

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری



مرکز نشر دانشگاه

# مکانیک کوانتومی

جلد سوم

کلود کوهن - تانوجی

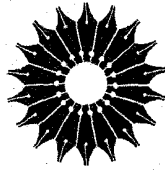
برنارد دیو

فرانک لالوئه

ترجمه

محمد فرهاد رحیمی

محسن سریش‌شاهی



# مکانیک کوانتومی

جلد سوم

کلود کوهن - تانوجی، برنارد دیو، فرانک لالوئه

ترجمه

محمد فرهاد رحیمی، محسن سریشہ ای

مرکز نشر دانشگاهی

بسم الله الرحمن الرحيم

فهرست

صفحه	عنوان
۱	پیشگفتار
۲	راهنمای استفاده از کتاب
۳	مقدمه
۷	۸ رهیافتی مقدماتی به نظریه کوانتومی پراکندگی توسط پتانسیل
۸	فهرست مطالب فصل ۸
۹	۱-۸ مقدمه
۱۴	۲-۸ حالت‌های مانای پراکندگی
۳۱	۳-۸ پراکندگی توسط پتانسیل مرکزی. روش پاره‌موجها
۵۰	مکمل‌های فصل ۸
۵۱	مکمل ۱ ذره آزاد: حالت‌های مانای با تکانه زاویه‌ای خوش‌تعریف
۶۸	مکمل ۲ توصیف پدیده‌شناختی برخورد‌های همراه با جذب
۷۶	مکمل ۳ چند کاربرد ساده از نظریه پراکندگی
۸۷	۹ اسپین الکترون
۸۸	فهرست مطالب فصل ۹
۹۰	۱-۹ معرفی اسپین الکترون
۹۴	۲-۹ خواص ویژه تکانه زاویه‌ای $1/2$
۹۷	۳-۹ توصیف غیرنسبیتی یک

۱۰۸	مکملهای فصل ۹
۱۰۹	مکمل ۱ عملگرهای دوران برای ذره‌ای با اسپین $1/2$
۱۱۸	مکمل ۲ تمرینات
۱۲۷	۱۰ جمع تکانه‌های زاویه‌ای
۱۲۸	فهرست مطالب فصل ۱۰
۱۲۹	۱۰-۱ مقدمه
۱۳۴	۱۰-۲ جمع دو اسپین $1/2$ . روش مقدماتی
۱۴۲	۱۰-۳ جمع دو تکانه زاویه‌ای دلبخواه. روش عمومی
۱۶۴	مکملهای فصل ۱۰
۱۶۶	مکمل ۱ مثالهایی از جمع تکانه‌های زاویه‌ای
۱۷۵	مکمل ۲ ضرایب کلبش گوردن
۱۸۶	مکمل ۳ جمع هماهنگهای کروی
۱۹۳	مکمل ۴ عملگرهای برداری: قضیه و بگنر-اکارت
۲۰۸	مکمل ۵ گشتاورهای چندقطبی الکتریکی
۲۲۵	مکمل ۶ تحول دو تکانه زاویه‌ای $J_1$ و $J_2$ جفت شده توسط...
۲۴۴	مکمل ۷ تمرینات
۲۵۳	۱۱ نظریه اختلال مانا
۲۵۴	فهرست مطالب فصل ۱۱
۲۵۶	۱۱-۱ تشریح روش
۲۶۱	۱۱-۲ اختلال یک تراز ناواگن
۲۶۷	۱۱-۳ اختلال یک تراز واگن
۲۷۳	مکملهای فصل ۱۱
۲۷۵	مکمل ۱ یک نوسانگر هماهنگ یک بعدی در یک پتانسیل اختلال $x, x^2, x^3$
۲۸۷	مکمل ۲ برهم‌کنش بین دو قطبیه‌های مغناطیسی دو ذره با اسپینهای $1/2$
۳۰۰	مکمل ۳ نیروهای وان دروالس
۳۱۴	مکمل ۴ اثر حجمی: تأثیر گسترش فضایی هسته بر ترازهای اتمی

۳۲۳	مکمل ۵ روش وردشی
۳۳۴	مکمل ۶ نوارهای انرژی الکترونها در جامدات: یک مدل ساده
۳۵۰	مکمل ۷ یک نمونه ساده از پیوند شیمیایی: یون $H_2^+$
۳۹۰	مکمل ۸ تمرینات
۴۰۲	پیوست الف سری فوریه و تبدیلات فوریه
۴۱۴	پیوست ب "تابع" $\delta$ ی دیراک
۴۳۰	پیوست ج لاگرانژی و هامیلتونی در مکانیک کلاسیک
۴۵۱	کتابنامه
۴۶۸	نمایه

## 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، به نظر ما ساختار این کتاب (جداکردن کتاب به فصلها و مکملها) باید آن را برای سایر گروهها نیز مناسب ساخته باشد. به عنوان 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.

کلود کوهن-تانوجی

برنارد دیو

فرانک لالوئه

## 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. دانشجو نباید الزاماً تمام مکملهای یک فصل را در دور اول بخواند. بلکه باید بنا به 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.



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، یا 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 واقعیهای 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 واقعیهای 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 عمداً 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



رہیافتی مقدماتی بہ نظریہ کوانتومی  
پراکندگی توسط پتانسیل

۱-۸ مقدمه

۱-۱-۸ اهمیت پدیده‌های برخورد

۲-۱-۸ پراکندگی توسط پتانسیل

۳-۱-۸ تعریف سطح مقطع پراکندگی

۴-۱-۸ خلاصه مطالب

۲-۸ حالت‌های مانای پراکندگی

محاسبه سطح مقطع

۱-۲-۸ تعریف حالت‌های مانای پراکندگی

الف) معادله ویژه مقدار هامیلتونی

ب) شکل مجانبی حالت‌های مانای پراکندگی

دامنه پراکندگی

۲-۲-۸ محاسبه سطح مقطع پراکندگی با استفاده از

جریان احتمال

الف) سیال احتمال وابسته به یک حالت مانای

پراکندگی

ب) جریان فرودی و جریان پراکنده

ج) عبارت سطح مقطع

د) تداخل امواج فرودی و پراکنده

۳-۲-۸ معادله انتگرالی پراکندگی

۴-۲-۸ تقریب بورن

الف) حل تقریبی معادله انتگرالی پراکندگی

ب) تعبیر عبارتها

۳-۸ پراکندگی توسط پتانسیل

مرکزی

۱-۳-۸ اصل روش پاره‌موچها

۲-۳-۸ حالت‌های مانای ذره آزاد

الف) حالت‌های مانای با تکانه خوش‌تعریف

امواج تخت

ب) حالت‌های مانای با تکانه زاویه‌ای

خوش‌تعریف امواج کروی آزاد

ج) خواص فیزیکی امواج کروی آزاد

د) بسط یک موج تخت برحسب امواج کروی

آزاد

روش پاره‌موچها

۳-۳-۸ پاره‌موچها در پتانسیل  $V(r)$

الف) معادله شعاعی، انتقال فاز

ب) مفهوم فیزیکی انتقال فاز

۴-۳-۸ رابطه سطح مقطع با انتقال فاز

الف) ساختن حالت مانای پراکندگی از

پاره‌موچها

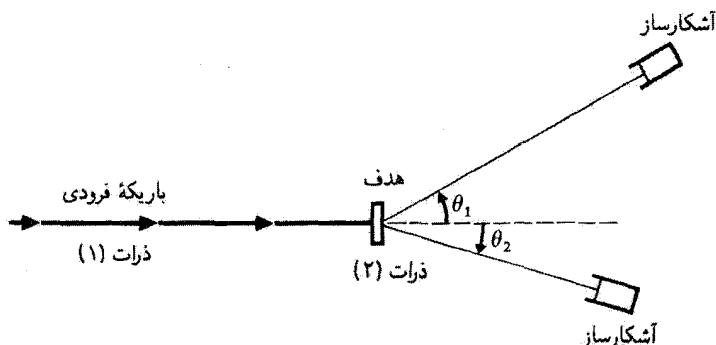
ب) محاسبه سطح مقطع

## ۱-۸ مقدمه

## ۱-۱-۸ اهمیت پدیده‌های برخورد

در بسیاری از آزمایشهای فیزیک، بخصوص در فیزیک انرژیهای بالا، باریکه‌ای از ذرات (۱) را (که مثلاً به‌کمک یک شتابدهنده تولید می‌شوند) به‌سوی هدفی متشکل از ذرات (۲) می‌فرستند و برخورد حاصل آنها را مطالعه می‌کنند. ذرات مختلف<sup>۱</sup> تشکیل‌دهندهٔ حالت نهایی سیستم — یعنی حالت بعد از برخورد (شکل ۱-۸) — را آشکارسازی می‌کنند و مشخصات آنها (جهت گسیل، انرژی و غیره) را اندازه می‌گیرند. واضح است که هدف از چنین مطالعه‌ای تعیین برهم‌کنشهایی است که میان ذرات برخوردکننده صورت می‌گیرد.

پدیده‌هایی که در پراکندگی ذرات مشاهده می‌شوند گاهی بسیار پیچیده‌اند. مثلاً، اگر ذرات (۱) و (۲) در واقع از اجزاء بنیادتری تشکیل شده باشند (مثل هسته‌ها که از پروتون و نوترون تشکیل شده‌اند)، این ذره‌های بنیادی می‌توانند، ضمن برخورد، میان دو یا چند ذرهٔ مرکب نهایی، که با ذرات اولیه فرق دارند، توزیع شوند؛ در این صورت اصطلاحاً می‌گوییم که ”برخوردهای بازآرایی“ صورت گرفته‌اند. علاوه بر این، در انرژیهای بالا، طبق نظریهٔ نسبیت، امکان نسبیتهی تبدیل ”ماده‌گرایی“ بخشی از انرژی به ماده هم به‌وجود می‌آید: در این صورت ذرات جدیدی ایجاد می‌شوند و حالت نهایی می‌تواند شامل تعداد زیادی از آنها باشد (هر چه انرژی باریکهٔ فرودی زیادتر باشد تعداد این ذرات هم بیشتر خواهد بود). به‌طور کلی می‌گوییم که، برخوردها منجر به واکنشهایی می‌شوند، که



شکل ۱-۸ نمودار آزمایش برخورد بین ذرات (۱) باریکهٔ فرودی و ذرات (۲) هدف. دو آشکارسازی که در شکل نشان داده شده‌اند تعداد ذرات پراکنده را تحت زاویه‌های  $\theta_1$  و  $\theta_2$  نسبت به باریکهٔ فرودی اندازه می‌گیرند.

۱. در عمل، همیشه امکان آشکارسازی تمام ذرات گسیل‌شده موجود نیست، و اغلب باید به اطلاعات جزئی دربارهٔ سیستم نهایی رضایت داد.

اغلب آنها را مانند واکنشهای شیمیایی می‌نویسیم

$$(1) + (2) \longrightarrow (3) + (4) + (5) + \dots \quad (1-8)$$

از میان تمام واکنشهای ممکن\* که در شرایط معین، روی می‌دهند واکنشهایی را که حالت نهایی آنها از همان ذرات (۱) و (۲) حالت اولیه تشکیل شده باشد، پراکندگی می‌گوییم. به علاوه، پراکندگی‌ای را که در آن هیچ‌یک از حالت‌های داخلی ذرات ضمن برخورد تغییر نکند، اصطلاحاً کشسان می‌نامیم.

### ۲-۱-۸ پراکندگی توسط پتانسیل

در این فصل فقط بررسی خود را به پراکندگی کشسان ذرات فرودی (۱) توسط ذرات هدف (۲) محدود می‌کنیم. اگر قوانین مکانیک کلاسیک قابل اعمال بودند، حل این مسئله شامل تعیین انحرافهایی می‌شد که "مسیرهای" ذرات فرودی بر اثر نیروهای وارد از طرف ذرات (۲) پیدا می‌کردند. روشن است که برای فرایندهایی که در مقیاس اتمی یا هسته‌ای رخ می‌دهند، نمی‌شود این مسئله را به وسیله مکانیک کلاسیک بررسی کرد؛ در این مورد باید تحول تابع موج وابسته به ذرات فرودی، در اثر برهم‌کنشهای آنها با ذرات هدف، را مطالعه کنیم [به‌همین دلیل است که از "پراکندگی" ذرات (۱) توسط ذرات (۲) صحبت می‌کنیم]. به‌جای پرداختن به شکل کلی این مسئله، فرضیه‌های ساده‌کننده زیر را ارائه می‌کنیم:

۱. فرض می‌کنیم که ذرات (۱) و (۲) بدون اسپین‌اند. این فرض، نظریه پراکندگی را به‌طور قابل‌ملاحظه‌ای ساده می‌کند، ولی معنایش این نیست که اسپین ذرات اهمیتی در پدیده‌های پراکندگی ندارد.

۲. ساختار داخلی ذرات (۱) و (۲) را نادیده می‌گیریم. بنابراین، مطالب زیر در مورد پدیده‌های پراکندگی "ناکشسان"، که در آنها [حالت نهایی در هر حال متشکل از ذرات (۱) و (۲) می‌باشد] بخشی از انرژی جنبشی ذرات فرودی جذب درجات آزادی داخلی (۱) و (۲) در حالت نهایی می‌شود، [مثل آزمایش فرانک و هرتز] در اینجا فقط مورد پراکندگی کشسان را بررسی می‌کنیم، که بر ساختار داخلی ذرات تأثیر نمی‌گذارد، می‌پردازیم.

۳. فرض می‌کنیم هدف آن‌قدر نازک باشد که بتوانیم از فرایندهای پراکندگی چندگانه، یعنی، فرایندهایی که در طی آنها یک ذره فرودی خاص، قبل از خروج از هدف چندین بار پراکنده می‌شود، صرف‌نظر کنیم.

\* چون فرایندهای مورد بررسی، در سطح کوانتومی رخ می‌دهند، عموماً نمی‌توان حالت نهایی ناشی از یک برخورد معین را با قطعیت پیش‌بینی کرد؛ سعی ما صرفاً پیش‌بینی احتمال حالت‌های مختلف ممکن است.

۴. امکان همدوسی میان امواج پراکنده از ذرات مختلف تشکیل دهنده هدف را کاملاً نادیده می‌گیریم. این فرض موقعی معقول است که، پهنای بسته‌موجهای وابسته به ذرات (۱) در مقایسه با فاصله متوسط میان ذرات (۲) کوچک باشد. بنابراین فقط فرایند ساده پراکندگی یک ذره (۱) از باریکه، توسط یک ذره (۲) از هدف را در نظر می‌گیریم. این امر تعدادی از پدیده‌های در عین حال جالب، نظیر پراکندگی همدوس توسط یک بلور (موسوم به پراش براگ) یا پراکندگی نوترونهای کند توسط فونونهای یک جامد را، که اطلاعات ارزشمندی درباره ساختار و دینامیک شبکه‌های بلوری به دست می‌دهند، مستثنی می‌کند. وقتی بتوان از این آثار همدوسی صرف‌نظر کرد، شار ذراتی که به آشکارساز می‌رسند عملاً با مجموع شارهای پراکنده از هر یک از  $\mathcal{N}$  ذره هدف، یعنی  $\mathcal{N}$  برابر شار پراکنده از تک‌تک آنها، برابر می‌شود (از آنجا که ابعاد هدف نسبت به فاصله آن تا آشکارساز خیلی کوچک است، اهمیتی ندارد که ذره پراکنده در داخل هدف کجا قرار گرفته باشد).

