Quantum Mechanics*, Benjamin, New York (1968).
- (1.22) H. A. KRAMERS, *Quantum Mechanics*, North Holland, Amsterdam (1958).

مسائل در مکانیک کوانتومی

- (1.23) *Selected Problems in Quantum Mechanics*, Collected and edited by D. Ter HAAR, Infosearch, London (1964).
- (1.24) S. FLÜGGE, *Practical Quantum Mechanics*, I and II, Springer-Verlag, Berlin (1971).

مقالات

- (1.25) E. SCHRÖDINGER, "What is Matter?", *Scientific American*, **189**, 52 (Sept. 1953).
- (1.26) G. GAMOW, "The Principle of Uncertainty", *Scientific American*, **198**, 51 (Jan. 1958).
- (1.27) G. GAMOW, "The Exclusion Principle", *Scientific American*, **201**, 74 (July 1959).
- (1.28) M. BORN and W. BIEM, "Dualism in Quantum Theory", *Physics Today*, **21**, p. 51 (Aug. 1968).
- (1.29) W. E. LAMB JR., "An Operational Interpretation of Nonrelativistic Quantum Mechanics", *Physics Today*, **22**, 23 (April 1969).
- (1.30) M. O. SCULLY and M. SARGENT III, "The Concept of the Photon", *Physics Today*, **25**, 38 (March 1972).
- (1.31) A. EINSTEIN, "Zur Quantentheorie der Strahlung", *Physik. Z.*, **18**, 121 (1917).
- (1.32) A. GOLDBERG, H. M. SCHEY and J. L. SCHWARTZ, "Computer-Generated Motion Pictures of One-Dimensional Quantum-Mechanical Transmission and Reflection Phenomena", *Am. J. Phys.*, **35**, 177 (1967).
- (1.33) R. P. FEYNMAN, F. L. VERNON JR. and R. W. HELLWARTH, "Geometrical Representation of the Schrödinger Equation for Solving Maser Problems", *J. Appl. Phys.*, **28**, 49 (1957).
- (1.34) A. A. VUYLSTEKE, "Maser States in Ammonia-Inversion", *Am. J. Phys.*, **27**, 554 (1959).

۲. مکانیک کوانتومی: مراجع تخصصی تر

برخوردها

- (2.1) T. Y. WU and T. OHMURA, *Quantum Theory of Scattering*, Prentice Hall, Englewood Cliffs (1962).
- (2.2) R. G. NEWTON, *Scattering Theory of Waves and Particles*, McGraw-Hill, New York (1966).
- (2.3) P. ROMAN, *Advanced Quantum Theory*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1965).
- (2.4) M. L. GOLDBERGER and K. M. WATSON, *Collision Theory*, Wiley, New York (1964).
- (2.5) N. F. MOTT and H. S. W. MASSEY, *The Theory of Atomic Collisions*, Oxford University Press (1965).

مکانیک کوانتومی نسبیتی

- (2.6) J. D. BJORKEN and S. D. DRELL, *Relativistic Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, New York (1964).
- (2.7) J. J. SAKURAI, *Advanced Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1967).
- (2.8) V. B. BERESTETSKII, E. M. LIFSHITZ and L. P. PITAEVSKII, *Relativistic Quantum Theory*, Pergamon Press, Oxford (1971).

نظریه میدانها. الکترودینامیک کوانتومی

- (2.9) F. MANDL, *Introduction to Quantum Field Theory*, Wiley Interscience, New York (1959).
- (2.10) J. D. BJORKEN and S. D. DRELL, *Relativistic Quantum Fields*, McGraw-Hill, New York (1965).
- (2.11) E. A. POWER, *Introductory Quantum Electrodynamics*, Longmans, London (1964).
- (2.12) R. P. FEYNMAN, *Quantum Electrodynamics*, Benjamin, New York (1961).
- (2.13) W. HEITLER, *The Quantum Theory of Radiation*, Clarendon Press, Oxford (1954).
- (2.14) A. I. AKHIEZER and V. B. BERESTETSKII, *Quantum Electrodynamics*, Wiley Interscience, New York (1965).
- (2.15) N. N. BOGOLIUBOV and D. V. SHIRKOV, *Introduction to the Theory of Quantized Fields*, Interscience Publishers, New York (1959); *Introduction à la Théorie des Champs*, Dunod, Paris (1960).
- (2.16) S. S. SCHWEBER, *An Introduction to Relativistic Quantum Field Theory*, Harper and Row, New York (1961).
- (2.17) M. M. STERNHEIM, "Resource Letter TQE-1: Tests of Quantum Electrodynamics", *Am. J. Phys.*, **40**, 1363 (1972).

دورانها و نظریه گروه

- (2.18) P. H. E. MEIJER and E. BAUER, *Group Theory*, North Holland, Amsterdam (1962).
- (2.19) M. E. ROSE, *Elementary Theory of Angular Momentum*, Wiley, New York (1957).
- (2.20) M. E. ROSE, *Multipole Fields*, Wiley, New York (1955).
- (2.21) A. R. EDMONDS, *Angular Momentum in Quantum Mechanics*, Princeton University Press (1957).
- (2.22) M. TINKHAM, *Group Theory and Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, New York (1964).
- (2.23) E. P. WIGNER, *Group Theory and its Application to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra*, Academic Press, New York (1959).
- (2.24) D. PARK, "Resource Letter SP-I on Symmetry in Physics", *Am. J. Phys.*, **36**, 577 (1968).

مستقره

- (2.25) R. P. FEYNMAN and A. R. HIBBS, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York (1965).
- (2.26) J. M. ZIMAN, *Elements of Advanced Quantum Theory*, Cambridge University Press (1969).
- (2.27) F. A. KAEMPFER, *Concepts in Quantum Mechanics*, Academic Press, New York (1965).

مقالات

- (2.28) P. MORRISON, "The Overthrow of Parity", *Scientific American*, **196**, 45 (April 1957).
- (2.29) G. FEINBERG and M. GOLDHABER, "The Conservation Laws of Physics", *Scientific American*, **209**, 36 (Oct. 1963).

- (2.30) E. P. WIGNER, "Violations of Symmetry in Physics", *Scientific American*, **213**, 28 (Dec. 1965).
- (2.31) U. FANO, "Description of States in Quantum Mechanics by Density Matrix and Operator Techniques", *Rev. Mod. Phys.*, **29**, 74 (1957).
- (2.32) D. TER HAAR, "Theory and Applications of the Density Matrix", *Rept. Progr. Phys.*, **24**, 304 (1961).
- (2.33) V. F. WEISSKOPF and E. WIGNER, "Berechnung der Natürlichen Linienbreite auf Grund der Diracschen Lichttheorie", *Z. Physik*, **63**, 54 (1930).
- (2.34) A. DALGARNO and J. T. LEWIS, "The Exact Calculation of Long-Range Forces between Atoms by Perturbation Theory", *Proc. Roy. Soc.*, **A 233**, 70 (1955).
- (2.35) A. DALGARNO and A. L. STEWART, "On the Perturbation Theory of Small Disturbances", *Proc. Roy. Soc.*, **A 238**, 269 (1957).
- (2.36) C. SCHWARTZ, "Calculations in Schrödinger Perturbation Theory", *Annals of Physics* (New York), **6**, 156 (1959).
- (2.37) J. O. HIRSCHFELDER, W. BYERS BROWN and S. T. EPSTEIN, "Recent Developments in Perturbation Theory", in *Advances in Quantum Chemistry*, P. O. LOWDIN ed., Vol. I, Academic Press, New York (1964).
- (2.38) R. P. FEYNMAN, "Space Time Approach to Nonrelativistic Quantum Mechanics", *Rev. Mod. Phys.*, **20**, 367 (1948).
- (2.39) L. VAN HOVE, "Correlations in Space and Time and Born Approximation Scattering in Systems of Interacting Particles", *Phys. Rev.*, **95**, 249 (1954).

۳. مکانیک کوانتومی: آزمایشهای بنیادی

اثرات تداخل با نور ضعیف

- (3.1) G. I. TAYLOR, "Interference Fringes with Feeble Light", *Proc. Camb. Phil. Soc.*, **15**, 114 (1909).
- (3.2) G. T. REYNOLDS, K. SPARTALIAN and D. B. SCARL, "Interference Effects Produced by Single Photons", *Nuovo Cimento*, **61 B**, 355 (1969).

بررسی تجربی قانون اینشتین برای اثر فوتوالکترونیک؛ اندازه‌گیری h

- (3.3) A. L. HUGHES, "On the Emission Velocities of Photoelectrons", *Phil. Trans. Roy. Soc.*, **212**, 205 (1912).
- (3.4) R. A. MILLIKAN, "A Direct Photoelectric Determination of Planck's h ", *Phys. Rev.* **7**, 355 (1916).

آزمایش فرانک-هرتز

- (3.5) J. FRANCK und G. HERTZ, "Über Zusammenstöße Zwischen Elektronen und den Molekülen des Quecksilberdampfes und die Ionisierungsspannung desselben", *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, **16**, 457 (1914).
"Über Kinetik von Elektronen und Ionen in Gasen", *Physikalische Zeitschrift*, **17**, 409 (1916).

تناسب بین گشتاور مغناطیسی و تکانه زاویه‌ای

- (3.6) A. EINSTEIN und J. W. DE HAAS, "Experimenteller Nachweis der Ampereschen Molekularströme", *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, **17**, 152 (1915).

(3.7) E. BECK, "Zum Experimentellen Nachweis der Ampereschen Molekularströme", *Annalen der Physik* (Leipzig), **60**, 109 (1919).

آزمایش اشترن-گرلاخ

(3.8) W. GERLACH und O. STERN, "Der Experimentelle Nachweis der Richtungsquantelung im Magnetfeld", *Zeitschrift für Physik*, **9**, 349 (1922).

اثر کامپتون

(3.9) A. H. COMPTON, "A Quantum Theory of the Scattering of X-Rays by Light Elements", *Phys. Rev.*, **21**, 483 (1923).

"Wavelength Measurements of Scattered X-Rays", *Phys. Rev.*, **21**, 715 (1923).

پراش الکترون

(3.10) C. DAVISSON and L. H. GERMER, "Diffraction of Electrons by a Crystal of Nickel", *Phys. Rev.*, **30**, 705 (1927).

تغییر مکان لمب

(3.11) W. E. LAMB JR. and R. C. RETHERFORD, "Fine Structure of the Hydrogen Atom", I - *Phys. Rev.*, **79**, 549 (1950),

II - *Phys. Rev.*, **81**, 222 (1951).

ساختار ظریف حالت پایه هیدروژن

(3.12) S. B. CRAMPTON, D. KLEPPNER and N. F. RAMSEY, "Hyperfine Separation of Ground State Atomic Hydrogen", *Phys. Rev. Letters*, **11**, 338 (1963).

آزمایشهای متعدد بنیادی در مقاله زیر توضیح داده شده‌اند:

(3.13) O. R. FRISCH, "Molecular Beams", *Scientific American*, **212**, 58 (May 1965).

۴. مکانیک کوانتومی: سرگذشت

(4.1) L. DE BROGLIE, "Recherches sur la Théorie des Quanta", *Annales de Physique*, **3**, 22, Paris (1925).

(4.2) N. BOHR, "The Solvay Meetings and the Development of Quantum Mechanics", *Essays 1958-1962 on Atomic Physics and Human Knowledge*, Vintage, New York (1966).

(4.3) W. HEISENBERG, *Physics and Beyond: Encounters and Conversations*, Harper and Row, New York (1971).

La Partie et le Tout, Albin Michel, Paris (1972).

(4.4) Niels Bohr, *His life and work as seen by his friends and colleagues*, S. ROZENTAL, ed., North Holland, Amsterdam (1967).

(4.5) A. EINSTEIN, M. and H. BORN, *Correspondance 1916-1955*, Editions du Seuil, Paris (1972). See also *La Recherche*, **3**, 137 (Feb. 1972).

(4.6) *Theoretical Physics in the Twentieth Century*, M. FIERZ and V. F. WEISSKOPF eds., Wiley Interscience, New York (1960).

(4.7) *Sources of Quantum Mechanics*, B. L. VAN DER WAERDEN ed., North Holland, Amsterdam (1967); Dover, New York (1968).

(4.8) M. JAMMER, *The Conceptual Development of Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, New York (1966). This book traces the historical development of quantum mechanics. Its very numerous footnotes provide a multitude of references. See also (5.12).

مقالات

- (4.9) K. K. DARROW, "The Quantum Theory", *Scientific American*, 186, 47 (March 1952).
 (4.10) M. J. KLEIN, "Thermodynamics and Quanta in Planck's work", *Physics Today*, 19, 23 (Nov. 1966).
 (4.11) H. A. MEDICUS, "Fifty years of Matter Waves", *Physics Today*, 27, 38 (Feb. 1974).

مرجع (۱۱.۵) شامل تعداد زیادی مرجع متن اصلی است.

۵. مکانیک کوانتومی: بحث درباره تاسیس آن

مسائل عمومی

- (5.1) D. BOHM, *Quantum Theory*, Constable, London (1954).
 (5.2) J. M. JAUCH, *Foundations of Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1968).
 (5.3) B. D'ESPAGNAT, *Conceptual Foundations of Quantum Mechanics*, Benjamin, New York (1971).
 (5.4) Proceedings of the International School of Physics "Enrico Fermi" (Varenna), Course II; *Foundations of Quantum Mechanics*, B. D'ESPAGNAT ed., Academic Press, New York (1971).
 (5.5) B. S. DEWITT, "Quantum Mechanics and Reality", *Physics Today*, 23, 30, (Sept. 1970).
 (5.6) "Quantum Mechanics debate", *Physics Today*, 24, 36 (April 1971).

See also (1.28).

همچنین مراجع (۲۸.۱) را ببینید.

توضیحات متفرقه

- (5.7) N. BOHR, "Discussion with Einstein on Epistemological Problems in Atomic Physics", in *A. Einstein: Philosopher-Scientist*, P. A. SCHILPP ed., Harper and Row, New York (1959).
 (5.8) M. BORN, *Natural Philosophy of Cause and Chance*, Oxford University Press, London (1951); Clarendon Press, Oxford (1949).
 (5.9) L. DE BROGLIE, *Une Tentative d'Interprétation Causale et Non Linéaire de la Mécanique Ondulatoire: la Théorie de la Double Solution*, Gauthier-Villars, Paris (1956); *Etude Critique des Bases de l'Interprétation Actuelle de la Mécanique Ondulatoire*, Gauthier-Villars, Paris (1963).
 (5.10) *The Many-Worlds Interpretation of Quantum Mechanics*, B. S. DEWITT and N. GRAHAM eds., Princeton University Press (1973).

A very complete set of references, classified and annotated, can be found in:

- (5.11) B. S. DEWITT and R. N. GRAHAM, "Resource Letter IQM-1 on the Interpretation of Quantum Mechanics", *Am. J. Phys.* 39, 724 (1971).
 (5.12) M. JAMMER, *The Philosophy of Quantum Mechanics*, Wiley-Interscience, New York (1974). A general presentation of the different interpretations of the Quantum Mechanics formalism. Gives numerous references.