۵. فرض می‌کنیم که برهم‌کنشهای میان ذرات (۱) و (۲) را می‌شود با یک انرژی پتانسیل  $V(r_1 - r_2)$  توصیف کرد که فقط به مکان نسبی دو ذره،  $r = r_1 - r_2$  بستگی دارد. اگر استدلال بخش ۷-۲ از فصل هفتم را دنبال کنیم، آن وقت در چارچوب مرجع مرکز جرم\* دو ذره (۱) و (۲)، به همان مسئله پراکندگی یک تک‌ذره (ذره نسبی) توسط پتانسیل  $V(r)$  می‌رسیم؛ که جرم  $\mu$  آن طبق فرمول زیر به جرمهای  $m_1$  و  $m_2$  ذرات (۱) و (۲) ربط پیدا می‌کند

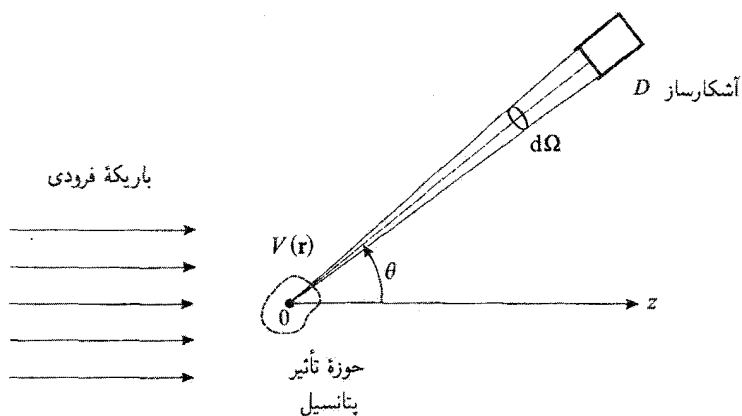
$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \quad (2-8)$$

### ۳-۱-۸ تعریف سطح منقطع پراکندگی

فرض کنید  $Oz$  جهت ذرات فرودی به جرم  $\mu$  باشد (شکل ۲-۸). پتانسیل  $V(r)$  در اطراف مبدأ دستگاه مختصات،  $O$ ، که در واقع مرکز جرم دو ذره حقیقی (۱) و (۲) هم هست، جایگزیده است. شار ذرات باریکه فرودی، یعنی، تعداد ذراتی را که در واحد زمان از واحد سطح عمود بر  $Oz$  واقع در ناحیه  $z$ های منفی بسیار بزرگ، عبور می‌کنند، با  $F_1^z$  نشان می‌دهیم (شار  $F_1^z$  را به قدر کافی ضعیف فرض می‌کنیم تا بتوانیم از برهم‌کنشهای میان ذرات مختلف باریکه فرودی صرف‌نظر کنیم).

در ناحیه دور از حوزه تأثیر پتانسیل، و در جهتی که با زوایای قطبی  $\theta$  و  $\varphi$  مشخص می‌شود، آشکارسازی قرار می‌دهیم که دهانه‌اش از  $O$  تحت زاویه فضایی  $d\Omega$  دیده شود (آشکارساز در

\* برای توضیح نتایج به دست آمده در آزمایشهای پراکندگی، به توضیح لازم است به چارچوب مرجع آزمایشگاه برگردیم. رفتن از یک چارچوب مرجع به چارچوب دیگر یک مسئله ساده سینماتیکی است که در اینجا در نظر گرفته نمی‌شوند. به عنوان مثال رجوع کنید به (۱۷.۱) Messiah جلد اول فصل دهم بند ۷.



شکل ۲-۸ باریکه فرودی با شار ذرات  $F_i$ ، که موازی محور  $Oz$  و بسیار بهتر از حوزه تأثیر پتانسیل  $V(\mathbf{r})$ ، که در  $O$  متمرکز است، فرض می‌شود. در ناحیه دور از حوزه تأثیر پتانسیل، آشکارساز ( $D$ ) قرار دارد که تعداد ذرات پراکنده در واحد زمان به داخل زاویه فضایی  $d\Omega$  را، که مرکز آن با زوایای قطبی  $\theta$  و  $\varphi$  مشخص می‌شود، اندازه می‌گیرد. تعداد  $dn$  متناسب با  $F_i$  و  $d\Omega$  است؛ ضریب این تناسب،  $\sigma(\theta, \varphi)$ ، را بنا به تعریف "سطح مقطع" پراکندگی در جهت  $(\theta, \varphi)$  می‌گویند.

فاصله‌ای از  $O$  قرار داده می‌شود که در مقایسه با ابعاد خطی حوزه تأثیر پتانسیل، زیاد باشد). بنابراین، می‌توانیم تعداد ذرات پراکنده در واحد زمان را، تحت زاویه فضایی  $d\Omega$ ، حول جهت  $(\theta, \varphi)$ ، شمارش کنیم.

واضح است که  $dn$  متناسب با  $d\Omega$  و شار فرودی  $F_i$  است. ضریب تناسب میان  $dn$  و  $F_i d\Omega$  را با  $\sigma(\theta, \varphi)$  نشان می‌دهیم

$$dn = F_i \sigma(\theta, \varphi) d\Omega \quad (3-8)$$

ابعاد  $dn$  و  $F_i$  به ترتیب  $T^{-1}$  و  $(L^2 T)^{-1}$  است. بنابراین،  $\sigma(\theta, \varphi)$  از جنس سطح است و سطح مقطع دیفرانسیلی پراکندگی در جهت  $(\theta, \varphi)$  نامیده می‌شود. سطح مقطعها را غالباً برحسب بارن یا اجزاء بارن می‌سنجند

$$1 \text{ بارن} = 10^{-24} \text{ cm}^2 \quad (4-8)$$

تعریف (۳-۸) را می‌توان به این صورت تفسیر کرد: تعداد ذراتی که در واحد زمان به آشکارساز



می‌رسند برابر با تعداد ذراتی است که در واحد زمان از سطح  $\sigma(\theta, \varphi)d\Omega$  یعنی سطح عمود بر امتداد  $Oz$  در باریکه فرودی، عبور می‌کنند.

همچنین، سطح مقطع کل پراکندگی  $\sigma$ ، با فرمول زیر تعریف می‌شود

$$\sigma = \int \sigma(\theta, \varphi) d\Omega \quad (5-8)$$

یادداشتها:

۱. تعریف (۳-۸)، که در آن  $dn$  متناسب با  $d\Omega$  است، حاکی از آن است که فقط ذرات پراکنده مورد نظرند. شار این ذرات که به آشکارساز  $D$  [که سطح آن ثابت و در جهت  $(\theta, \varphi)$  قرار گرفته است] می‌رسد با مربع فاصله میان  $O$  و  $D$  نسبت عکس دارد (این ویژگی، مشخصه یک شار پراکنده است). در عمل، عرض باریکه فرودی محدود است [گرچه عرض آن در مقایسه با ابعاد حوزه تأثیر  $V(r)$  بسیار بزرگ می‌ماند]، و آشکارساز طوری در خارج از مسیر آن قرار داده می‌شود که فقط ذرات پراکنده را دریافت کند. مسلماً چنین آرایشی، امکان اندازه‌گیری سطح مقطع در جهت  $\theta = 0$  (جهت جلو) را به دست نمی‌دهد، این کار فقط با برون‌یابی  $\sigma(\theta, \varphi)$  به‌ارزی مقادیر کوچک  $\theta$  میسر است.

۲. مفهوم سطح مقطع به پراکندگی کشسان محدود نمی‌شود: سطح مقطعهای واکنش نیز به‌طور مشابهی تعریف می‌شوند.

## ۴-۱-۸ خلاصه مطالب

بخش ۲-۸ به بررسی اجمالی پراکندگی توسط یک پتانسیل دلبخواه  $V(r)$  (که در عین حال با گرایش  $r$  به بینهایت میل کند، سریعتر از  $1/r$  کاهش می‌یابد) اختصاص داده شده است. ابتدا، در ۱-۲-۸، مفاهیم اساسی حالت‌های مانای پراکندگی و دامنه پراکندگی را معرفی می‌کنیم. سپس در ۲-۲-۸ نشان خواهیم داد که چگونه با تعیین سطح مقطعهای پراکندگی از روی رفتار مجانبی تابع موجهای وابسته به حالت‌های مانای پراکندگی، می‌توان سطح مقطعهای پراکندگی را تعیین کرد. و به دنبال آن، در ۳-۲-۸، با روشی دقیقتر، با استفاده از معادله انتگرالی پراکندگی، وجود این حالت‌های مانای پراکندگی را مورد بحث قرار می‌دهیم. بالاخره (در ۴-۲-۸)، یک حل تقریبی برای این معادله به دست می‌آوریم، که به‌ارزی پتانسیلهای ضعیف معتبر است. این جواب منجر به تقریب بورن می‌شود، که در آن سطح مقطع رابطه‌ای بسیار ساده با تبدیل فوریه پتانسیل دارد.

روشهای کلی پراکندگی در بخش ۲-۸، در مورد پتانسیل مرکزی  $V(r)$  نیز، به‌کار خواهند رفت، ولی روش "پاره‌موجها" که در بخش ۳-۸ بیان خواهیم کرد، معمولاً بر این روش ارجحیت دارد.

این روش (۸-۳-۱)، بر مقایسه حالت‌های مانای با تکانه زاویه‌ای خوش‌تعریف در حضور پتانسیل  $V(r)$  (که آنها را "پاره‌موج" می‌نامیم) و حالت‌های مانسته آنها در غیاب پتانسیل ("امواج کروی آزاد") مبتنی است. بدین جهت، ۸-۳-۲ را با مطالعه خواص اساسی حالت‌های مانای ذره آزاد، و به‌ویژه خواص امواج کروی آزاد، آغاز می‌کنیم. سپس در (۸-۳-۳) نشان خواهیم داد که اختلاف میان یک پاره‌موج در پتانسیل  $V(r)$  و یک موج کروی آزاد با همان تکانه زاویه‌ای  $l$ ، توسط یک "انتقال فاز"  $\delta_l$  مشخص می‌شود. بنابراین کافی است بدانیم که حالت‌های مانای پراکندگی چگونه از پاره‌موج‌ها ساخته می‌شوند تا بتوانیم فرمول سطح مقطع‌ها را برحسب انتقال فاز به‌دست بیاوریم.

## ۸-۲ حالت‌های مانای پراکندگی

### محاسبه سطح مقطع

برای توصیف کوانتومی پراکندگی یک ذره فرودی معین توسط پتانسیل  $V(r)$ ، باید تحول زمانی بسته‌موج معرف حالت ذره را بررسی کنیم. فرض می‌کنیم که مشخصات این بسته‌موج به‌ازاء مقادیر بزرگ و منفی زمان  $t$ ، که در آن ذره در ناحیه منفی محور  $z$  و از تأثیر پتانسیل  $V(r)$  به‌دور است، معلوم باشد. می‌دانیم که اگر بسته‌موج را به‌صورت برهم‌نشی از حالت‌های مانا بیان کنیم، می‌توانیم تحول بعدی آن را بلافاصله به‌دست بیاوریم. بدین جهت، ابتدا معادله ویژه مقدار هامیلتونی را مطالعه می‌کنیم

$$H = \bar{H}_0 + V(r) \quad (6-8)$$

که در آن

$$\bar{H}_0 = \frac{p^2}{2\mu} \quad (7-8)$$

معرف انرژی جنبشی ذره است.

در واقع، برای ساده کردن محاسبات، استدلال خود را مستقیماً بر پایه حالت‌های مانا بنا می‌کنیم و نه بر پایه بسته‌موج‌ها. از این روش قبلاً در فصل اول برای مطالعه پتانسیل‌های "مربعی" در یک بعد استفاده کرده‌ایم (بخش 2-1 و مکمل H<sub>1</sub>). در این روش، حالت مانا را به‌عنوان یک "سیال احتمال" در جریان دائم در نظر می‌گیریم و ساختار جریان‌های احتمال مربوط را مطالعه می‌کنیم. طبیعتاً، این استدلال ساده‌شده، دقیق نیست: آنچه باقی می‌ماند این است که نشان بدهیم این استدلال با راه حل صحیح مسئله، مبتنی بر بسته‌موج‌هاست، به نتیجه واحدی می‌انجامد. با پذیرش

این نکته، قادر خواهیم بود که بعضی ایده‌های کلی را به‌سادگی بسط بدهیم، بدون اینکه خود را در محاسبات پیچیده\* غرق کنیم.

### ۸-۲-۱ تعریف حالت‌های مانای پراکندگی

الف) معادلهٔ ویژه مقدار هامیلتونی

در معادلهٔ شرودینگر که تحول ذره در پتانسیل  $V(\mathbf{r})$  را توصیف می‌کند، جوابهایی با انرژی کاملاً معین  $E$  (حالت‌های مانا) صدق می‌کنند

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar} \quad (۸-۸)$$

که  $\varphi(\mathbf{r})$  جواب معادلهٔ ویژه مقدار زیر است

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + V(\mathbf{r}) \right] \varphi(\mathbf{r}) = E \varphi(\mathbf{r}) \quad (۹-۸)$$

فرض می‌کنیم که پتانسیل  $V(\mathbf{r})$ ، وقتی  $r$  به بینهایت میل می‌کند، سریعتر از  $1/r$  کاهش پیدا کند. توجه داشته باشید که این فرض، پتانسیل کولنی را، که مستلزم بررسی ویژه‌ای است، مستثنی می‌کند؛ ما در اینجا این پتانسیل را در نظر نخواهیم گرفت.

تنها جوابهایی از (۹-۸) مورد نظر ما خواهند بود که به یک انرژی مثبت  $E$ ، مساوی با انرژی جنبشی ذرهٔ فرودی پیش از رسیدن به حوزهٔ تأثیر پتانسیل، وابسته باشند. با قرار دادن

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \quad (۱۰-۸)$$

$$V(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2}{2\mu} U(\mathbf{r}) \quad (۱۱-۸)$$

می‌توان (۹-۸) را به این صورت نوشت

$$\left[ \Delta + k^2 - U(\mathbf{r}) \right] \varphi(\mathbf{r}) = 0 \quad (۱۲-۸)$$

\* اثبات این مطلب در مکتب J۱، برای یک مسئلهٔ خاص یک‌بعدی آمده است. در آنجا نشان داده‌ایم که محاسبهٔ جریان احتمال وابسته به یک حالت مانای پراکندگی، و مطالعهٔ تحول بسته‌موج توصیف‌کنندهٔ ذره‌ای که دستخوش برخورد قرار می‌گیرد، به یک نتیجه منجر می‌شوند.