نظریه اندازه گیری

- (5.13) K. GOTTFRIED, *Quantum Mechanics*, Vol. I, Benjamin, New York (1966).
 (5.14) D. I. BLOKHINTSEV, *Principes Essentiels de la Mécanique Quantique*, Dunod, Paris (1968).
 (5.15) A. SHIMONY, "Role of the Observer in Quantum Theory", *Am. J. Phys.*, 31, 755 (1963).

- (5.16) A. EINSTEIN, B. PODOLSKY and N. ROSEN, "Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?", *Phys. Rev.* **47**, 777 (1935).
 N. BOHR, "Can Quantum Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?", *Phys. Rev.* **48**, 696 (1935).
- (5.17) *Paradigms and Paradoxes, the Philosophical Challenge of the Quantum Domain*, R. G. COLODNY ed., University of Pittsburg Press (1972).
- (5.18) J. S. BELL, "On the Problem of Hidden Variables in Quantum Mechanics", *Rev. Mod. Phys.* **38**, 447 (1966).

همچنین مراجع (۸.۴)، (۱۱.۵) و فصل ۷ مرجع (۱۲.۵) را ببینید.

۶. مکانیک کلاسیک تراز مقدماتی

- (6.1) M. ALONSO and E. J. FINN, *Fundamental University Physics, Vol. I: Mechanics*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1967).
- (6.2) C. KITTEL, W. D. KNIGHT and M. A. RUDERMAN, *Berkeley Physics Course, Vol. 1: Mechanics*, McGraw-Hill, New York (1962).
- (6.3) R. P. FEYNMAN, R. B. LEIGHTON and M. SANDS, *The Feynman Lectures on Physics, Vol. I: Mechanics, Radiation, and Heat*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1966).
- (6.4) J. B. MARION, *Classical Dynamics of Particles and Systems*, Academic Press, New York (1965).

سطح پیشرفته‌تر

- (6.5) A. SOMMERFELD, *Lectures on Theoretical Physics, Vol. I: Mechanics*, Academic Press, New York (1964).
- (6.6) H. GOLDSTEIN, *Classical Mechanics*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1959).
- (6.7) L. D. LANDAU and E. M. LIFSHITZ, *Mechanics*, Pergamon Press, Oxford (1960).

۷. الکترومغناطیس و اپتیک سطح مقدماتی

- (7.1) E. M. PURCELL, *Berkeley Physics Course, Vol. 2: Electricity and Magnetism*, McGraw-Hill, New York (1965).
 F. S. CRAWFORD JR., *Berkeley Physics Course, Vol. 3: Waves*, McGraw-Hill, New York (1968).
- (7.2) R. P. FEYNMAN, R. B. LEIGHTON and M. SANDS, *The Feynman Lectures on Physics, Vol. II: Electromagnetism and Matter*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1966).
- (7.3) M. ALONSO and E. J. FINN, *Fundamental University Physics, Vol. II: Fields and Waves*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1967).
- (7.4) E. HECHT and A. ZAJAC, *Optics*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1974).

سطح پیشرفته‌تر

- (7.5) J. D. JACKSON, *Classical Electrodynamics*, 2nd ed. Wiley, New York (1975).
- (7.6) W. K. H. PANOFSKY and M. PHILLIPS, *Classical Electricity and Magnetism*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1964).
- (7.7) J. A. STRATTON, *Electromagnetic Theory*, McGraw-Hill, New York (1941).
- (7.8) M. BORN and E. WOLF, *Principles of Optics*, Pergamon Press, London (1964).
- (7.9) A. SOMMERFELD, *Lectures on Theoretical Physics, Vol. IV: Optics*, Academic Press, New York (1964).
- (7.10) G. BRUHAT, *Optique*, 5^e Edition revised and completed by A. KASTLER, Masson, Paris (1954).
- (7.11) L. LANDAU and E. LIFSHITZ, *The Classical Theory of Fields*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1951); Pergamon Press, London (1951).
- (7.12) L. D. LANDAU and E. M. LIFSHITZ, *Electrodynamics of Continuous Media*, Pergamon Press, Oxford (1960).
- (7.13) L. BRILLOUIN, *Wave Propagation and Group Velocity*, Academic Press, New York (1960).

۸. ترمودینامیک. مکانیک آماری

سطح مقدماتی

- (8.1) F. REIF, *Berkeley Physics Course, Vol. 5: Statistical Physics*, McGraw-Hill, New York (1967).
- (8.2) C. KITTEL, *Thermal Physics*, Wiley, New York (1969).
- (8.3) G. BRUHAT, *Thermodynamique*, 5^e Edition revised by A. KASTLER, Masson, Paris (1962).
- همچنین قسمت ۲ مرجع (۴.۱) و مرجع (۳.۶) را ببینید.

سطح پیشرفته‌تر

- (8.4) F. REIF, *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*, McGraw-Hill, New York (1965).
- (8.5) R. CASTAING, *Thermodynamique Statistique*, Masson, Paris (1970).
- (8.6) P. M. MORSE, *Thermal Physics*, Benjamin, New York (1964).
- (8.7) R. KUBO, *Statistical Mechanics*, North Holland, Amsterdam and Wiley, New York (1965).
- (8.8) L. D. LANDAU and E. M. LIFSHITZ, *Course of Theoretical Physics, Vol. 5: Statistical Physics*, Pergamon Press, London (1963).
- (8.9) H. B. CALLEN, *Thermodynamics*, Wiley, New York (1961).
- (8.10) A. B. PIPPARD, *The Elements of Classical Thermodynamics*, Cambridge University Press (1957).
- (8.11) R. C. TOLMAN, *The Principles of Statistical Mechanics*, Oxford University Press (1950).

۹. نسبیت

سطح مقدماتی

- (9.1) J. H. SMITH, *Introduction to Special Relativity*, Benjamin, New York (1965).
- مراجع (۲.۶) و (۳.۶) را ببینید.

- (9.2) J. L. SYNGE, *Relativity: The Special Theory*, North Holland, Amsterdam (1965).
 (9.3) R. D. SARD, *Relativistic Mechanics*, Benjamin, New York (1970).
 (9.4) J. AHARONI, *The Special Theory of Relativity*, Oxford University Press, London (1959).
 (9.5) C. MØLLER, *The Theory of Relativity*, Oxford University Press, London (1972).
 (9.6) P. G. BERGMANN, *Introduction to the Theory of Relativity*, Prentice Hall, Englewood Cliffs (1960).
 (9.7) C. W. MISNER, K. S. THORNE and J. A. WHEELER, *Gravitation*, Freeman, San Francisco (1973).

همچنین مراجع مربوط به الکترومغناطیس را ببینید، به ویژه مراجع (۵.۷) و (۱۱.۷). مراجع زیر نیز بالارزش‌اند.

- (9.8) A. EINSTEIN, *Quatre Conférences sur la Théorie de la Relativité*, Gauthier-Villars, Paris (1971).
 (9.9) A. EINSTEIN, *La Théorie de la Relativité Restreinte et Générale. La Relativité et le Problème de l'Espace*, Gauthier-Villars, Paris (1971).
 (9.10) A. EINSTEIN, *The Meaning of Relativity*, Methuen, London (1950).
 (9.11) A. EINSTEIN, *Relativity, the Special and General Theory, a Popular Exposition*, Methuen, London (1920); H. Holt, New York (1967).

A much more complete list of references can be found in :

- (9.12) G. HOLTON, Resource Letter SRT-1 on Special Relativity Theory, *Am. J. Phys.* **30**, 462 (1962).

۱۰. روشهای ریاضی کتابهای عمومی مقدماتی

- (10.1) J. BASS, *Cours de Mathématiques*, Vols. I, II and III, Masson, Paris (1961).
 (10.2) A. ANGOT, *Compléments de Mathématiques*, Revue d'Optique, Paris (1961).
 (10.3) T. A. BAK and J. LICHTENBERG, *Mathematics for Scientists*, Benjamin, New York (1966).
 (10.4) G. ARFKEN, *Mathematical Methods for Physicists*, Academic Press, New York (1966).
 (10.5) J. D. JACKSON, *Mathematics for Quantum Mechanics*, Benjamin, New York (1962).

کتابهای عمومی پیشرفته‌تر

- (10.6) J. MATHEWS and R. L. WALKER, *Mathematical Methods of Physics*, Benjamin, New York (1970).
 (10.7) L. SCHWARTZ, *Mathematics for the Physical Sciences*, Hermann, Paris (1968). *Méthodes mathématiques pour les sciences physiques*, Hermann, Paris (1965).
 (10.8) E. BUTKOV, *Mathematical Physics*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1968).
 (10.9) H. CARTAN, *Elementary Theory of Analytic Functions of One or Several Complex Variables*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1966). *Théorie élémentaire des fonctions analytiques d'une ou plusieurs variables complexes*, Hermann, Paris (1961).
 (10.10) J. VON NEUMANN, *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*, Princeton University Press (1955).
 (10.11) R. COURANT and D. HILBERT, *Methods of Mathematical Physics*, Vols. I and II, Wiley, Interscience, New York (1966).

- (10.12) E. T. WHITTAKER and G. N. WATSON, *A Course of Modern Analysis*, Cambridge University Press (1965).
- (10.13) P. M. MORSE and H. FESHBACH, *Methods of Theoretical Physics*, McGraw-Hill, New York (1953).

جبر خطی. فضاهاى هیلبرت

- (10.14) A. C. AITKEN, *Determinants and Matrices*, Oliver and Boyd, Edinburgh (1956).
- (10.15) R. K. EISENSCHITZ, *Matrix Algebra for Physicists*, Plenum Press, New York (1966).
- (10.16) M. C. PEASE III, *Methods of Matrix Algebra*, Academic Press, New York (1965).
- (10.17) J. L. SOULE, *Linear Operators in Hilbert Space*, Gordon and Breach, New York (1967).
- (10.18) W. SCHMEIDLER, *Linear Operators in Hilbert Space*, Academic Press, New York (1965).
- (10.19) N. I. AKHIEZER and I. M. GLAZMAN, *Theory of Linear Operators in Hilbert Space*, Ungar, New York (1961).

تبدیلات فوریه به توزیعها

- (10.20) R. STUART, *Introduction to Fourier Analysis*, Chapman and Hall, London (1969).
- (10.21) M. J. LIGHTHILL, *Introduction to Fourier Analysis and Generalized Functions*, Cambridge University Press (1964).
- (10.22) L. SCHWARTZ, *Théorie des Distributions*, Hermann, Paris (1967).
- (10.23) I. M. GEL'FAND and G. E. SHILOV, *Generalized Functions*, Academic Press, New York (1964).
- (10.24) F. OBERHETTINGER, *Tabellen zur Fourier Transformation*, Springer-Verlag, Berlin (1957).

احتمالات و آمار

- (10.25) J. BASS, *Elements of Probability Theory*, Academic Press, New York (1966). *Éléments de Calcul des Probabilités*, Masson, Paris (1974).
- (10.26) P. G. HOEL, S. C. PORT and C. J. STONE, *Introduction to Probability Theory*, Houghton-Mifflin, Boston (1971).
- (10.27) H. G. TUCKER, *An Introduction to Probability and Mathematical Statistics*, Academic Press, New York (1965).
- (10.28) J. LAMPERTI, *Probability*, Benjamin, New York (1966).
- (10.29) W. FELLER, *An Introduction to Probability Theory and its Applications*, Wiley, New York (1968).
- (10.30) L. BREIMAN, *Probability*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1968).

نظریه گروه

کاربردی در فیزیک:

- (10.31) H. BACRY, *Lectures on Group Theory*, Gordon and Breach, New York (1967).
- (10.32) M. HAMERMESH, *Group Theory and its Application to Physical Problems*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1962).

همچنین مراجع (۱۸.۲)، (۲۲.۲) یا (۱۶.۱۳) را که مقدمه کوتاهی در مورد گروههای پیوسته در فیزیک دارد ببینید.

ریاضی تر

- (10.33) G. PAPY, *Groups*, Macmillan, New York (1964).
- (10.34) A. G. KUROSH, *The Theory of Groups*, Chelsea, New York (1960).
- (10.35) L. S. PONIRYAGIN, *Topological Groups*, Gordon and Breach, New York (1966).

- (10.36) A. GRAY and G. B. MATHEWS, *A Treatise on Bessel Functions and their Applications to Physics*, Dover, New York (1966).
- (10.37) E. D. RAINVILLE, *Special Functions*, Macmillan, New York (1965).
- (10.38) W. MAGNUS, F. OBERHETTINGER and R. P. SONI, *Formulas and Theorems for the Special Functions of Mathematical Physics*, Springer-Verlag, Berlin (1966).
- (10.39) BATEMAN MANUSCRIPT PROJECT, *Higher Transcendental Functions*, Vols. I, II and III, A. ERDELYI ed., McGraw-Hill, New York (1953).
- (10.40) M. ABRAMOWITZ and I. A. STEGUN, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, New York (1965).
- (10.41) L. J. COMRIE, *Chambers's Shorter Six-Figure Mathematical Tables*, Chambers, London (1966).
- (10.42) E. JAHNKE and F. EMDE, *Tables of Functions*, Dover, New York (1945).
- (10.43) V. S. AIZENSHTADT, V. I. KRYLOV and A. S. METEL'SKII, *Tables of Laguerre Polynomials and Functions*, Pergamon Press, Oxford (1966).
- (10.44) H. B. DWIGHT, *Tables of Integrals and Other Mathematical Data*, Macmillan, New York (1965).
- (10.45) D. BIERENS DE HAAN, *Nouvelles Tables d'Intégrales Définies*, Hafner, New York (1957).
- (10.46) F. OBERHETTINGER and L. BADII, *Tables of Laplace Transforms*, Springer-Verlag, Berlin (1973).
- (10.47) BATEMAN MANUSCRIPT PROJECT, *Tables of Integral Transforms*, Vols. I and II, A. ERDELYI ed., McGraw-Hill, New York (1954).
- (10.48) M. ROTENBERG, R. BIVINS, N. METROPOLIS and J. K. WOOTEN JR., *The 3-j and 6-j symbols*, M.I.T. Technology Press (1959); Crosby Lockwood and Sons, London.

۱۱. فیزیک اتمی
سطح مقدماتی

- (11.1) H. G. KUHN, *Atomic Spectra*, Longman, London (1969).
- (11.2) B. CAGNAC and J. C. PEBAY-PEYROULA, *Physique Atomique*, Vols. 1 and 2, Dunod, Paris (1971).
English translation: *Modern Atomic Physics*, Vol. 1: *Fundamental Principles*, and 2: *Quantum Theory and its Application*, Macmillan, London (1975).
- (11.3) A. G. MITCHELL and M. W. ZEMANSKY, *Resonance Radiation and Excited Atoms*, Cambridge University Press, London (1961).
- (11.4) M. BORN, *Atomic Physics*, Blackie and Son, London (1951).
- (11.5) H. E. WHITE, *Introduction to Atomic Spectra*, McGraw-Hill, New York (1934).
- (11.6) V. N. KONDRATIEV, *La Structure des Atomes et des Molécules*, Masson, Paris (1964).