به‌ازاء هر مقدار  $k$  (یعنی، هر مقدار انرژی  $E$ )، معادله (۸-۱۲) بینهایت جواب دارد (ویژه‌مقدارهای مثبت هامیلتونی  $H$ ، بینهایت بار واگن‌اند). نظیر مسائل پتانسیلهای "مربعی" یک‌بعدی (فصل ۱، بخش ۲-D و مکمل  $H_I$ )، باید از میان این جوابها، جوابی را که مربوط به مسئله فیزیکی مورد نظر است، انتخاب کنیم (مثلاً وقتی می‌خواستیم احتمال عبور ذره‌ای با انرژی معین از سد پتانسیل یک‌بعدی را تعیین کنیم حالت مانایی را انتخاب می‌کردیم که در سوی دیگر سد فقط شامل یک موج عبوری باشد). البته در اینجا، انتخاب پیچیده‌تر است، زیرا ذره در فضای سه‌بعدی حرکت می‌کند و پتانسیل  $V(r)$  دارای یک شکل دلخواه از پیش تعیین شده است. بنابراین، با استفاده از خواص بسته‌موج به روش شهودی، شرایطی را مشخص می‌کنیم که باید بر جوابهای معادله (۸-۱۲) تحمیل کرد تا این جوابها بتوانند در توصیف یک فرایند پراکندگی به‌کار روند. ویژه‌حالتهای هامیلتونی‌ای را که در این شرایط صدق می‌کنند، حالت‌های مانای پراکندگی می‌نامیم، و تابع‌موجهای وابسته به آنها را با  $v_k^{(diff)}(r)$  نشان می‌دهیم.

### ب) شکل مجانبی حالت‌های مانای پراکندگی

#### دامنه پراکندگی

به‌ازاء مقادیر منفی بزرگ  $t$ ، ذره فرودی آزاد است [عملاً در فاصله به‌قدر کافی دور از نقطه  $O$ ،  $V(r)$  صفر است]، و حالت آن توسط یک بسته‌موج تخت نمایش داده می‌شود. در نتیجه، تابع موج مانایی که در پی آن هستیم باید شامل جمله‌ای به شکل  $e^{ikz}$  باشد، که در آن  $k$  همان ثابتی است که در معادله (۸-۱۲) ظاهر می‌شود. وقتی بسته‌موج به قلمرو پتانسیل  $V(r)$  می‌رسد، ساختار آن عمیقاً تغییر می‌کند و تحول آن پیچیده می‌شود. مع‌ذک، به‌ازای مقادیر مثبت بزرگ  $t$ ، بسته‌موج از این ناحیه خارج می‌شود و مجدداً شکل ساده‌ای به‌خود می‌گیرد: در این حال، بسته‌موج به دو قسمت تفکیک می‌شود؛ یکی، بسته‌موج عبوری که به انتشار در امتداد  $Oz$  و در جهت مثبت ادامه می‌دهد (بنابراین دارای شکل  $e^{ikz}$  است)، و دیگری بسته‌موج پراکنده. در نتیجه، تابع موج  $v_k^{(diff)}(r)$ ، که معرف حالت مانای پراکندگی وابسته به انرژی معین  $E = \hbar^2 k^2 / 2\mu$  است، از برهم‌نهی موج تخت  $e^{ikz}$  و یک موج پراکنده به‌دست می‌آید (از مسئله بهنجارش صرف نظر می‌کنیم).

واضح است که ساختار موج پراکنده، به پتانسیل  $V(r)$  بستگی دارد. مع‌ذک، شکل مجانبی آن (که در ناحیه دور از حوزه تأثیر پتانسیل، معتبر است) ساده است. با استدلالی مشابه با نور موجی، مشاهده می‌کنیم که موج پراکنده باید به‌ازاء مقادیر بزرگ  $r$ ، مشخصات زیر را داشته باشد: ۱. در یک جهت معین  $(\theta, \varphi)$ ، وابستگی شعاعی آن به‌صورت  $e^{ikr}/r$  است. این یک موج

واگرا (یا "خروجی") با همان انرژی موج فرودی است. ضریب  $1/r$  ناشی از این واقعیت است که سه بعد فضایی وجود دارد:  $e^{ikr}(\Delta + k^2)$  صفر نیست، در حالی که

$$\left(\Delta + k^2\right) \frac{e^{ikr}}{r} = 0 \quad \text{به‌ازاء } r \geq r_0 \quad (13-8)$$

که  $r_0$  یک عدد دلخواه مثبت است (در مورد نور، ضریب  $1/r$  تضمین می‌کند که شار کل انرژی گذرنده از کره‌ای به شعاع  $r$ ، به‌ازاء مقادیر بزرگ  $r$ ، از  $r$  مستقل باشد؛ در مکانیک کوانتومی، این شار احتمال است که در عبور از این کره به  $r$  بستگی ندارد).

۲. چون پراکندگی عموماً همسانگرد نیست، دامنهٔ موج خروجی به جهت  $(\theta, \varphi)$  مورد نظر بستگی دارد.

بالاخره تابع موج  $v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r})$  وابسته به حالت مانای پراکندگی، بنا بر تعریف، جواب معادلهٔ (۱۲-۸) است که رفتار مجانبی آن به‌صورت زیر است

$$v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{ikz} + f_k(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (14-8)$$

در این عبارت، فقط تابع  $f_k(\theta, \varphi)$  که دامنهٔ پراکندگی نامیده می‌شود، به پتانسیل  $V(\mathbf{r})$  بستگی دارد. می‌توان نشان داد که (با ۳-۲-۸ مقایسه کنید) معادلهٔ (۱۲-۸)، به‌ازاء هر مقدار  $k$ ، محققاً دارای یک جواب و فقط یک جواب است که در شرط (۱۴-۸) صدق می‌کند.

یادداشتها:

۱. قبلاً متذکر شدیم که، برای به‌دست آوردن تحول زمانی بسته‌موج معرف حالت ذرهٔ فرودی، به‌جای بسط دادن آن برحسب امواج تخت، باید آن را برحسب ویژه‌حالت‌های هامیلتونی کل  $H$  بسط بدهیم. بنابراین تابع موجی به‌شکل زیر<sup>۱</sup> را در نظر می‌گیریم

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int_0^\infty dk g(k) v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r}) e^{-iE_k t/\hbar} \quad (15-8)$$

که در آن

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \quad (16-8)$$

۱. در واقع، باید امواج تخت وابسته به بردار موجهای  $k$  را نیز که جهات آنها اندکی با هم اختلاف دارند، برهم نهمیم، زیرا بسته‌موج فرودی در جهت عمود بر  $Oz$  محدود است. در اینجا برای سهولت، توجه خود را فقط به پاشیدگی انرژی (که پاشیدگی بسته‌موج را در راستای  $Oz$  محدود می‌کند) معطوف می‌کنیم.

است و تابع  $g(k)$ ، که برای سهولت حقیقی فرض می‌شود، دارای قله‌ای متمایز در  $k = k_0$  است و عملاً در هر جای دیگری صفر است.  $\psi(\mathbf{r}, t)$  یک جواب معادله شروdingر است و لذا می‌تواند به نحو صحیحی تحول زمانی ذره را توصیف کند. آنچه باقی می‌ماند این است که نشان بدهیم این تابع واقعاً شرایط مرزی اعمال شده توسط مسئله فیزیکی خاص مورد مطالعه را، برقرار می‌سازد. مطابق (۱۴-۸)، این تابع به طور مجانبی، به حاصل جمع یک بسته موج تخت و یک بسته موج پراکنده می‌گراید

$$\psi(\mathbf{r}, t) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \int_0^{\infty} dk g(k) e^{ikz} e^{-iE_k t/\hbar} + \int_0^{\infty} dk g(k) f_k(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} e^{-iE_k t/\hbar} \quad (17-8)$$

مکان ماکزیموم هر یک از این بسته‌ها را می‌توانیم از شرط مانایی فاز پیدا کنیم (فصل اول بخش ۳-۸). با یک محاسبه ساده، برای بسته موج تخت داریم

$$z_M(t) = v_G t \quad (18-8)$$

با

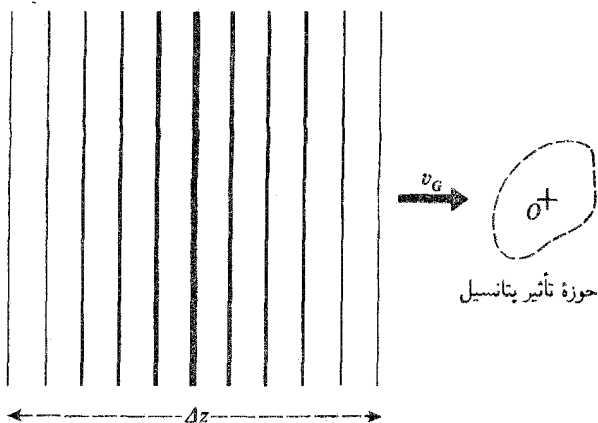
$$v_G = \frac{\hbar k_0}{\mu} \quad (19-8)$$

اما در مورد بسته موج پراکنده می‌توان گفت که، ماکزیموم آن در جهت  $(\theta, \varphi)$ ، در فاصله‌ای از نقطه  $O$  واقع است، که با معادله زیر داده می‌شود

$$r_M(\theta, \varphi; t) = -\alpha'_{k_0}(\theta, \varphi) + v_G t \quad (20-8)$$

در این رابطه،  $\alpha'_{k_0}(\theta, \varphi)$  مشتق آرگومان دامنه پراکندگی  $f_k(\theta, \varphi)$  نسبت به  $k$  است. توجه داشته باشید که فرمولهای (۱۸-۸) و (۱۹-۸) فقط در ناحیه مجانبی، یعنی به ازای مقادیر بزرگ  $|t|$ ، معتبرند.

به ازاء مقادیر بزرگ منفی  $t$ ، همان‌گونه که (۱۹-۸) نشان می‌دهد، هیچ بسته موج پراکنده‌ای وجود ندارد. امواج متشکله آن فقط به ازاء مقادیر منفی  $t$  تداخل سازنده دارند، و این مقادیر در خارج از ناحیه تغییرات مجاز  $t$  هستند. بنابراین، آنچه در این ناحیه وجود دارد بسته موج تختی است که، بنابر (۱۸-۸)، با سرعت گروه  $v_G$  به سوی ناحیه برهم‌کنش پیش می‌رود. به ازاء مقادیر مثبت



شکل ۸-۳ بسته موج فرودی به طول  $\Delta z$  با سرعت  $v_G$  به سوی پتانسیل  $V(x)$  حرکت می‌کند؛ این بسته در فاصله زمانی حدود  $\Delta T = \Delta z / v_G$ ، (با فرض اینکه بعد حوزه تأثیر پتانسیل در مقابل  $\Delta z$  قابل اغماض باشد) با پتانسیل برهم‌کنش می‌کند.

بزرگ  $t$ ، در واقع هر دو بسته حضور دارند؛ بسته اول در امتداد مثبت محور  $Oz$ ، در ادامه مسیر بسته فرودی، دور می‌شود، و بسته دوم در تمام جهات فضا وامی‌گراید. بنابراین شرط جانبی (۸-۱۴) به خوبی فرایند پراکندگی را توصیف می‌کند.

۲. گسترش فضایی  $\Delta z$  بسته موج (۸-۱۵) طبق رابطه زیر به پاشندگی تکانه،  $\hbar \Delta k$ ، مربوط است

$$\Delta z \simeq \frac{1}{\Delta k} \quad (۸-۲۱)$$

فرض خواهیم کرد  $\Delta k$  به قدر کافی کوچک باشد تا  $\Delta z$  نسبت به ابعاد خطی حوزه تأثیر پتانسیل، بزرگ باشد. تحت این شرایط، بسته موجی که با سرعت  $v_G$  به سوی نقطه  $O$  (شکل ۸-۳)، حرکت می‌کند در مدت زمان

$$\Delta T \simeq \frac{\Delta z}{v_G} \simeq \frac{1}{v_G \Delta k} \quad (۸-۲۲)$$

از این ناحیه خواهد گذشت. مبدأ زمان را لحظه رسیدن مرکز بسته موج فرودی به نقطه  $O$  اختیار می‌کنیم. امواج پراکنده فقط به ازاء  $t \geq -\Delta T / 2$ ، یعنی، بعد از رسیدن لبه جلویی بسته موج فرودی به حوزه تأثیر پتانسیل وجود دارند. در لحظه  $t = 0$  دورترین قسمت بسته موج پراکنده، در فاصله‌ای  $\Delta z / 2$ ، از نقطه  $O$  قرار دارد.

حال مسئله متفاوتی را در نظر می‌گیریم، که در آن پتانسیل وابسته به زمانی داریم که از حاصلضرب  $V(\mathbf{r})$  در یک تابع  $f(t)$ ، که بین  $t = -\Delta T/2$  تا  $t = 0$ ، به‌کندی از  $0$  تا  $1$  افزایش پیدا می‌کند، به‌دست می‌آید. به‌ازای  $t$  خیلی کوچکتر از  $-\Delta T/2$ ، پتانسیل صفر است و فرض خواهیم کرد که حالت ذره با یک موج تخت (که تمام فضا را در بر می‌گیرد) نشان داده می‌شود. این موج تخت فقط در  $t \simeq -\Delta T/2$  شروع به تغییر شکل می‌کند، و در لحظه  $t = 0$  امواج پراکنده، شبیه امواج حالت قبل‌اند.

بنابراین ملاحظه می‌کنیم که، تشابه خاصی میان این دو مسئله متفاوت وجود دارد: از یک سو، با پراکندگی یک بسته‌موج فرودی توسط پتانسیل ثابت مواجهیم، که دامنه آن در نقطه  $O$  بین زمانهای  $-\Delta T/2$  و صفر، به‌تدریج زیاد می‌شود؛ و از سوی دیگر با پراکندگی یک موج تخت، با دامنه ثابت، توسط پتانسیلی روبه‌رو هستیم که به‌آهستگی در همان فاصله زمانی  $[-\Delta T/2, 0]$  "برقرار می‌شود".

اگر  $\Delta k \rightarrow 0$ ، بسته‌موج (۸-۱۵) به‌سوی یک حالت مانای پراکندگی می‌گراید  $[g(k)]$  به‌سمت  $(k_0)$   $\delta(k - k_0)$  میل می‌کند؛ علاوه بر این، بنا بر (۸-۲۲)،  $\Delta T$  نامتناهی و برقراری پتانسیل وابسته به  $f(t)$  بینهایت کُند می‌شود (به همین دلیل است که اغلب آن را "اتصال بی‌دررو" می‌نامیم). بنابراین، بحث قبلی، هر چند به‌طور بسیار کیفی، تشریح حالت مانای پراکندگی را به‌عنوان نتیجه‌ای که از اعمال بی‌درروی پتانسیل پراکنده بر روی موج تحت آزاد حاصل می‌شود، ممکن می‌سازد. می‌توان این تعبیر را، با مطالعه مفصلتر تحول موج تخت اولیه در پتانسیل  $f(t)V(\mathbf{r})$ ، دقیقتر کرد.