مراجع (۳.۱) و (۱۲.۱) را نیز ببینید.

سطح پیشرفته‌تر

- (11.7) G. W. SERIES, *The Spectrum of Atomic Hydrogen*, Oxford University Press, London (1957).
- (11.8) J. C. SLATER, *Quantum Theory of Atomic Structure*, Vols. I and II, McGraw-Hill, New York (1960).

- (11.9) A. E. RUARK and H. C. UREY, *Atoms, Molecules and Quanta*, Vols. I and II, Dover, New York (1964).
- (11.10) *Handbuch der Physik, Vols. XXXV and XXXVI, Atoms*, s. FLÜGGE ed., Springer-Verlag Berlin (1956 and 1957).
- (11.11) N. F. RAMSEY, *Molecular Beams*, Oxford University Press, London (1956).
- (11.12) I. I. SOBEL'MAN, *Introduction to the Theory of Atomic Spectra*, Pergamon Press, Oxford (1972).
- (11.13) E. U. CONDON and G. H. SHORTLEY, *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge University Press (1953).

مقاله‌ها

مراجع متعدد و مقاله‌ها و کتابها، طبقه‌بندی شده و مورد بحث قرار گرفته، در زیر یافت می‌شوند.

- (11.14) J. C. ZORN, "Resource Letter MB-1 on Experiments with Molecular Beams, *Am. J. Phys.* **32**, 721 (1964).
See also: (3.13).
- (11.15) V. F. WEISSKOPF, "How Light Interacts with Matter", *Scientific American*, **219**, 60 (Sept. 1968).
- (11.16) H. R. CRANE, "The g Factor of the Electron", *Scientific American*, **218**, 72 (Jan. 1968).
- (11.17) M. S. ROBERTS, "Hydrogen in Galaxies", *Scientific American*, **208**, 94 (June 1963).
- (11.18) S. A. WERNER, R. COLELLA, A. W. OVERHAUSER and C. F. EAGEN, "Observation of the Phase Shift of a Neutron due to Precession in a Magnetic Field", *Phys. Rev. Letters*, **35**, 1053 (1975).

اتمهای نامأنوس

- (11.19) H. C. CORBEN and S. DE BENEDETTI, "The Ultimate Atom", *Scientific American*, **191**, 88 (Dec. 1954).
- (11.20) V. W. HUGHES, "The Muonium Atom", *Scientific American*, **214**, 93, (April 1966).
"Muonium", *Physics Today*, **20**, 29 (Dec. 1967).
- (11.21) S. DE BENEDETTI, "Mesonic Atoms", *Scientific American*, **195**, 93, (Oct. 1956).
- (11.22) C. E. WIEGAND, "Exotic Atoms", *Scientific American*, **227**, 102, (Nov. 1972).
- (11.23) V. W. HUGHES, "Quantum Electrodynamics: experiment", in *Atomic Physics*, B. Bederson, V. W. Cohen and F. M. Pichanick eds., Plenum Press, New York (1969).
- (11.24) R. DE VOE, P. M. MC INTYRE, A. MAGNON, D. Y. STOWELL, R. A. SWANSON and V. L. TELEGDY, "Measurement of the muonium Hfs Splitting and of the muon moment by double resonance, and new value of α ", *Phys. Rev. Letters*, **25**, 1779 (1970).
- (11.25) K. F. CANTER, A. P. MILLS JR. and S. BERKO, "Observations of Positronium Lyman-Radiation", *Phys. Rev. Letters*, **34**, 177 (1975). "Fine-Structure Measurement in the First Excited State of Positronium" *Phys. Rev. Letters*, **34**, 1541 (1975).

۱۲. فیزیک مولکولی

سطح مقدماتی

- (12.1) M. KARPLUS and R. N. PORTER, *Atoms and Molecules*, Benjamin, New York (1970).
- (12.2) L. PAULING, *The Nature of the Chemical Bond*, Cornell University Press (1948).

همچنین فصل ۱۲ مرجع (۳.۱) و مرجعهای (۵.۱) و (۶.۱۱) را ببینید.

- (12.3) I. N. LEVINE, *Quantum Chemistry*, Allyn and Bacon, Boston (1970).
- (12.4) G. HERZBERG, *Molecular Spectra and Molecular Structure*, Vol. I: *Spectra of Diatomic Molecules*, and Vol. II: *Infrared and Raman Spectra of Polyatomic Molecules*, D. Van Nostrand Company, Princeton (1963 and 1964).
- (12.5) H. EYRING, J. WALTER and G. E. KIMBALL, *Quantum Chemistry*, Wiley, New York (1963).
- (12.6) C. A. COULSON, *Valence*, Oxford at the Clarendon Press (1952).
- (12.7) J. C. SLATER, *Quantum Theory of Molecules and Solids*, Vol. 1: *Electronic Structure of Molecules*, McGraw-Hill, New York (1963).
- (12.8) *Handbuch der Physik*, Vol. XXXVII, 1 and 2, *Molecules*, s. FLÜGGE, ed., Springer Verlag, Berlin (1961).
- (12.9) D. LANGBEIN, *Theory of Van der Waals Attraction*, Springer Tracts in Modern Physics, Vol. 72, Springer Verlag, Berlin (1974).
- (12.10) C. H. TOWNES and A. L. SCHAWLOW, *Microwave Spectroscopy*, McGraw-Hill, New York (1955).
- (12.11) P. ENCRENAZ, *Les Molécules interstellaires*, Delachaux et Niestlé, Neuchâtel (1974).

ممکنین مراجع (۹.۱۱)، (۱۱.۱۱)، و (۱۴.۱۱) را ببینید.

مقالات

- (12.12) B. V. DERJAGUIN, "The Force Between Molecules", *Scientific American*, **203**, 47 (July 1960).
- (12.13) A. C. WAHL, "Chemistry by Computer", *Scientific American*, **222**, 54 (April 1970).
- (12.14) B. E. TURNER, "Interstellar Molecules", *Scientific American*, **228**, 51 (March 1973).
- (12.15) P. M. SOLOMON, "Interstellar Molecules", *Physics Today*, **26**, 32 (March 1973).
- See also (16.25).

۱۳. فیزیک حالت جامد

سطح مقدماتی

- (13.1) C. KITTEL, *Elementary Solid State Physics*, Wiley, New York (1962).
- (13.2) C. KITTEL, *Introduction to Solid State Physics*, 3rd ed., Wiley, New York (1966).
- (13.3) J. M. ZIMAN, *Principles of the Theory of Solids*, Cambridge University Press, London (1972).
- (13.4) F. SEITZ, *Modern Theory of Solids*, McGraw-Hill, New York (1940).

سطح پیشرفته‌تر

کتابهای عمومی

- (13.5) C. KITTEL, *Quantum Theory of Solids*, Wiley, New York (1963).
- (13.6) R. E. PEIERLS, *Quantum Theory of Solids*, Oxford University Press, London (1964).
- (13.7) N. F. MOTT and H. JONES, *The Theory of the Properties of Metals and Alloys*, Clarendon Press, Oxford (1936); Dover, New York (1958).

کتابهای پیشرفته‌تر

- (13.8) M. BORN and K. HUANG, *Dynamical Theory of Crystal Lattices*, Oxford University Press, London (1954).

- (13.9) J. M. ZIMAN, *Electrons and Phonons*, Oxford University Press, London (1960).
 (13.10) H. JONES, *The Theory of Brillouin Zones and Electronic States in Crystals*, North Holland, Amsterdam (1962).
 (13.11) J. CALLAWAY, *Energy Band Theory*, Academic Press, New York (1964).
 (13.12) R. A. SMITH, *Wave Mechanics of Crystalline Solids*, Chapman and Hall, London (1967).
 (13.13) D. PINES and P. NOZIERES, *The Theory of Quantum Liquids*, Benjamin, New York (1966).
 (13.14) D. A. WRIGHT, *Semiconductors*, Associated Book Publishers, London (1966).
 (13.15) R. A. SMITH, *Semiconductors*, Cambridge University Press, London (1964).

مقالات

- (13.16) R. L. SPROULL, "The Conduction of Heat in Solids", *Scientific American*, **207**, 92 (Dec. 1962).
 (13.17) A. R. MACKINTOSH, "The Fermi Surface of Metals", *Scientific American*, **209**, 110 (July 1963).
 (13.18) D. N. LANGENBERG, D. J. SCALAPINO and B. N. TAYLOR, "The Josephson Effects", *Scientific American* **214**, 30 (May 1966).
 (13.19) G. L. POLLACK, "Solid Noble Gases", *Scientific American*, **215**, 64 (Oct. 1966).
 (13.20) B. BERTMAN and R. A. GUYER, "Solid Helium", *Scientific American*, **217**, 85 (Aug. 1967).
 (13.21) N. MOTT, "The Solid State", *Scientific American*, **217**, 80 (Sept. 1967).
 (13.22) M. Ya. AZBEL', M. I. KAGANOV and I. M. LIFSHITZ, "Conduction Electrons in Metals", *Scientific American*, **228**, 88 (Jan. 1973).
 (13.23) W. A. HARRISON, "Electrons in Metals", *Physics Today*, **22**, 23 (Oct. 1969).

۱۴. تشدید هسته‌ای

- (14.1) A. ABRAGAM, *The Principles of Nuclear Magnetism*, Clarendon Press, Oxford (1961).
 (14.2) C. P. SLICHTER, *Principles of Magnetic Resonance*, Harper and Row, New York (1963).
 (14.3) G. E. PAKE, *Paramagnetic Resonance*, Benjamin, New York (1962).

همچنین به فصلهای ۵، ۶، و ۷ کتاب زیر رجوع کنید.

مقالات

- (14.4) G. E. PAKE, "Fundamentals of Nuclear Magnetic Resonance Absorption, I and II, *Am. J. Phys.*, **18**, 438 and 473 (1950).
 (14.5) E. M. PURCELL, "Nuclear Magnetism", *Am. J. Phys.*, **22**, 1 (1954).
 (14.6) G. E. PAKE, "Magnetic Resonance", *Scientific American*, **199**, 58 (Aug. 1958).
 (14.7) K. WÜTHRICH and R. C. SHULMAN, "Magnetic Resonance in Biology", *Physics Today*, **23**, 43 (April 1970).
 (14.8) F. BLOCH, "Nuclear Induction", *Phys. Rev.* **70**, 460 (1946).

Numerous other references, in particular to original articles, can be found in:

- (14.9) R. E. NORBERG, "Resource Letter NMR-EPR-1 on Nuclear Magnetic Resonance and Electron Paramagnetic Resonance", *Am. J. Phys.*, **33**, 71 (1965).

۱۵. اپتیک کوانتومی: میزرها و لیزرها

دمش اپتیکی: میزرها و لیزرها

- (15.1) R. A. BERNHEIM, *Optical Pumping: An Introduction*, Benjamin, New York (1965). This book contains many references. In addition, several important original papers are reprinted.
- (15.2) *Quantum Optics and Electronics, Les Houches Lectures 1964*, C. DE WITT, A. BLANDIN and C. COHEN-TANNOUJJI eds., Gordon and Breach, New York (1965).
- (15.3) *Quantum Optics, Proceedings of the Scottish Universities Summer School 1969*, S. M. KAY and A. MAITLAND eds., Academic Press, London (1970). These two summer-school books contain several useful texts related to optical pumping and quantum electronics.
- (15.4) W. E. LAMB JR., *Quantum Mechanical Amplifiers*, in *Lectures in Theoretical Physics*, Vol. II, W. BRITTIN and D. DOWNS eds., Interscience Publishers, New York (1960).
- (15.5) M. SARGENT III, M. O. SCULLY and W. E. LAMB JR., *Laser Physics*, Addison-Wesley, New York (1974).
- (15.6) A. E. SIEGMAN, *An Introduction to Lasers and Masers*, McGraw-Hill, New York (1971).
- (15.7) L. ALLEN, *Essentials of Lasers*, Pergamon Press, Oxford (1969). This small book contains several reprints of original papers on lasers.
- (15.8) L. ALLEN and J. H. EBERLY, *Optical Resonance and Two-Level Atoms*, Wiley Interscience, New York (1975).
- (15.9) A. YARIV, *Quantum Electronics*, Wiley, New York (1967).
- (15.10) H. M. NUSSENZVEIG, *Introduction to Quantum Optics*, Gordon and Breach, London (1973).

مقالات

دو "مقاله منبعی"، مراجع متعدد مفید را مورد بحث قرار می‌دهد و دسته‌بندی می‌کند:

- (15.11) H. W. MOOS, "Resource Letter MOP-1 on Masers (Microwave through Optical) and on Optical Pumping", *Am. J. Phys.*, **32**, 589 (1964).
- (15.12) P. CARRUTHERS, "Resource Letter QSL-1 on Quantum and Statistical Aspects of Light", *Am. J. Phys.*, **31**, 321 (1963).
- Reprints of many important papers on Lasers have been collected in:
- (15.13) *Laser Theory*, F. S. BARNES ed., I.E.E.E. Press, New York (1972).
- (15.14) H. LYONS, "Atomic Clocks", *Scientific American*, **196**, 71 (Feb. 1957).
- (15.15) J. P. GORDON, "The Maser", *Scientific American*, **199**, 42 (Dec. 1958).
- (15.16) A. L. BLOOM, "Optical Pumping", *Scientific American*, **203**, 72 (Oct. 1960).
- (15.17) A. L. SCHAWLOW, "Optical Masers", *Scientific American*, **204**, 52 (June 1961). "Advances in Optical Masers", *Scientific American*, **209**, 34 (July 1963). "Laser Light", *Scientific American*, **219**, 120 (Sept. 1968).
- (15.18) M. S. FELD and V. S. LETOKHOV, "Laser Spectroscopy", *Scientific American*, **229**, 69 (Dec. 1973).

اپتیک غیر-خطی

- (15.19) G. C. BALDWIN, *An Introduction to Non-Linear Optics*, Plenum Press, New York (1969).
- (15.20) F. ZERNIKE and J. E. MIDWINTER, *Applied Non-Linear Optics*, Wiley Interscience, New York (1973).

- (15.21) N. BLOEMBERGEN, *Non-Linear Optics*, Benjamin, New York (1965).
همچنین متن سخنرانیهای این نویسنده در مراجع (۲.۱۵) و (۳.۱۵) را ببینید.
- مقالات
- (15.22) J. A. GIORDMAINE, "The Interaction of Light with Light", *Scientific American*, **210**, 38 (Apr. 1964).
"Non-Linear Optics", *Physics Today*, **22**, 39 (Jan. 1969).