## ۲-۲-۲ محاسبه سطح مقطع پراکندگی با استفاده از جریان احتمال

(الف) سیال احتمال وابسته به یک حالت مانای پراکندگی

برای تعیین سطح مقطع پراکندگی، باید پراکندگی بسته‌موج فرودی توسط پتانسیل  $V(\mathbf{r})$  را به‌دقت مطالعه کرد. با این همه، می‌توان به‌طور بسیار ساده‌تری این نتیجه را با بحث بر روی حالت‌های مانای پراکندگی به‌دست آورد؛ چنین حالتی را برای توصیف سیال احتمال در شارش داریم، در نظر می‌گیریم و سطح مقطع را از روی جریان‌های فرودی و پراکنده محاسبه می‌کنیم. همان‌طور که قبلاً متذکر شدیم، این روش، مانسته روشی است که در مسائل سد "مربعی" یک‌بعدی به‌کار برده‌ایم: در آن مسائل، نسبت بین جریان بازتابیده (یا عبوری) و جریان فرودی، مستقیماً ضریب بازتاب (یا عبور) را به‌دست می‌داد.

بنابراین سهم موج فرودی و موج پراکنده را در جریان احتمال یک حالت مانای پراکندگی محاسبه می‌کنیم: یادآور می‌شویم که جریان  $\mathbf{J}(\mathbf{r})$  وابسته به یک تابع موج  $\varphi(\mathbf{r})$  عبارت است از

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\mu} \operatorname{Re} \left[ \varphi^*(\mathbf{r}) \frac{\hbar}{i} \nabla \varphi(\mathbf{r}) \right] \quad (۲۳-۸)$$



ب) جریان فرودی و جریان پراکنده

جریان فرودی  $\mathbf{J}_i$ ، از (۸-۲۳)، با نشان دادن موج تخت  $e^{ikz}$ ، به جای  $\varphi(\mathbf{r})$  به دست می‌آید؛ بنابراین  $\mathbf{J}_i$  در امتداد محور  $Oz$  و در جهت مثبت آن است و مدول آن برابر است با

$$|\mathbf{J}_i| = \frac{\hbar k}{\mu} \quad (۸-۲۴)$$

از آنجا که موج پراکنده در فرمول (۸-۱۴) در مختصات کروی بیان شده است، مؤلفه‌های جریان پراکنده  $\mathbf{J}_d$  را بر روی محورهای موضعی‌ای که توسط این سیستم مختصات تعریف می‌شوند، حساب می‌کنیم. مؤلفه‌های مربوط به عملگر  $\nabla$  را یادآور می‌شویم

$$\begin{aligned} (\nabla)_r &= \frac{\partial}{\partial r} \\ (\nabla)_\theta &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \\ (\nabla)_\varphi &= \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{aligned} \quad (۸-۲۵)$$

اگر در فرمول (۸-۲۳)، به جای  $\varphi(\mathbf{r})$  تابع  $f_k(\theta, \varphi)e^{ikr}/r$  را قرار بدهیم، می‌توانیم به راحتی جریان پراکنده را در ناحیهٔ مجانبی به دست بیاوریم

$$\begin{aligned} (\mathbf{J}_d)_r &= \frac{\hbar k}{\mu} \frac{1}{r^2} |f_k(\theta, \varphi)|^2 \\ (\mathbf{J}_d)_\theta &= \frac{\hbar}{\mu} \frac{1}{r^2} \operatorname{Re} \left[ \frac{1}{i} f_k^*(\theta, \varphi) \frac{\partial}{\partial \theta} f_k(\theta, \varphi) \right] \\ (\mathbf{J}_d)_\varphi &= \frac{\hbar}{\mu} \frac{1}{r^2 \sin \theta} \operatorname{Re} \left[ \frac{1}{i} f_k^*(\theta, \varphi) \frac{\partial}{\partial \varphi} f_k(\theta, \varphi) \right] \end{aligned} \quad (۸-۲۶)$$

چون  $r$  بزرگ است.  $(\mathbf{J}_d)_\theta$  و  $(\mathbf{J}_d)_\varphi$  در مقابل  $(\mathbf{J}_d)_r$  قابل اغماض‌اند و جریان پراکنده عملاً شعاعی است.

ج) عبارت سطح مقطع

باریکهٔ فرودی متشکل از ذرات مستقلی است، که بنا به فرض تماماً به یک روش تهیه می‌شوند. فرستادن تعداد زیادی از این ذرات مثل این است که یک آزمایش را با ذره‌ای که حالت آن همیشه

یکسان است، به دفعات تکرار کنیم. اگر این حالت  $v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r})$  باشد، واضح است که شار فرودی  $F_i$  (یعنی، تعداد ذراتی از باریکه فرودی که در واحد زمان از واحد سطح عمود بر  $Oz$  می‌گذرند) متناسب با شار بردار  $\mathbf{J}_i$  گذرنده از این سطح است؛ یعنی، بنابر (۸-۲۴)

$$F_i = C |\mathbf{J}_i| = C \frac{\hbar k}{\mu} \quad (۸-۲۷)$$

همچنین، تعداد  $dn$  ذراتی که در واحد زمان به دهانه آشکارساز برخورد می‌کنند، [شکل (۸-۲)]] متناسب با شار بردار  $\mathbf{J}_d$  است که از سطح  $dS$  این دهانه می‌گذرد [ثابت تناسب  $C$  همان ثابت تناسب (۸-۲۷) است]

$$\begin{aligned} dn &= C \mathbf{J}_d \cdot d\mathbf{S} = C (\mathbf{J}_d)_r r^2 d\Omega \\ &= C \frac{\hbar k}{\mu} |f_k(\theta, \varphi)|^2 d\Omega \end{aligned} \quad (۸-۲۸)$$

ملاحظه می‌کنیم که اگر  $r$  به قدر کافی بزرگ باشد،  $dn$  مستقل از  $r$  است. اگر فرمولهای (۸-۲۷) و (۸-۲۸) را در تعریف (۸-۳) سطح مقطع دیفرانسیلی  $\sigma(\theta, \varphi)$  قرار بدهیم، نتیجه می‌شود

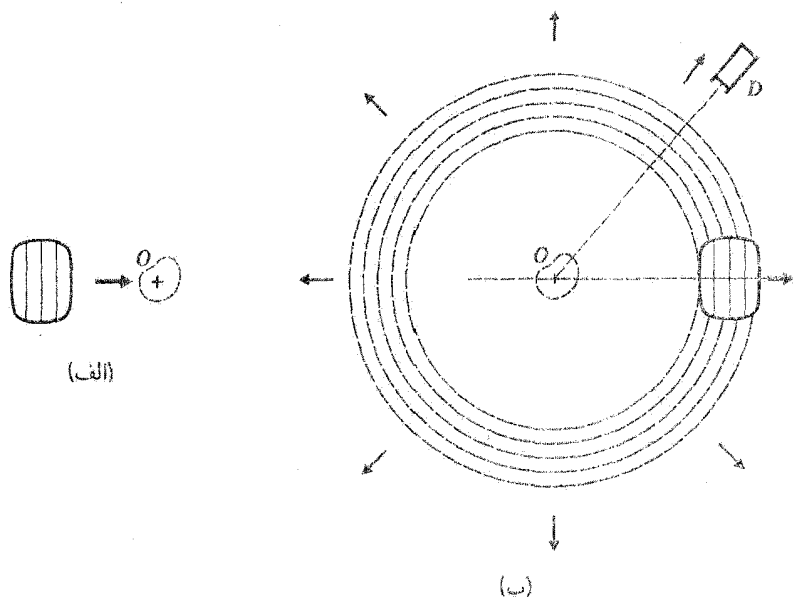
$$\boxed{\sigma(\theta, \varphi) = |f_k(\theta, \varphi)|^2} \quad (۸-۲۹)$$

بنابراین، سطح مقطع دیفرانسیلی، صرفاً همان مربع مدول دامنه پراکندگی است.

### د) تداخل امواج فرودی و پراکنده

در بخشهای گذشته، از دخالت یک عامل در جریان وابسته به  $v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r})$  در ناحیه مجانبی، صرف نظر کرده‌ایم؛ و آن عاملی است که از تداخل موج تخت  $e^{ikz}$  و موج پراکنده ناشی می‌شود، و از قرار دادن  $e^{-ikz}$  به جای  $\varphi^*(\mathbf{r})$  در (۸-۲۳) و  $f_k(\theta, \varphi)e^{ikr}/r$  به جای  $\varphi(\mathbf{r})$ ، و بالعکس، به دست می‌آید.

با این همه می‌توانیم خودمان را متقاعد کنیم، که برای پراکندگی در جهتایی غیر از جهت جلو ( $\theta = 0$ )، این عبارتهای تداخلی ظاهر نمی‌شوند. برای این منظور، به توصیف برخورد برحسب بسته‌موجها برمی‌گردیم (شکل ۸-۴)، و این واقعیت را که، بسته‌موج عملاً همیشه دارای یک پهنای جانبی است، مورد نظر قرار می‌دهیم. در آغاز، بسته‌موج فرودی به سوی حوزه تأثیر پتانسیل  $V(\mathbf{r})$  در حرکت است (شکل ۸-۴الف). پس از برخورد، با (شکل ۸-۴ب)، با دو بسته‌موج مواجه هستیم: یکی بسته‌موج تخت ناشی از انتشار



شکل ۴.۸ قبل از برخورد (شکل الف)، بسته‌موج فرودی به‌سوی حوزه تأثیر پتانسیل در حرکت است. پس از برخورد (شکل ب)، یک بسته‌موج تخت و یک بسته‌موج کروی پراکنده توسط پتانسیل مشاهده می‌کنیم (دوایر نقطه‌چین در شکل). امواج تخت و کروی در جهت جلو تداخل ویرانگر دارند (پایستگی احتمال کل): آشکارساز  $D$  در یک امتداد جانبی قرار داده می‌شود و فقط امواج پراکنده به آن می‌رسند.

بسته‌موج فرودی (مانند اینکه هیچ پتانسیل پراکنده‌ای وجود نداشته است) و دیگری بسته‌موج پراکنده که از نقطه  $O$  در تمام جهات دور می‌شود. بنابراین، موج عبوری از تداخل این دو بسته‌موج حاصل می‌شود. ولی، عموماً آشکارساز  $D$  را در خارج باریکه قرار می‌دهیم، تا ذرات عبوری به آن برخورد نکنند؛ به این ترتیب فقط بسته‌موج پراکنده را مشاهده می‌کنیم و لازم نیست که عبارتهای تداخلی یادشده را به حساب بیاوریم.

با این همه از شکل (۴.۸ ب) پیداست که نمی‌توان در جهت جلو از تداخل بسته‌موج تخت و بسته‌موج پراکنده، که ناحیه مشترکی از فضا را اشغال می‌کنند، صرف‌نظر کرد، بسته‌موج عبوری نتیجه این تداخل است. از طرف دیگر، این بسته‌موج باید دامنه‌ای کوچکتر از بسته‌موج فرودی داشته باشد، زیرا احتمال کل پایسته است (یعنی پایستگی تعداد ذرات؛ ذرات پراکنده در تمام جهات فضا، غیر از جهت جلو، باریکه را ترک می‌کنند. در نتیجه شدت باریکه پس از عبور از هدف کاهش می‌یابد). بنابراین، تداخل ویرانگر بسته‌موجهای تخت و بسته‌موجهای پراکنده به‌طرف جلو است که پایستگی کلی تعداد کل ذرات را تضمین می‌کند.

## ۸-۲-۳ معادله انتگرالی پراکندگی

حال، با روشی دقیقتر از روش بخش ۸-۲-۱ ب نشان می‌دهیم، که چطور می‌توان وجود تابع موجهای مانایی را، که رفتار مجانبی آنها به شکل (۸-۱۴) است، ثابت کرد. برای این منظور، معادله انتگرالی پراکندگی را، که جوابهای آن دقیقاً همین توابع تابع موجهای حالت‌های مانای پراکندگی هستند، معرفی می‌کنیم.

به معادله ویژه مقدار  $H$  [فرمول (۸-۱۲)] برمی‌گردیم و آن را به صورت زیر می‌نویسیم

$$(\Delta + k^2)\varphi(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}) \quad (۸-۳۰)$$

فرض می‌کنیم (بعداً خواهیم دید که در واقع این چنین است) تابعی مانند  $G(\mathbf{r})$  وجود دارد به طوری که

$$(\Delta + k^2)G(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}) \quad (۸-۳۱)$$

$G(\mathbf{r})$  را "تابع گرین" عملگر  $\Delta + k^2$  می‌نامند]. به این ترتیب هر تابع  $\varphi(\mathbf{r})$  که در رابطه

$$\varphi(\mathbf{r}) = \varphi_0(\mathbf{r}) + \int d^3r' G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\varphi(\mathbf{r}') \quad (۸-۳۲)$$

صدق می‌کند، که در آن  $\varphi_0(\mathbf{r})$  جواب معادله همگن

$$(\Delta + k^2)\varphi_0(\mathbf{r}) = 0 \quad (۸-۳۳)$$

است، از معادله دیفرانسیل (۸-۳۰) تبعیت خواهد کرد. برای نشان دادن این مطلب، عملگر  $(\Delta + k^2)$  را بر دو طرف (۸-۳۲) اعمال می‌کنیم؛ با در نظر گرفتن (۸-۳۳)، داریم

$$(\Delta + k^2)\varphi(\mathbf{r}) = (\Delta + k^2) \int d^3r' G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\varphi(\mathbf{r}') \quad (۸-۳۴)$$

با این فرض که بتوان این عملگر را به داخل انتگرال برد، عملگر فقط روی تغییر  $\mathbf{r}$  اثر می‌کند و لذا، بنابر (۸-۳۱)، خواهیم داشت

$$\begin{aligned} (\Delta + k^2)\varphi(\mathbf{r}) &= \int d^3t' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\varphi(\mathbf{r}') \\ &= U(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (۸-۳۵)$$

بالعکس، می‌توان نشان داد که هر یک از جوابهای (۸-۳۰) در معادله انتگرالی (۸-۳۲) صدق می‌کند.<sup>۱</sup> بنابراین، می‌توان معادله دیفرانسیل (۸-۳۰) را با معادله انتگرالی (۸-۳۲) جایگزین کرد. خواهیم دید که اغلب ساده‌تر است استدلال خود را بر روی معادله انتگرالی بنا کنیم. مزیت اصلی این کار در آن است که با انتخاب صحیح  $\varphi_0(r)$  و  $G(r)$ ، می‌توان رفتار مجانبی مطلوب را در معادله وارد کرد. بنابراین، یک معادله انتگرالی، که موسوم به معادله انتگرالی پراکندگی است، به تنهایی با معادله دیفرانسیل (۸-۳۰) و شرط مجانبی (۸-۱۴) معادل می‌شود.