۱۶. فیزیک هسته‌ای و فیزیک ذره مقدمه‌ای بر فیزیک هسته‌ای

- (16.1) L. VALENTIN, *Physique Subatomique: Noyaux et Particules*, Hermann, Paris (1975).
(16.2) D. HALLIDAY, *Introductory Nuclear Physics*, Wiley, New York (1960).
(16.3) R. D. EVANS, *The Atomic Nucleus*, McGraw-Hill, New York (1955).
(16.4) M. A. PRESTON, *Physics of the Nucleus*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1962).
(16.5) E. SEGRE, *Nuclei and Particles*, Benjamin, New York (1965).

کتابهای فیزیک هسته‌ای پیشرفته‌تر

- (16.6) A. DESHALIT and H. FESHBACH, *Theoretical Nuclear Physics, Vol. 1: Nuclear Structure*, Wiley, New York (1974).
(16.7) J. M. BLATT and V. F. WEISSKOPF, *Theoretical Nuclear Physics*, Wiley, New York (1963).
(16.8) E. FEENBERG, *Shell Theory of the Nucleus*, Princeton University Press (1955).
(16.9) A. BOHR and B. R. MOTTELSON, *Nuclear Structure*, Benjamin, New York (1969).

فیزیک ذره مقدماتی

- (16.10) D. H. FRISCH and A. M. THORNDIKE, *Elementary Particles*, Van Nostrand, Princeton (1964).
(16.11) C. E. SWARTZ, *The Fundamental Particles*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1965).
(16.12) R. P. FEYNMAN, *Theory of Fundamental Processes*, Benjamin, New York (1962).
(16.13) R. OMNES, *Introduction à l'Etude des Particules Élémentaires*, Ediscience, Paris (1970).
(16.14) K. NISHIJIMA, *Fundamental Particles*, Benjamin, New York (1964).

کتابهای فیزیک ذره‌ای پیشرفته‌تر

- (16.15) B. DIU, *Qu'est-ce qu'une Particule Élémentaire?* Masson, Paris (1965).
(16.16) J. J. SAKURAI, *Invariance Principles and Elementary Particles*, Princeton University Press (1964).
(16.17) G. KÄLLEN, *Elementary Particle Physics*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1964).
(16.18) A. D. MARTIN and T. D. SPEARMAN, *Elementary Particle Theory*, North Holland, Amsterdam (1970).
(16.19) A. O. WEISSENBERG, *Muons*, North Holland, Amsterdam (1967).

مقالات

- (16.20) M. G. MAYER, "The Structure of the Nucleus", *Scientific American*, **184**, 22 (March 1951).
(16.21) R. E. PEIERLS, "The Atomic Nucleus", *Scientific American*, **200**, 75 (Jan. 1959).
(16.22) E. U. BARANGER, "The present status of the nuclear shell model", *Physics Today*, **26**, 34 (June 1973).

- (16.23) S. DE BENEDETTI, "Mesonic Atoms", *Scientific American*, **195**, 93 (Oct. 1956).
- (16.24) S. DE BENEDETTI, "The Mössbauer Effect", *Scientific American*, **202**, 72 (April 1960).
- (16.25) R. H. HERBER, "Mössbauer Spectroscopy", *Scientific American*, **225**, 86 (Oct. 1971).
- (16.26) S. PENMAN, "The Muon", *Scientific American*, **205**, 46 (July 1961).
- (16.27) R. E. MARSHAK, "The Nuclear Force", *Scientific American*, **202**, 98 (March 1960).
- (16.28) M. GELL-MANN and E. P. ROSENBAUM, "Elementary Particles", *Scientific American*, **197**, 72 (July 1957).
- (16.29) G. F. CHEW, M. GELL-MANN and A. H. ROSENFELD, "Strongly Interacting Particles", *Scientific American*, **210**, 74 (Feb. 1964).
- (16.30) V. F. WEISSKOPF, "The Three Spectroscopies", *Scientific American*, **218**, 15 (May 1968).
- (16.31) U. AMALDI, "Proton Interactions at High Energies", *Scientific American*, **229**, 36 (Nov. 1973).
- (16.32) S. WEINBERG, "Unified Theories of Elementary-Particle Interaction", *Scientific American*, **231**, 50 (July 1974).
- (16.33) S. D. DRELL, "Electron-Positron Annihilation and the New Particles", *Scientific American*, **232**, 50 (June 1975).
- (16.34) R. WILSON, "Form Factors of Elementary Particles", *Physics Today*, **22**, 47 (Jan. 1969).
- (16.35) E. S. ABERS and B. W. LEE, "Gauge Theories", *Physics Reports*, **9C**, 1, Amsterdam (1973).

فهرست راهنما

- | | |
|------------------------------------|---|
| ارتعاش مولکول ۲۲۵، ۱۶۸ | آزمایش اشترن گریاخ ۱۰ |
| ارتعاش هسته در بلور ۳۲۶، ۲۸۹، ۱۷۸ | آمونیاک ۶۱۲، ۹۷ |
| اسپین | آمیزه آماری حالتها ۷۵ |
| دستگاه با دو اسپین ۶۵ ۱/۲ | اتم |
| ~ مجازی ۵۸ | ~ موتونی ۵۶۸، ۱۸۶ |
| استوکس (خط رامان) ۴۵۴، ۱۷۷ | اتم پخشنده ۵۶۶ |
| استیلن ۶۷ | اتمهای هادرونی ۵۶۹ |
| افت و خیزهای خلا ۳۱۴ | اتم هیدروژن |
| اکسیتون ۵۶۶ | انرژی یونش ~ ۵۴۳ |
| انجماد هلیوم ۱۸۰ | تابع موجهای مانای ~ ۵۵۶ |
| اندازه‌گیری روی یک اسپین ۱/۲ ۲۳، ۹ | ~ در میدان مغناطیسی ۵۸۷، ۵۹۰ |
| اینشتین ۳۳ | مدل بور برای ~ ۵۴۱ |
| دمای اینشتین ۳۳۱ | نظریه کوانتومی ~ ۵۴۳ |
| مدل اینشتین ۱، ۱۷۸، ۳۲۴ | اثر تونل ۱۸۴، ۱۰۵ |
| اوربیتالهای اتمی ۶۰۶ | اثر جرم متناهی هسته ۵۶۲ |
| بسامد سیکلوترون ۵۹۲، ۴۷۸ | اثر حجم ۵۶۹، ۱۸۷ |
| بسته موج | اثر حجم هسته ۵۶۹، ۱۸۸ |
| انتشار بسته موجها ۲۸ | اثر رامان ۴۵۲، ۱۷۵ |
| ~ در پتانسیل هماهنگ ۲۵۳ | اثر زیمان با اسپین ۵۹۸ |
| بسته موجهای مینیموم ۲۵۳، ۱۶۴ | اثر زیمان برای نوسانگر هماهنگ سه‌بعدی ۶۴۳ |
| | احتمال گذار ۸۷، ۶۴ |