ابتدا معادله (۸-۳۱) را در نظر می‌گیریم. این معادله حاکی از آن است که  $G(r)$  باید در هر ناحیه‌ای که شامل مبدأ نیست متحد با صفر باشد [که، بنابر (۸-۱۳)، همان حالتی است که  $G(r)$  برابر با  $e^{ikr}/r$  است]. به علاوه، بنا به فرمول (۶۱) از پیوست ۲، وقتی  $r$  به سمت صفر میل می‌کند،  $G(r)$  باید مانند  $-1/4\pi r$  رفتار کند. در واقع، به سهولت می‌توان نشان داد که توابع

$$G_{\pm}(r) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ikr}}{r} \quad (۸-۳۶)$$

جوابهای معادله (۸-۳۱) هستند. می‌توان نوشت

$$\begin{aligned} \Delta G_{\pm}(r) &= e^{\pm ikr} \Delta \left( -\frac{1}{4\pi r} \right) - \frac{1}{4\pi r} \Delta (e^{\pm ikr}) \\ &+ 2 \left[ \nabla \left( -\frac{1}{4\pi r} \right) \right] \cdot [\nabla e^{\pm ikr}] \end{aligned} \quad (۸-۳۷)$$

سپس با یک محاسبه ساده (پیوست ۲) داریم

$$\Delta G_{\pm}(r) = -k^2 G_{\pm}(r) + \delta(r) \quad (۸-۳۸)$$

که، همان چیزی است که می‌خواستیم ثابت کنیم.  $G_+$  و  $G_-$ ، به ترتیب، "توابع گرین خروجی و ورودی" نامیده می‌شوند.

شکل واقعی رفتار مجانبی مطلوب (۸-۱۴) پیشنهاد می‌کند که برای  $\varphi_0(r)$ ، موج تخت فرودی  $e^{ikz}$  و برای  $G(r)$ ، تابع گرین خروجی  $G_+(r)$  را انتخاب کنیم. در واقع می‌خواهیم نشان

۱. اگر  $U(r)\varphi(r)$  را به عنوان طرف راست یک معادله دیفرانسیل تلقی کنیم، مطلب قابل درک می‌شود: به این ترتیب، جواب عمومی (۸-۳۰)، از اضافه کردن جواب عمومی معادله بدون طرف ثانی به یک جواب خصوصی معادله کامل [جمله دوم (۸-۳۲)] به دست می‌آید.

بدهیم که می‌توان معادله انتگرالی پراکندگی را به این صورت نوشت

$$v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r}) = e^{ikz} + \int d^3r' G_+(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r}') \quad (39-8)$$

که جوابهای آن معرف رفتار مجانبی (۱۴-۸) هستند.

برای این منظور، در نقطه‌ای مانند  $M$  (مکان  $\mathbf{r}'$ )، بسیار دور از نقاط مختلف  $P$  (مکان  $\mathbf{r}'$ )

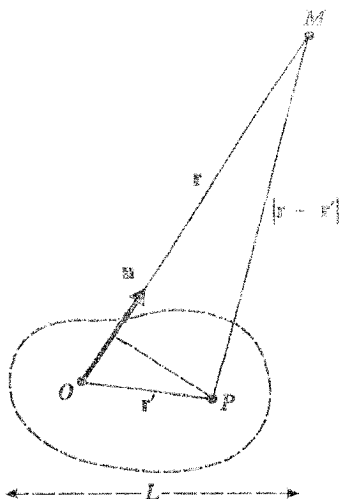
واقع در حوزه تأثیر پایستگی که ابعاد خطی آن از مرتبه  $L$  است، قرار می‌گیریم (شکل ۵-۸)

$$r \gg L$$

$$r' \lesssim L \quad (40-8)$$

چون زاویه بین  $MO$  و  $MP$  بسیار کوچک است، طول  $MP$  (یعنی،  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ ) با تقریب خوبی برابر با تصویر  $MP$  بر روی  $MO$  است

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \simeq r - \mathbf{u} \cdot \mathbf{r}' \quad (41-8)$$



شکل ۵-۸ محاسبه تقریبی فاصله  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$  بین نقطه‌ای مثل  $M$ ، که در فاصله بسیار زیادی از  $O$  قرار دارد، و نقطه‌ای مثل  $P$ ، که در حوزه اثر پتانسیل قرار دارد (ابعاد این حوزه تأثیر از مرتبه  $L$  است).

۱. به خاطر بیاورید که به طور ضمنی فرض کرده‌ایم که  $U(\mathbf{r})$ ، در بینهایت، سریعتر از  $1/r$  کاهش می‌یابد.

که در آن  $\mathbf{u}$  بردار یکه در جهت  $\mathbf{r}$  است. از اینجا نتیجه می‌شود که به‌ازاء مقادیر بزرگ  $r$  داریم

$$G_+(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} e^{-ik\mathbf{u}\cdot\mathbf{r}'} \quad (42-8)$$

با قرار دادن این عبارت در معادله (۳۹-۸)، رفتار مجانبی  $v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r})$  به دست می‌آید

$$v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{ikz} - \frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3r' e^{-ik\mathbf{u}\cdot\mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r}') \quad (43-8)$$

که در واقع دارای همان شکل (۱۴-۸) است، زیرا این انتگرال، دیگر تابع فاصله  $r = OM$  نیست، و فقط (از طریق بردار یکه  $\mathbf{u}$ ) تابعی از زوایای قطبی  $\theta$  و  $\varphi$  است، که جهت بردار  $\mathbf{OM}$  را مشخص می‌کنند. بنابراین، با قرار دادن

$$f_k(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3r' e^{-ik\mathbf{u}\cdot\mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r}') \quad (44-8)$$

به رابطه‌ای یکسان با (۱۴-۸) می‌رسیم.

به این ترتیب، واضح است که جوابهای معادله انتگرالی پراکندگی (۳۹-۸)، در واقع همان حالت‌های مانای پراکندگی اند.

یادداشت:

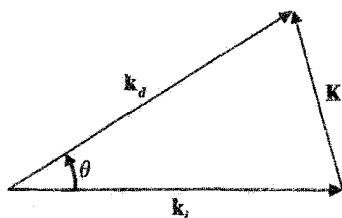
اغلب راحت‌تر است که بردار موج فرودی  $\mathbf{k}_i$  را به صورت برداری با قدرمطلق  $k_i$ ، در امتداد محور  $Oz$  باریکه تعریف کنیم به طوری که

$$e^{ikz} = e^{-ik_i \cdot \mathbf{r}} \quad (45-8)$$

به همین طریق، بردار  $\mathbf{k}_d$  را که، دارای همان قدرمطلق  $k_d$  بردار موج فرودی است ولی جهت آن توسط زوایای قطبی  $\theta$  و  $\varphi$  مشخص می‌شود، بردار موج پراکنده در جهت  $(\theta, \varphi)$ ، می‌نامیم

$$\mathbf{k}_d = k\mathbf{u} \quad (46-8)$$

۱. به منظور اثبات دقیق وجود حالت‌های مانای پراکندگی، کافی است نشان بدهیم که معادله (۳۹-۸) دارای جواب است.



شکل ۶-۸ بردارهای موج فرودی  $k_i$ ، پراکنده  $k_d$  و انتقالی  $K$ .

بالاخره، بردار موج پراکندگی (یا انتقالی) در جهت  $(\theta, \varphi)$  برابر است با تفاضل  $k_d$  و  $k_i$  (شکل ۶-۸)

$$K = k_d - k_i \quad (۴۷-۸)$$

۴-۲-۸ تقریب بورن

الف) حل تقریبی معادله انتگرالی پراکندگی

با در نظر گرفتن (۴۵-۸)، می‌توانیم معادله انتگرالی پراکندگی را به صورت زیر بنویسیم

$$v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} + \int d^3r' G_+(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r}') \quad (۴۸-۸)$$

حال می‌خواهیم این معادله را به روش تکرار حل کنیم.

با تغییر ساده‌ای در نمادگذاری ( $\mathbf{r} \Rightarrow \mathbf{r}'; \mathbf{r}' \Rightarrow \mathbf{r}''$ ) می‌توانیم بنویسیم

$$v_k^{(\text{diff})} = e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}'} + \int d^3r'' G_+(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') U(\mathbf{r}'') v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r}'') \quad (۴۹-۸)$$

با قرار دادن این عبارت در (۴۸-۸)، نتیجه می‌شود

$$\begin{aligned} v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} + \int d^3r' G_+(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}'} \\ &+ \int d^3r' \int d^3r'' G_+(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') G_+(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') U(\mathbf{r}'') v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r}'') \end{aligned} \quad (۵۰-۸)$$

در طرف دوم (۵۰-۸)، دو جمله اول معلوم‌اند و فقط جمله سوم شامل تابع مجهول  $v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r})$  است. این روش را می‌توان تکرار کرد: در (۴۸-۸)،  $\mathbf{r}$  را به  $\mathbf{r}''$  و  $\mathbf{r}'$  را به  $\mathbf{r}'''$  تغییر می‌دهیم و از



آن  $v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r}'')$  را به دست می‌آوریم، و مجدداً آن را در معادله (۵۰-۸) قرار می‌دهیم. به این ترتیب خواهیم داشت

$$\begin{aligned} v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r}) = & e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} + \int d^3r' G_+(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}'} \\ & + \int d^3r' \int d^3r'' G_+(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') G_+(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') U(\mathbf{r}'') e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}'} \\ & + \int d^3r' \int d^3r'' \int d^3r''' G_+(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') G_+(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') U(\mathbf{r}''') \\ & \times G_+(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}''') U(\mathbf{r}''') v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r}''') \end{aligned} \quad (51-8)$$

که در آن سه جمله اول معلوم‌اند و تابع مجهول  $v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r})$  به جمله چهارم منتقل شده است. به این طریق، می‌توانیم قدم به قدم، آنچه را که بسط بورن تابع موج مانای پراکندگی نامیده می‌شود، ایجاد کنیم. توجه کنید که هر جمله از این بسط، توان پتانسیل را نسبت به جمله ماقبل آن یک درجه بالاتر می‌برد. بنابراین، اگر پتانسیل ضعیف باشد، هر جمله از جمله ماقبل خود کوچکتر خواهد بود. اگر این بسط را به حد کافی ادامه بدهیم، می‌توانیم از جمله آخر سمت راست صرف‌نظر کنیم و به این ترتیب  $v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r})$  را کلاً برحسب کمیت‌های معلوم به دست بیاوریم.

اگر این بسط  $v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r})$  را در رابطه (۴۴-۸) قرار بدهیم، بسط بورن دامنه پراکندگی حاصل می‌شود. بخصوص اگر بسط را به اولین مرتبه از  $U$  محدود کنیم، کافی است در طرف دوم (۴۴-۸) به جای  $v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r}')$ ، تابع  $e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}'}$  را قرار بدهیم. این، تقریب بورن است

$$\begin{aligned} f_k^{(B)}(\theta, \varphi) = & -\frac{1}{4\pi} \int d^3r' e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}'} \\ = & -\frac{1}{4\pi} \int d^3r' e^{-i(\mathbf{k}_d - \mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') \\ = & -\frac{1}{4\pi} \int d^3r' e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') \end{aligned} \quad (52-8)$$

که  $\mathbf{K}$  همان بردار موج پراکندگی است که در (۴۷-۸) تعریف شده است. بنابراین، سطح مقطع پراکندگی، در تقریب بورن، به طور بسیار ساده‌ای به تبدیل فوریه پتانسیل مربوط است، زیرا، با استفاده از (۲۹-۸) و (۱۱-۸)، معادله (۵۲-۸) بیان می‌دارد که

$$\sigma_k^{(B)}(\theta, \varphi) = \frac{\mu^2}{4\pi^2 \hbar^2} \left| \int d^3r e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \right|^2 \quad (53-8)$$

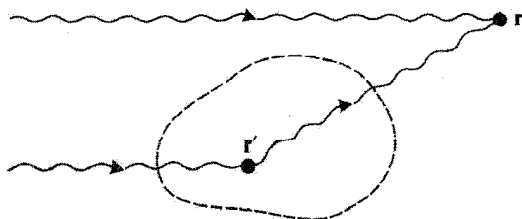
مطابق شکل (۸-۶)، جهت و قدرمطلق بردار موج پراکندگی  $\mathbf{K}$ ، هم به قدرمطلق  $k_i$  بردارهای  $k_x$  و  $k_y$  هم به جهت پراکندگی  $(\theta, \varphi)$  مورد نظر بستگی دارد. بنابراین، به ازاء یک مقدار معین  $\theta$  و  $\varphi$ ، سطح مقطع بورن با تغییر  $k_i$ ، یعنی، با تغییر انرژی جنبشی باریکه فرودی، تغییر می‌کند. همچنین، به ازاء یک انرژی معین،  $\sigma^{(B)}$  با تغییر  $\theta$  و  $\varphi$ ، تغییر می‌کند. به این ترتیب ملاحظه می‌کنیم که، در چارچوب ساده تقریب بورن، چطور می‌توان با مطالعه تغییرات سطح مقطع دیفرانسیلی برحسب جهت پراکندگی و انرژی فرودی، اطلاعاتی درباره پتانسیل  $V(\mathbf{r})$  به دست آورد.

### ب) تعبیر عبارتها

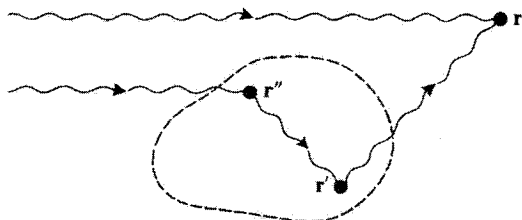
می‌توانیم برای فرمول (۸-۵) یک تعبیر فیزیکی ارائه کنیم، که شباهت ظاهری بین مکانیک کوانتومی و نور موجی را به وضوح نشان دهد.

حوزه تأثیر پتانسیل را به عنوان یک محیط پراکندگی، که چگالی آن متناسب با  $U(\mathbf{r})$  است، در نظر می‌گیریم. تابع  $G_+(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  [فرمول (۸-۳۶)] معرف دامنه یک موج در نقطه  $\mathbf{r}$  است، که از یک منبع نقطه‌ای واقع در  $\mathbf{r}'$  تابیده است. در نتیجه، دو جمله اول فرمول (۸-۵)، موج کلی را در نقطه  $\mathbf{r}$  توصیف می‌کنند، که از برهم نهی موج فرودی  $e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}$  و تعداد بی‌نهایتی امواج حاصل از منابع ثانوی، که توسط موج فرودی در محیط پراکندگی القاء می‌شوند، ایجاد می‌شود. دامنه هر یک از این منابع، در واقع با موج فرودی  $(e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}'})$  و چگالی محیط پراکندگی  $[U(\mathbf{r}')]$ ، که در نقطه مربوطه  $\mathbf{r}'$  محاسبه می‌شود، متناسب است. این تعبیر، که در شکل ۸-۷ به طور طرح‌وار نشان داده شده است، اصل هویگنس در مبحث نور موجی را تداعی می‌کند.

در حقیقت، فرمول (۸-۵) شامل جمله سوم نیز هست. با این همه، می‌توان به روش مشابهی جملات متوالی بسط بورن را تعبیر کرد. در واقع، چون محیط پراکندگی در سطح معینی گسترده است، یک منبع ثانوی معین نه تنها توسط موج فرودی، بلکه توسط امواج پراکنده حاصل از



شکل ۸-۷ نمایش طرح‌وار تقریب بورن: فقط موج فرودی و امواج پراکنده حاصل از تنها یک برهم‌کنش با پتانسیل را در نظر گرفته‌ایم.



شکل ۸-۸ نمایش طرح‌وار جمله مرتبه دوم  $U$  در بسط بورن: در اینجا امواجی را که دو بار توسط پتانسیل پراکنده شده‌اند در نظر گرفته‌ایم.

سایر منابع ثانوی نیز برانگیخته می‌شود. شکل ۸-۸، جمله سوم از بسط بورن را به‌طور طرح‌وار نشان می‌دهد. [رک فرمول (۸-۵۱)]. اگر چگالی محیط پراکننده اندک باشد  $[U(r)]$  بسیار کوچک، می‌توان از اثر منابع ثانوی بر یکدیگر صرف‌نظر کرد.

یادداشت:

تعبیر پیشگفته از جملات مرتبه‌های بالا در تقریب بورن به فرایندهای پراکندگی چندگانه که ممکن است در هدف ضخیم اتفاق بیفتند، ربطی ندارد: در اینجا فقط با پراکندگی یک ذره از باریکه فرودی توسط تک‌ذره‌ای از هدف سروکار داریم، در صورتی‌که پراکندگی چندگانه، برهم‌کنشهای متوالی همان ذره فرودی با چند ذره مختلف از هدف را بیان می‌کند. ■

## ۸-۳ پراکندگی توسط پتانسیل مرکزی.

### روش پاره‌موجها

#### ۸-۳-۱ اصل روش پاره‌موجها

در حالت خاصی که پتانسیل  $V(r)$  یک پتانسیل مرکزی است، تکانه زاویه‌ای مداری  $L$  ذره، یک ثابت حرکت است. بنابراین، حالت‌های مانایی با تکانه زاویه‌ای خوش‌تعریف وجود دارند: یعنی، ویژه‌حالت‌های مشترک بین  $H$ ،  $L^2$  و  $L_z$ . تابع‌موجهای وابسته به این حالتها را پاره‌موج می‌نامیم و آنها را به‌صورت  $\varphi_{k,l,m}(r)$  می‌نویسیم. ویژه‌مقدارهای مربوط به  $H$ ،  $L^2$  و  $L_z$  به‌ترتیب عبارت‌اند از:  $\hbar^2 k^2 / 2\mu$ ،  $\hbar^2 l(l+1)$  و  $m\hbar$ . بستگی زاویه‌ای آنها همیشه با هماهنگیهای کروی  $Y_l^m(\theta, \varphi)$  داده می‌شود؛ پتانسیل  $V(r)$  فقط در وابستگی شعاعی آنها تأثیر می‌گذارد.

انتظار داریم که برای مقادیر بزرگ  $r$ ، پاره‌موجها به ویژه‌تابعهای مشترک  $H$ ،  $L^2$  و  $L_z$  که  $H$  هامیلتونی آزاد است [فرمول (۸-۷)]، خیلی نزدیک باشند. به‌همین دلیل است که ابتدا

می‌خواهیم، در بخش ۸-۳-۲ حالت‌های مانای ذره آزاد، و بخصوص آنهایی را که دارای تکانه زاویه‌ای خوش‌تعریف هستند، بررسی کنیم. تابع موجهای متناظر  $\varphi_{k,l,m}^{(0)}(\mathbf{r})$  امواج کروی آزادند، البته، بستگی زاویه‌ای این توابع به همان شکل هماهنگهای کروی است و خواهیم دید که عبارت مجانبی تابع شعاعی آنها از برهم‌نهی یک موج ورودی  $e^{-ikr}/r$  و یک موج خروجی  $e^{ikr}/r$ ، با اختلاف فاز خوب تعیین‌شده، تشکیل می‌شود.

عبارت مجانبی پاره‌موج  $\varphi_{k,l,m}(\mathbf{r})$  در پتانسیل  $V(r)$  نیز عبارت است (بخش ۸-۳-۳) از برهم‌نهی یک موج ورودی و یک موج خروجی. ولی اختلاف فاز این دو موج با اختلاف فازی که موج کروی آزاد مربوطه را مشخص می‌کند، متفاوت است: پتانسیل  $V(r)$  یک انتقال فاز تکمیلی  $\delta_l$  را وارد می‌کند. این انتقال فاز، تنها اختلاف بین رفتارهای مجانبی  $\varphi_{k,l,m}$  و  $\varphi_{k,l,m}^{(0)}$  است. در نتیجه، برای  $k$ ی ثابت، دانستن "انتقال فاز" های  $\delta_l$  به‌ازاء تمام مقادیر  $l$ ، برای محاسبه سطح مقطع کافی است.

برای انجام این محاسبه، حالت مانای پراکندگی  $v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r})$  را به‌صورت ترکیب خطی‌ای از پاره‌موجهای  $\varphi_{k,l,m}(\mathbf{r})$ ، با انرژیهای یکسان ولی تکانه‌های زاویه‌ای مختلف، بیان می‌کنیم (۸-۳-۴). دلایل فیزیکی ساده می‌رساند که ضرایب این ترکیب خطی باید با ضرایب بسط موج تحت  $e^{ikz}$  برحسب امواج کروی آزاد، یکی باشند؛ در حقیقت، این مطلب با یک محاسبه مستقیم تأیید می‌شود.

بنابراین، با کاربرد پاره‌موجها، می‌توان دامنه پراکندگی و در نتیجه سطح مقطع را برحسب انتقال فازهای  $\delta_l$  بیان کرد. این روش، وقتی برد پتانسیل از طول‌موج وابسته به حرکت ذره خیلی بزرگتر نباشد، بسیار جالب است، زیرا، در این حالت فقط تعداد کمی از انتقال فازها به‌طور مؤثر دخیل‌اند (بخش ۸-۳-۳ب-۱).

### ۸-۳-۲ حالت‌های مانای ذره آزاد

در مکانیک کلاسیک، ذره آزادی به جرم  $\mu$  در امتداد یک مسیر خطی یکنواخت حرکت می‌کند. در مورد این ذره، تکانه  $\mathbf{p}$ ، انرژی  $E = \mathbf{p}^2/2\mu$  و تکانه زاویه‌ای  $\mathcal{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$  نسبت به مبدأ مختصات، ثابت‌های حرکت‌اند.

در مکانیک کوانتومی، مشاهده‌پذیرهای  $\mathbf{P}$  و  $\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$  جابه‌جا نمی‌شوند، بنابراین معرف کمیتهایی ناسازگارند: اندازه‌گیری همزمان تکانه و تکانه زاویه‌ای یک ذره ممکن نیست.

همیلتونی کوانتومی  $H_0$  به‌صورت زیر نوشته می‌شود

$$H_0 = \frac{1}{2\mu} \mathbf{P}^2 \quad (۵۴-۸)$$

$H_0$  به تنهایی "مجموعه کاملی از مشاهده پذیرهای جابه جاپذیر": ویژه مقدارهای  $H_0$  بینهایت بار واگن اند (بخش ۸-۲ الف). از طرف دیگر، چهار مشاهده پذیر

$$H_0, P_x, P_y, P_z \quad (55-8)$$

مجموعه کاملی از مشاهده پذیرهای جابه جاپذیر تشکیل می دهند. ویژه حالت‌های مشترک این مشاهده پذیرها، حالت‌های مانای با تکانه خوش تعریف اند. همچنین، ذره آزاد را می توان به صورت ذره ای واقع در پتانسیل مرکزی صفر، در نظر گرفت. در این صورت نتایج فصل ۷ نشان می دهد که سه مشاهده پذیر

$$H_0, L^2, L_z \quad (56-8)$$

مجموعه کاملی از مشاهده پذیرهای جابه جاپذیر تشکیل می دهند. ویژه حالت‌های متناظر با این مشاهده پذیرها، حالت‌های مانای با تکانه زاویه ای خوش تعریف اند (به بیان دقیقتر،  $L^2$  و  $L_z$  دارای مقادیر کاملاً معین اند، ولی  $L_x$  و  $L_y$  چنین نیستند).

پایه های فضای حالتی که توسط مجموعه کامل مشاهده پذیرهای جابه جاپذیر (۵۵-۸) و (۵۶-۸) تعریف می شوند، از یکدیگر متمایزند، زیرا  $\mathbf{P}$  و  $\mathbf{L}$  کمیتهایی ناسازگارند. می خواهیم این دو پایه را مطالعه کنیم و نشان بدهیم که چطور می توان از یکی به دیگری رفت.

الف) حالت‌های مانای با تکانه خوش تعریف

امواج تخت

از قبل (فصل ۲ بخش ۲-d E-۲) می دانیم که سه مشاهده پذیر  $P_x, P_y, P_z$  و مجموعه کاملی از مشاهده پذیرهای جابه جاپذیر را تشکیل می دهند (برای ذره بدون اسپین). ویژه حالت‌های مشترک این مشاهده پذیرها پایه ای برای نمایش  $\{ |p\rangle \}$  تشکیل می دهند

$$\mathbf{P}|p\rangle = p|p\rangle \quad (57-8)$$

چون  $H_0$  با این سه مشاهده پذیر جابه جا می شود، حالت‌های  $|p\rangle$  لزوماً ویژه حالت‌های  $H_0$  اند

$$H_0|p\rangle = \frac{p^2}{2\mu}|p\rangle \quad (58-8)$$

بنابراین طیف  $H_0$  پیوسته است و تمام اعداد مثبت و صفر را در برمی گیرد. هر کدام از این ویژه مقادارها بینهایت بار واگن اند: یعنی به هر مقدار مثبت معین  $E$ ، مقدار بینهایت کیت  $|\mathbf{p}\rangle$  مربوط می شود، زیرا بینهایت بردار معمولی  $\mathbf{p}$  وجود دارد که مدول آنها در رابطه زیر صدق می کند

$$|\mathbf{p}| = \sqrt{2\mu E} \quad (59-8)$$

تابع موجهای وابسته به کتهای  $|\mathbf{p}\rangle$ ، امواج تخت به صورت زیرند (فصل ۲ بخش ۹-۱-۹-E)

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle = \left( \frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{3/2} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \quad (60-8)$$

در اینجا بردار موج  $\mathbf{k}$  را برای مشخص کردن موج تخت معرفی می کنیم

$$\mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar} \quad (61-8)$$

و این تعریف را نیز در نظر می گیریم

$$|\mathbf{k}\rangle = (\hbar)^{3/2} |\mathbf{p}\rangle \quad (62-8)$$

کتهای  $|\mathbf{k}\rangle$ ، حالت های مانای با تکانه خوش تعریف اند

$$H_0 |\mathbf{k}\rangle = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2\mu} |\mathbf{k}\rangle \quad (الف 63-8)$$

$$\mathbf{P} |\mathbf{k}\rangle = \hbar \mathbf{k} |\mathbf{k}\rangle \quad (ب 63-8)$$

و به مفهوم وسیعتر، این کتها راست هنجارند

$$\langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (64-8)$$

و در فضای حالت تشکیل یک پایه می دهند

$$\int d^3 k |\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}| = 1 \quad (65-8)$$

تابع موجهای وابسته، امواج تختی هستند که به روش نسبتاً متفاوتی بهنجار شده‌اند

$$\langle r|k \rangle = \left( \frac{1}{2\pi} \right)^{3/2} e^{ik \cdot r} \quad (66-8)$$

ب) حالت‌های مانای با تکانه زاویه‌ای خوش تعریف

امواج کروی آزاد

برای به دست آوردن ویژه تابعهای مشترک  $H_0$ ،  $L^2$  و  $L_z$  کافی است که معادله شعاعی را برای یک پتانسیل مرکزی متحد با صفر حل کنیم. حل تفصیلی این مسئله در مکمل ۱ از فصل ۸ آمده است؛ ما در اینجا به ارائه نتایج بسنده می‌کنیم.

امواج کروی آزاد، تابع موجهای وابسته به حالت‌های مانای با تکانه زاویه‌ای خوش تعریف  $|\varphi_{k,l,m}^{(0)}\rangle$  ذره آزادند؛ این امواج به صورت زیر نوشته می‌شوند

$$\varphi_{k,l,m}^{(0)}(r) = \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} j_l(kr) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (67-8)$$

که  $Y_l^m$  یک تابع کروی بسل است که توسط رابطه زیر تعریف می‌شود

$$j_l(\rho) = (-1)^l \rho^l \left( \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \frac{\sin \rho}{\rho} \quad (68-8)$$

ویژه مقدارهای متناظر با  $H_0$ ،  $L^2$  و  $L_z$ ، به ترتیب، عبارت‌اند از  $\hbar^2 k^2 / 2\mu$ ،  $\hbar^2 l(l+1)$  و  $m\hbar$ . امواج کروی آزاد (67-8) به مفهوم وسیعتر راست‌هنجارند

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{k,l,m}^{(0)} | \varphi_{k',l',m'}^{(0)} \rangle &= \frac{2}{\pi} k k' \int_0^\infty j_l(kr) j_{l'}(k'r) r^2 dr \\ &\times \int d\Omega Y_l^{m*}(\theta, \varphi) Y_{l'}^{m'}(\theta, \varphi) \\ &= \delta(k - k') \delta_{ll'} \delta_{mm'} \end{aligned} \quad (69-8)$$

و در فضای حالت یک پایه تشکیل می‌دهند

$$\int_0^\infty dk \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^{+l} |\varphi_{k,l,m}^{(0)}\rangle \langle \varphi_{k,l,m}^{(0)}| = 1 \quad (70-8)$$

### ج) خواص فیزیکی امواج کروی آزاد

۱. وابستگی زاویه‌ای

وابستگی زاویه‌ای موج کروی آزاد  $\varphi_{k,l,m}^{(0)}(\mathbf{r})$  کلاً توسط هماهنگهای کروی  $Y_l^m(\theta, \varphi)$  بیان می‌شود. لذا این وابستگی توسط ویژه‌مقدارهای  $\mathbf{L}^2$  و  $L_z$  (یعنی با شاخصهای  $l$  و  $m$ ) تعیین می‌شود و نه توسط انرژی. مثلاً، یک "s-موج" کروی آزاد ( $l = 0$ ) همیشه همسانگرد است.