- بنزن ۳۹، ۱۳۰
 بی‌هنجاری شانگی ۳۲۵
 پارامغناطیس ۵۸۹، ۶۴۲
 پتانسیل
 پتانسیل با تقارن کروی ۶۴۲
 پتانسیل مرکزگریز ۵۲۸، ۶۲۹، ۶۳۵
 پتانسیل مرکزی ۵۲۲، ۵۷۱
 پتانسیل مرکزگریز ۵۲۸، ۶۲۹، ۶۳۵
 پتانسیل (میدان) مرکزی
 حالت‌های مانا در یک ~ ۵۲۲
 پذیرفتاری الکتریکی ۱۱۴، ۲۲۹
 پراکندگی ریلی ۱۷۶، ۴۵۵
 پوزیترونیم ۵۶۴
 پهنای طبیعی ۹۰
 پیوند (شیمیایی) ۴۰، ۶۰۷
 ترازهای لاتداژ ۴۷۷
 تریتم ۵۶۲
 تشدید کواتومی ۳۹
 تشدید مغناطیسی ۸۱
 تعادل ترمودینامیکی، اسپین ۱/۲ ۷۸
 تعادل ترمودینامیکی، نوسانگر هماهنگ ۳۱۶
 تقریب یورن-اوپنهاইمر ۱۷۱
 تکانه زاویه‌ای
 بایستگی ~ ۳۴۴، ۴۳۵
 ~ در نظریه کواتومی ۳۴۱
 رابطه ~ با دوران ۴۰۸
 روابط جابه‌جایی ~ ۳۴۴، ۴۱۹، ۴۲۵
 عدم تقاطع (ترازها) ۳۷، ۱۱۳
 عملگر نابودی ۱۴۰، ۱۵۳
 ~ مداری ۳۴۴، ۳۶۷
 نمایش‌های سنجه‌ای ~ ۳۵۷، ۳۷۵
 تکانه زاویه‌ای مداری ۳۴۴، ۳۶۷
 توابع وابسته لژاندر ۴۰۴
 ثابت ساختار ریز ۵۵۰
 جابه‌جایی (تغییر مکان) لب ۳۱۴
 جرم کاهش یافته ۵۳۴
 جریان احتمال ۵۸۴
 جسم سیاه ۳۲۲
 جفت‌دگی دو حالت ۳۴
 چندجمله‌ای‌های لژاندر ۴۰۳
 چندجمله‌ای‌های هرمیت ۱۵۶، ۱۹۲، ۲۱۰
 حاصلضرب تانسوری ۶۵
 حالت پایه ۱۴۸، ۱۶۲
 حالت‌های شبه‌کلاسیکی ۲۳۵، ۴۷۱، ۵۰۴، ۵۱۶
 حرکت تقدیمی لارمور ۱۳، ۳۰، ۸۱، ۵۹۳
 حرکت نسبی ۵۳۳
 دستگاه‌های دوترازه ۹، ۳۲
 دستگاه‌های هیدروژن‌گونه ۵۶۰
 دوتریم ۵۶۲
 دوران ۴۰۸
 چرخنده (صلب) ۴۳۸
 عملگر ~ ۴۱۲
 ~ مولکولها ۴۳۸، ۵۰۸
 ~، نوردایی و واگنی اساسی ۴۴۱
 دیامغناطیس ۵۸۹، ۶۴۲
 رابطه رابی ۴۲، ۶۴، ۸۷

روش چند جمله‌ای

~، اتم هیدروژن ۵۴۵

~، نوسانگر هماهنگ ۵۷۲، ۲۰۱

قانون توزیع یوز-اینشتین ۳۲۳

قضیه بلوخ ۳۳۱

قطبش پذیری

قطبش پذیری NH_2 (الکتریکی) ۱۱۳

~ نوسانگر هماهنگ باردار ۲۲۹

قطبش مؤلفه‌های زیمان ۶۰۲

قطری کردن یک ماتریس 2×2 ۳۰

قواعد گذار و گزینش، دوقطبی (الکتریکی) ۶۰۲

ساختار اتیلن ۶۲۱

ساختار متان ۶۲۳

شعاع بور ۵۴۳

کاربردهای ضرب تانسوری ۶۵

کوانتش میدان الکترومغناطیسی ۲۹۵

کوانتش نتایج اندازه‌گیری ۲۳، ۱۶

کوانتومهای دایره‌ای ۴۹۳، ۴۶۶

گرمای ویژه

~ گرمای ویژه جامد ۳۲۴

گرمای ویژه دستگاه دوترازه ۳۲۵

گسیل خودبه‌خود ۳۱۴

لایه ۵۵۲

ماتریس

ماتریس پاؤلی ۴۷

ماتریس چگالی ۷۴

ماتریسهای پاؤلی ۴۷

متغیرهای بهنجار ۳۰۷، ۲۹۸، ۲۷۶، ۲۶۰

مدل بور ۵۴۱

مدهای طبیعی ارتعاش ۲۹۵، ۲۷۰، ۲۵۶

مرکز جرم ۵۳۲

معادلات بلوخ ۹۲

معادله شعاعی ۵۲۶

مگنتون الکترونی (بور) ۵۹۱

طول عمر ۳۱۴، ۱۱۶

طول موج کامپتون ۵۵۰

عدد کوانتومی اصلی ۵۵۲

عدد کوانتومی سمتی ۵۳۰

عدد کوانتومی شعاعی ۵۳۱

عدد کوانتومی مغناطیسی ۵۳۱

عملگر(ها)

~ آفرینش و نابودی ۱۵۳، ۱۴۰

~ انتقال ۵۰۲، ۲۳۱

~ برداری ۴۲۹

~ چگالی ۷۴

~ دوران ۴۱۳

معادله ویژه مقدار، قطری کردن ~ ۵۲

~ زردهای ۴۳۵، ۴۲۸

عملگر آفرینش ۱۴۰، ۱۵۳

عملگر برداری ۴۲۹

عملگر و ماتریس چگالی ۷۴

فرمول بریلوئن ۷۹

فوتونها ۳۲۳، ۲۹۵

فوتونها ۲۸۹، ۲۷۰

- مناطق بریلونن ۲۷۵
 موتونی ۵۶۸، ۵۶۲، ۱۸۶
 موونیم ۵۶۲
 مولکولها
- ارتعاش ~ ۱۶۹
 ارتعاش-چرخش ~ ۶۲۵
 پیوند شیمیایی ~ ۶۰۶، ۴۰
 ساختار بعضی از ~ ۶۱۲، ۶۱۷، ۶۲۱، ۶۲۳
 میدان مغناطیسی
- اتم هیدروژن در ~ ۵۸۷، ۵۹۰
 ذره باردار در ~ ۴۷۷
 نوسانگر هماهنگ در ~ ۶۴۲
- ناپایداری ۱۱۶، ۳۱۴
 نسبت ژیرومغناطیسی الکترون
 نسبت ژیرومغناطیسی الکترون، اسپین ۸۱
 نسبت ژیرومغناطیسی الکترون، مداری ۵۹۴
 نمادگذاری طیف نمایی ۵۵۳
 نوسانگر (ناهماهنگ) ۱۳۸
 نوسانگر (هماهنگ)
 ~ جفتیده ۲۵۶، ۲۷۰
- حالت‌های شبه کلاسیکی ~ ۲۳۵
 در تعادل ترمودینامیکی ۳۱۶
 در میدان الکتریکی ۲۲۵
 ~ دوبعدی ۴۷۵
 ~ سه بعدی ۲۱۸، ۵۷۱، ۶۴۲
 ~ یک بعدی ۱۳۳، ۱۶۹
 نوسان میان دو حالت ۸۸، ۴۱
 نوسانهای پیچشی ۱۸۰
 نیرسانا ۵۶۶
- واگنی دوران ۴۳۶
 واگنی سیستماتیک (یا اساسی) و اتفاقی ۵۳۱، ۵۵۱، ۵۷۶
 واهلش ۹۳
- هامیلتونی ذره در پتانسیل مرکزی ۵۲۴
 هماهنگهای (کروی) ۳۷۳، ۳۹۲
 عبارتهای ~ برای ۱، ۲، ۰، $l = 398$
 هیبریدشدگی ۶۰۶
- یون مولکولی (H^+) ۴۴، ۴۰
 یون He^+ ۵۶۷