۲. رفتار در مجاورت مبدأ

یک زاویه فضایی بینهایت کوچک  $d\Omega_0$  حول جهت  $(\theta_0, \varphi_0)$  را در نظر می‌گیریم؛ وقتی حالت ذره  $|\varphi_{k,l,m}^{(0)}|$  باشد، احتمال یافتن ذره در این زاویه فضایی بین  $r$  و  $r + dr$  متناسب است با

$$r^2 j_l^2(kr) |Y_l^m(\theta_0, \varphi_0)|^2 dr d\Omega_0. \quad (71-8)$$

می‌توان نشان داد (بخش ۸-۲-۱) که وقتی  $\rho$  به سمت صفر میل می‌کند

$$j_l(\rho) \underset{\rho \rightarrow 0}{\sim} \frac{\rho^l}{(2l+1)!!} \quad (72-8)$$

این نتیجه (که از استدلال کلی بخش ۷-۱-۲-ج نیز انتظار آن می‌رود) حاکی از آن است که احتمال (۷۱-۸) در حوالی مبدأ مانند  $r^{2l+2}$  رفتار می‌کند؛ از این رو، هر چه  $l$  بزرگتر شود مقدار این احتمال افزایش می‌یابد.

نمودار تابع  $\rho^2 j_l^2(\rho)$  در شکل ۸-۹ نشان داده شده است. می‌بینید که این تابع، تا وقتی

$$\rho < \sqrt{l(l+1)} \quad (73-8)$$

است، کوچک باقی می‌ماند. بنابراین می‌توان فرض کرد که احتمال (۷۱-۸) عملاً برای

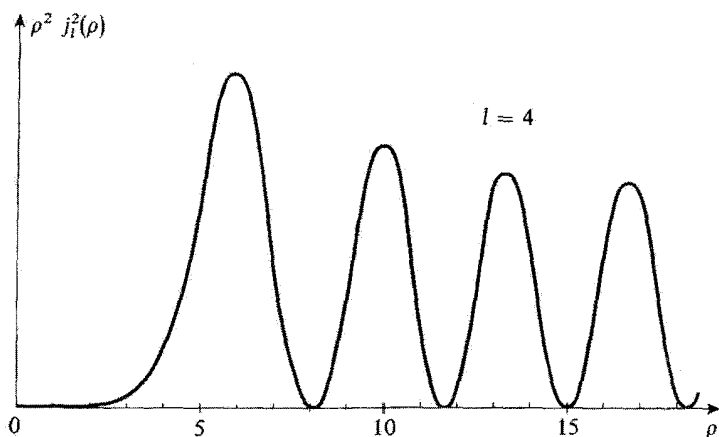
$$r < \frac{1}{k} \sqrt{l(l+1)} \quad (74-8)$$

صفر است.

این نتیجه از لحاظ فیزیکی بسیار مهم است، زیرا دلالت بر این دارد که ذره در حالت عملاً تحت تأثیر رویدادهای داخل کره‌ای به مرکز  $O$  و به شعاع

$$b_l(k) = \frac{1}{k} \sqrt{l(l+1)} \quad (75-8)$$





شکل ۹-۸ نمودار تابع  $\rho^2 j_l^2(\rho)$  که وابستگی شعاعی احتمال یافتن ذره در حالت  $|\varphi_{k,l,m}^{(0)}|$  را نشان می‌دهد. این تابع، در مبدأ مانند  $\rho^{2l+1}$  رفتار می‌کند؛ و تا وقتی  $\rho < \sqrt{l(l+1)}$  باشد، عملاً صفر است.

اتفاق می‌افتد، قرار نمی‌گیرد. در بخش ۸-۳-۳-ب-۲ به این نکته باز می‌گردیم.

یادداشت:

در مکانیک کلاسیک، ذره آزاد با تکانه  $\mathbf{p}$  و تکانه زاویه‌ای  $\mathcal{L}$  در امتداد خط راستی که فاصله‌اش  $b$ ، از نقطه  $O$  توسط رابطه، (شکل ۸-۱۰)

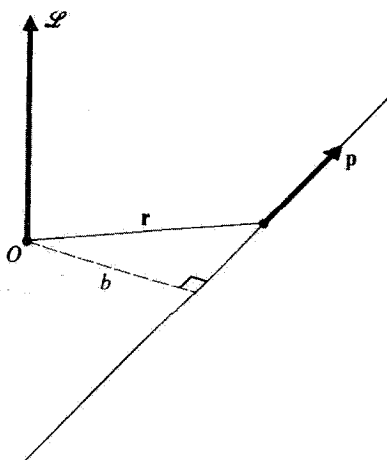
$$b = \frac{|\mathcal{L}|}{|\mathbf{p}|} \quad (۷۶-۸)$$

داده می‌شود، حرکت می‌کند.  $b$  را "پارامتر برخورد" ذره نسبت به نقطه  $O$  گویند. هر چه  $|\mathcal{L}|$  بزرگتر و تکانه (یعنی، انرژی) کوچکتر باشد،  $b$  بزرگتر است. اگر در (۷۶-۸)، به جای  $|\mathcal{L}|$ ، مقدار  $\hbar\sqrt{l(l+1)}$  و به جای  $|\mathbf{p}|$ ، مقدار  $\hbar k$  بگذاریم، دوباره عبارت (۷۵-۸) برای  $b_l(k)$  به دست می‌آید، که به این ترتیب می‌توانیم آن را به طور نیمه‌کلاسیک تعبیر کنیم. ■

۳. رفتار مجانبی

می‌توان نشان داد (مکمل ۱ بخش ۸-۲-۳-۱) که وقتی  $\rho$  به سمت بینهایت میل می‌کند، داریم

$$j_l(\rho) \underset{\rho \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - l\frac{\pi}{2}\right) \quad (۷۷-۸)$$



شکل ۸-۱۰ تعریف پارامتر برخورد کلاسیک  $b$ ، مربوط به ذره‌ای با تکانه  $p$  و تکانه زاویه‌ای  $\varphi$  نسبت به نقطه  $O$ .

در نتیجه، رفتار مجانبی موج کروی آزاد  $\varphi_{k,l,m}^{(0)}(r)$  عبارت است از

$$\varphi_{k,l,m}^{(0)}(r, \theta, \varphi) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} -\sqrt{\frac{2k^2 r}{\pi}} Y_l^m(\theta, \varphi) \frac{e^{-ikr} e^{il\varphi} - e^{ikr} e^{-il\varphi}}{2ikr} \quad (78-8)$$

بنابراین، در بینهایت،  $\varphi_{k,l,m}^{(0)}$  از برهم‌نهی یک موج ورودی  $e^{-ikr}/r$  و یک موج خردجی  $e^{ikr}/r$ ، که دامنه‌های آنها به اندازه  $l\pi$  اختلاف فاز دارند، نتیجه می‌شود.

### یادداشت:

فرض می‌کنیم بسته‌ای از امواج کروی آزاد، که همه آنها به مقادیر مشابه‌ی از  $l$  و  $m$  مربوط‌اند، ساخته‌ایم. با استدلالی شبیه به آنچه که در یادداشت (۱) از بخش ۸-۲-۱-ب دیدیم نتیجه زیر حاصل می‌شود: به‌ازاء مقادیر بزرگ منفی  $l$ ، فقط یک بسته‌موج ورودی وجود دارد، در صورتی‌که به‌ازاء مقادیر بزرگ و مثبت  $l$  فقط یک بسته‌موج خروجی وجود دارد. بنابراین، یک موج کروی آزاد را می‌توان به‌این صورت تصور کرد: ابتدا یک موج ورودی داریم که به‌سوی  $O$  نزدیک می‌شود؛ این موج با نزدیک شدن به این نقطه تغییر شکل می‌دهد، و وقتی به‌فاصله‌ای در حدود  $b_l(k)$  [فرمول (۷۵-۸)]، می‌رسد مراحل قبلی‌اش را تکرار می‌کند، و به یک موج خروجی با انتقال فاز  $l\pi$  تبدیل می‌شود.

د) بسط یک موج تخت برحسب امواج کروی آزاد

به قراری که گذشت، ما دو پایه متمایز داریم که توسط ویژه‌حالت‌های  $H_0$  تشکیل می‌شوند: یکی پایه  $\{|k\rangle\}$  وابسته به امواج تخت، و دیگری پایه  $\{|\varphi_{k,l,m}^{(0)}\rangle\}$  وابسته به امواج کروی آزاد. هر یک از کنه‌های یک پایه را می‌توان برحسب بردارهای پایهٔ دیگر بسط داد. یک ویژه، کت  $|\circ, \circ, k\rangle$ ، وابسته به یک موج تخت با بردار موج  $k$  در جهت  $Oz$ ، را در نظر می‌گیریم

$$\langle \mathbf{r} | \circ, \circ, k \rangle = \left( \frac{1}{2\pi} \right)^{3/2} e^{ikz} \quad (79-8)$$

$|\circ, \circ, k\rangle$  معرف حالتی با انرژی و تکانهٔ خوش‌تعریف است  $E = \hbar^2 k^2 / 2\mu$ ؛ و  $\mathbf{p}$  در جهت  $Oz$  و دارای قدرمطلق  $\hbar k$  است. حال

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} \quad (80-8)$$

مستقل از  $\varphi$  است؛ چون  $L_z$  در نمایش  $\{|\mathbf{r}\rangle\}$  وابسته به  $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$  است، کت  $|\circ, \circ, k\rangle$  نیز یک ویژه‌بردار  $L_z$ ، با ویژه‌مقدار صفر خواهد بود

$$L_z |\circ, \circ, k\rangle = 0 \quad (81-8)$$

با استفاده از رابطهٔ بستاری (۷۰-۸)، می‌توان نوشت

$$|\circ, \circ, k\rangle = \int_0^\infty dk' \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^{+l} |\varphi_{k',l,m}^{(0)}\rangle \langle \varphi_{k',l,m}^{(0)} | \circ, \circ, k \rangle \quad (82-8)$$

چون  $|\circ, \circ, k\rangle$  و  $|\varphi_{k,l,m}^{(0)}\rangle$  دو ویژه‌حالت  $H_0$  هستند، اگر ویژه‌مقدارهای آنها متفاوت باشند، متعامد خواهند بود؛ لذا، حاصلضرب اسکالر آنها متناسب با  $\delta(k' - k)$  است. همچنین، این دو ویژه‌حالت، هر دو، ویژه‌حالت‌های  $L_z$  هستند و حاصلضرب اسکالر آنها متناسب با  $\delta_{mm}$  است [رابطهٔ (۸۱-۸)]. بنابراین، فرمول (۸۲-۸) به شکل زیر در می‌آید

$$|\circ, \circ, k\rangle = \sum_{l=0}^\infty c_{k,l} |\varphi_{k,l,0}^{(0)}\rangle \quad (83-8)$$

ضرایب  $c_{k,l}$  را می‌توان مستقیماً محاسبه کرد (مکمل ۱ بخش ۸-۳)، در این صورت داریم

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} j_l(kr) Y_l^0(\theta) \quad (۸۴-۸)$$

بنابراین، یک حالت با تکانه خطی خوش‌تعریف، از برهم‌نهی حالت‌های متناظر تمام تکانه‌های زاویه‌ای ممکن، تشکیل می‌شود.

یادداشت:

همانگ‌کروی  $Y_l^0(\theta)$  با چند جمله‌ای لژاندر  $P_l(\cos \theta)$  متناسب است (مکمل ۱ از فصل ۶ بخش ۶-۲-۱ هـ-۱)

$$Y_l^0(\theta) = \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}} P_l(\cos \theta) \quad (۸۵-۸)$$

بنابراین، بسط (۸۴-۸) اغلب به صورت زیر نوشته می‌شود

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (۸۶-۸)$$

### ۳-۳-۸ پاره‌موجها در پتانسیل $V(r)$

اینکه می‌خواهیم ویژه‌تابع‌های مشترک  $H$  (هامیلتونی کل)،  $L^2$  و  $L_z$ ، یعنی، پاره‌موجهای  $\varphi_{k,l,m}(\mathbf{r})$  را مطالعه کنیم.

الف) معادله شعاعی. انتقال فاز

برای هر پتانسیل مرکزی  $V(r)$ ، پاره‌موجهای  $\varphi_{k,l,m}(\mathbf{r})$  به شکل زیرند

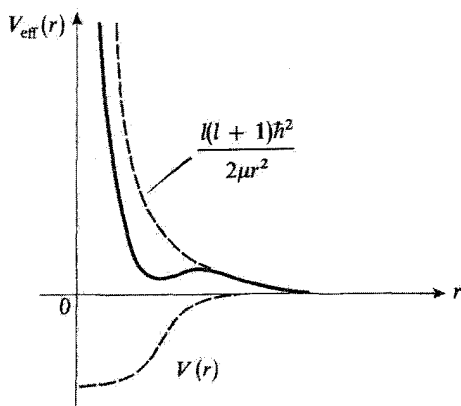
$$\varphi_{k,l,m}(\mathbf{r}) = R_{k,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) = \frac{1}{r} u_{k,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (۸۷-۸)$$

که در آن، جواب معادله شعاعی زیر است

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] u_{k,l}(r) = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} u_{k,l}(r) \quad (۸۸-۸)$$

که در مبدأ شرط زیر را برآورده می‌کند

$$u_{k,l}(0) = 0 \quad (۸۹-۸)$$



شکل ۱۱-۸ پتانسیل مؤثر  $V_{\text{eff}}(r)$  برابر است با مجموع پتانسیل  $V(r)$  و جمله مرکزگریز  $l(l+1)\hbar^2/2\mu r^2$

بنابراین، درست مثل این است که با یک مسئله یک بعدی مواجه ایم، که در آن ذره‌ای به جرم  $\mu$  تحت تأثیر پتانسیل زیر قرار دارد (شکل ۱۱-۸)

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \quad \text{برای } r > 0$$

$$V_{\text{eff}}(r) = \text{بینهایت} \quad \text{برای } r < 0 \quad (۹۰-۸)$$

به ازای مقادیر بزرگ  $r$ ، معادله (۸۸-۸) به صورت زیر در می‌آید

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + k^2 \right] \mu_{k,l}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\simeq} 0 \quad (۹۱-۸)$$

که جواب عمومی آن عبارت است از

$$u_{k,l}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} A e^{ikr} + B e^{-ikr} \quad (۹۲-۸)$$

چون  $u_{k,l}(r)$  باید شرط (۸۹-۸) را برقرار کند، ثابتهای  $A$  و  $B$  نمی‌توانند اختیاری باشند. در مسئله یک بعدی معادل [فرمول (۹۰-۸)]، معادله (۸۹-۸) مؤید این واقعیت است که برای مقادیر منفی  $r$ ، پتانسیل بینهایت است و عبارت (۹۲-۸) نمایانگر برهم نهشی از یک موج تخت "فروبی" و  $e^{-ikr}$  است که از سمت راست می‌آید (روی محوری که ذره خیالی مورد مطالعه، حرکت می‌کند)، و

یک موج تخت "بازتابیده"  $e^{ikr}$  که از چپ به راست منتشر می‌شود. چون هیچ موج "عبوری" ای نمی‌تواند وجود داشته باشد [زیرا  $V(r)$  در قسمت منفی محور، بینهایت است]، جریان "بازتابیده" باید با جریان "فرودی" برابر باشد. بنابراین، ملاحظه می‌کنیم که شرط (۸۹-۸) مستلزم این است که در عبارت مجانبی (۹۲-۸) داشته باشیم

$$|A| = |B| \quad (۹۳-۸)$$

در نتیجه

$$u_{k,l}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} |A| [e^{ikr} e^{-i\varphi_A} + e^{-ikr} e^{i\varphi_B}] \quad (۹۴-۸)$$

که می‌توان آن را به صورت زیر نوشت

$$u_{k,l}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} C \sin(kr - \beta_l) \quad (۹۵-۸)$$

فاز حقیقی  $\beta_l$  را می‌توانیم، با اعمال پیوستگی بین (۹۵-۸) و جواب (۸۸-۸) که در مبدأ صفر می‌شود، به طور کامل تعیین کنیم. در حالتی که پتانسیل  $V(r)$  متحد با صفر است، در بخش ۸-۳-۲-ج دیدیم که  $\beta_l$  برابر با  $l\pi/2$  است. برای سهولت این مقدار را به عنوان نقطه مرجع در نظر می‌گیریم، یعنی می‌نویسیم

$$u_{k,l}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} C \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l\right) \quad (۹۶-۸)$$

کمیت  $\delta_l$  را که به این طریق تعریف می‌شود انتقال فاز پاره‌موج  $\varphi_{k,l,m}(\mathbf{r})$  می‌نامیم؛ بدیهی است که این کمیت به  $k$ ، یعنی به انرژی، بستگی دارد.

ب) مفهوم فیزیکی انتقال فاز

۱. مقایسه پاره‌موجها و امواج کروی آزاد

با در نظر گرفتن (۸۷-۸) و (۹۶-۸)، رفتار مجانبی  $\varphi_{k,l,m}(\mathbf{r})$  را می‌توانیم به صورت زیر بنویسیم

$$\varphi_{k,l,m}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} C \frac{\sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)}{r} Y_l^m(\theta, \varphi) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} -CY_l^m(\theta, \varphi) \frac{e^{-ikr} e^{i(l\pi/2 - \delta_l)} - e^{ikr} e^{-i(l\pi/2 - \delta_l)}}{2ir} \quad (۹۷-۸)$$

ملاحظه می‌کنیم که پاره‌موج  $\varphi_{k,l,m}(\mathbf{r})$ ، مانند یک موج کروی آزاد [فرمول (۸-۷۸)]، از برهم‌نهی یک موج ورودی و یک موج خروجی نتیجه می‌شود.

برای مقایسه دقیق پاره‌موجها و امواج کروی آزاد، می‌توانیم موج ورودی (۸-۹۷) را طوری تغییر بدهیم که همانند (۸-۷۸) شود. برای این منظور، پاره‌موج جدید  $\bar{\varphi}_{k,l,m}(\mathbf{r})$  را که از ضرب  $\varphi_{k,l,m}(\mathbf{r})$  در  $e^{i\delta_l}$  به دست می‌آید (این ضریب فاز همه‌جایی هیچ اهمیت فیزیکی ندارد)، معرفی و ثابت  $C$  را طوری انتخاب می‌کنیم که

$$\bar{\varphi}_{k,l,m}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} -Y_l^m(\theta, \varphi) \frac{e^{-ikr} e^{i\pi/\nu} - e^{ikr} e^{-i\pi/\nu} e^{i\delta_l}}{2ikr} \quad (98-8)$$

به این ترتیب می‌توانیم این عبارت را به‌گونه زیر تعبیر کنیم (یادداشت ۸-۳-۲-ج-۳): در آغاز کار، موج ورودی همان است که در مورد یک ذره آزاد وجود داشت (جدا از ثابت بهنجارش  $(\sqrt{2k^2/\pi})$ ). با نزدیک شدن به حوزه تأثیر پتانسیل، موج ورودی بیشتر و بیشتر توسط این پتانسیل پریشیده می‌شود. وقتی این موج، پس از بازگشت، به یک موج خروجی تبدیل شد، نسبت به موج خروجی آزادی که در صورت صفر بودن پتانسیل  $V(r)$  حاصل می‌شد، انتقال فازی برابر با  $2\delta_l$  کسب می‌کند. پس، در نهایت، تأثیر کامل پتانسیل روی ذره‌ای با تکانه زاویه‌ای  $l$ ، در ضریب  $e^{i2\delta_l}$  (که با  $l$  و  $k$  تغییر می‌کند) خلاصه می‌شود.

یادداشت:

در واقع، بحث قبلی تنها وقتی معتبر است که استدلال خود را بر پایه بسته‌موجی بنا کنیم که از برهم‌نهی پاره‌موجهای  $\varphi_{k,l,m}(\mathbf{r})$  با  $l$ ها و  $m$ های مساوی، ولی با  $k$ های اندک متفاوت، تشکیل شده باشد. به‌ازاء مقادیر بزرگ منفی  $t$ ، فقط یک بسته‌موج ورودی داریم؛ آنچه در بالا تجزیه و تحلیل کردیم، تحول بعدی این بسته‌موج در وقتی است که به‌سوی حوزه تأثیر پتانسیل پیش می‌رود.

همچنین، می‌توانستیم، دیدگاه یادداشت (۲) از بخش ۸-۲-۱-ب را بپذیریم؛ یعنی، می‌توانستیم تأثیر پتانسیل  $V(r)$  را که به‌آرامی "برقرار می‌شود"، روی یک موج کروی آزاد مانا مطالعه کنیم. در این صورت، همین نوع استدلال نشان می‌داد که پاره‌موج  $\varphi_{k,l,m}(\mathbf{r})$  را می‌توان از یک موج کروی آزاد  $\varphi_{k,l,m}^{(0)}(\mathbf{r})$  با برقرار کردن پتانسیل  $V(r)$  به‌طور بی‌دررو، به دست آورد.

۲. پتانسیلهای با برد متناهی

فرض کنید پتانسیل  $V(r)$  دارای برد متناهی  $r_0$  باشد، یعنی

$$V(r) = 0 \quad r > r_0. \quad (99-8)$$

قبلاً (بخش ۸-۳-۲-ج-۲) خاطر نشان کردیم که موج کروی آزاد  $\varphi_{k,l,m}^{(0)}$  عملاً به داخل کره‌ای به مرکز  $O$  و به شعاع  $b_l(k)$  نفوذ نمی‌کند [فرمول (۸-۷۵)]. حال اگر به تعبیر پیشگفته از فرمول (۸-۹۸) برگردیم، ملاحظه می‌کنیم که پتانسیلی که در (۸-۹۹) صدق کند در واقع بر امواجی که برای آنها

$$b_l(k) \gg r_0 \quad (۸-۱۰۰)$$

است، تأثیری نخواهد داشت زیرا موج ورودی مربوط قبل از رسیدن به حوزه تأثیر پتانسیل  $V(r)$ ، باز می‌گردد. بنابراین، به‌ازاء هر مقدار انرژی، یک مقدار بحرانی  $l_M$  برای تکانه زاویه‌ای وجود دارد که، مطابق (۸-۷۵)، به‌طور تقریبی از رابطه زیر به دست می‌آید

$$\sqrt{l_M(l_M + 1)} \simeq kr_0 \quad (۸-۱۰۱)$$

انتقال فازهای  $\delta_l$  فقط به‌ازاء  $l$ های کوچکتر از  $l_M$  و یا در حدود آن، قابل ملاحظه‌اند. هر چه برد پتانسیل کوتاه‌تر و انرژی فرودی کمتر باشد،  $l_M$  کوچکتر خواهد بود.<sup>۱</sup> بنابراین ممکن است چنین اتفاق بیفتد که انتقال فازهای غیرصفر، فقط آنهایی باشند که به چند پاره‌موج اول مربوط می‌شوند: موج  $s$  ( $l = 0$ ) با انرژی بسیار پایین، به همراه امواج  $s$  و  $p$  برای انرژی‌های اندکی بیشتر، و غیره.

### ۸-۳-۴ رابطه سطح مقطع با انتقال فاز

انتقال فاز، تغییراتی را که پتانسیل در رفتار مجانبی حالت‌های مانای با تکانه زاویه‌ای خوش‌تعریف ایجاد می‌کند، مشخص می‌سازد. بنابراین، با دانستن آن باید بتوان سطح مقطع را به دست آورد. برای نشان دادن این مطلب، کافی است حالت مانای پراکندگی  $v_{\text{diff}}^{(r)}$  را برحسب پاره‌موجها<sup>۲</sup> بنویسیم و دامنه پراکندگی را از این راه محاسبه کنیم.

### الف) ساختن حالت مانای پراکندگی از پاره‌موجها

برای ساختن حالت مانای پراکندگی از پاره‌موجها، باید برهم‌نهی خطی که رفتار مجانبی آنها به صورت (۸-۱۴) است، پیدا کنیم. چون حالت مانای پراکندگی ویژه‌حالتی از هامیلتونی  $H$  است،

۱. ترجمه متن انگلیسی این جمله این چنین است: ... موج کروی آزاد  $\varphi$  به زحمت به داخل ... نفوذ می‌کند. م.م.

۲.  $l_M$  در حدود  $kr_0$ ، یعنی، نسبت بین برد  $r_0$  پتانسیل و طول موج ذره فرودی است.

۳. اگر حالت‌های مقید ذره در پتانسیل  $V(r)$  وجود داشته باشد (حالت‌های مانای با انرژی منفی)، سیستم پاره‌موجها، تشکیل پایه‌ای در فضای حالت نمی‌دهند. برای تشکیل چنین پایه‌ای لازم است به پاره‌موجها، تابع موجها (ی) حالت‌های مقید را نیز بیفزاییم.



بسط  $v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r})$  فقط شامل پاره‌موجهای با انرژی یکسان  $\hbar^2 k^2 / 2\mu$  خواهد بود. همچنین توجه کنید که، در مورد پتانسیل مرکزی  $V(r)$ ، مسئله پراکندگی، نسبت به دوران حول محور  $Oz$ ، که راستای باریکه فرودی تعریف می‌شود، متقارن است. در نتیجه، تابع موج مانای پراکندگی  $v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r})$  مستقل از زاویه سمتی  $\varphi$  است، به طوری که بسط آن فقط پاره‌موجهایی را که برای آنها  $m$  صفر است، در برمی‌گیرد. بالاخره عبارتی به شکل زیر خواهیم داشت

$$v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} c_l \bar{\varphi}_{k,l,0}(\mathbf{r}) \quad (102-8)$$

بنابراین، مسئله عبارت است از یافتن ضرایب  $c_l$ .

### ۱. استدلال شهودی

وقتی  $V(r)$  متجد با صفر است، تابع  $v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r})$  به موج تخت  $e^{ikz}$  و پاره‌موجها، به امواج کروی آزاد  $\varphi_{k,l,m}^{(0)}(\mathbf{r})$  تبدیل می‌شوند. در این مورد، بسط (۱۰۲-۸) را از قبل می‌شناسیم: این بسط توسط فرمول (۸۴-۸) داده شده است.

برای مقادیر غیرصفر  $V(r)$ ، عبارت  $v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r})$  علاوه بر یک موج تخت، شامل یک موج پراکنده و اگر آن نیز می‌باشد. به علاوه، دیدیم که اختلاف در رفتار مجانبی  $\bar{\varphi}_{k,l,0}(\mathbf{r})$  و  $\varphi_{k,l,0}^{(0)}(\mathbf{r})$  تنها در وجود یک موج خروجی در  $\bar{\varphi}_{k,l,0}$  است، که دارای همان وابستگی شعاعی موج پراکنده می‌باشد. بنابراین، انتظار داریم که ضرایب  $c_l$  در بسط (۱۰۲-۸) همان ضرایب فرمول (۸۴-۸) باشند،<sup>۱</sup> یعنی

$$v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} \bar{\varphi}_{k,l,0}(\mathbf{r}) \quad (103-8)$$

یادداشت:

همچنین می‌توان (۱۰۳-۸) را برحسب تعبیر پیشنهاد شده در یادداشت (۲) از بخش ۱-۲-۸ ب و یادداشت بخش ۳-۳-۸ ب-۱ فهمید. اگر موج تختی، که بسط آن به صورت (۸۴-۸) است، داشته باشیم و پتانسیل  $V(r)$  را به طوری دررو برقرار کنیم، این موج به یک حالت مانای پراکندگی تبدیل می‌شود: در این صورت، طرف چپ (۸۴-۸) را باید با  $v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r})$  جایگزین کرد. به علاوه، هر موج کروی آزاد  $j_l(kr)Y_l^0(\theta)$  که در

۱. توجه کنید که بسط (۸۴-۸) عبارت  $j_l(kr)Y_l^0(\theta)$  یعنی موج کروی آزاد  $\varphi_{k,l,0}^{(0)}$  تقسیم بر ضریب بهنجارش  $\sqrt{2k^2/\pi}$  را وارد می‌کند. بدین علت است که  $\bar{\varphi}_{k,l,m}(\mathbf{r})$  [فرمول (۹۸-۸)] را از تقسیم عبارت (۷۸-۸) بر همین ضریب تعریف کردیم.

طرف راست (۸۴-۸) ظاهر می‌شود، با برقراری پتانسیل، به پاره‌موج  $\bar{\varphi}_{k,l,0}(\mathbf{r})$  تبدیل می‌گردد. با توجه به خطی بودن معادله شرودینگر، بالاخره به رابطه (۱۰۳-۸) می‌رسیم.

## ۲. اثبات مستقیم

حال، فرمول (۱۰۳-۸) را، که از برخورد فیزیکی با مسئله پیشنهاد شده بود، در نظر می‌گیریم و نشان می‌دهیم که به‌راستی همان بسط مطلوب را به‌دست می‌دهد.

قبل از هر چیز توجه کنید که، طرف راست (۱۰۳-۸)، برهم‌نهی از ویژه‌حالت‌های  $H$  است که انرژی یکسان  $(\hbar^2 k^2 / 2\mu)$  دارند؛ در نتیجه، این برهم‌نهی، یک حالت مانا باقی می‌ماند، بنابراین، آنچه باید انجام بدهیم این است که مطمئن شویم رفتار مجانبی حاصل جمع (۱۰۳-۸) به‌راستی از همان نوع (۱۴-۸) است. برای این منظور از (۹۸-۸) استفاده می‌کنیم

$$\sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} \bar{\varphi}_{k,l,0}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} - \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} Y_l^0(\theta) \times \frac{1}{2ikr} [e^{-ikr} e^{i\pi/2} - e^{ikr} e^{-i\pi/2} e^{2i\delta_l}] \quad (104-8)$$

برای به‌دست آوردن رفتار مجانبی بسط (۸۴-۸) می‌نویسیم

$$e^{2i\delta_l} = 1 + 2i e^{i\delta_l} \sin \delta_l \quad (105-8)$$

و جملات مستقل از  $\delta_l$  را دسته‌بندی می‌کنیم، لذا داریم

$$\sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} \bar{\varphi}_{k,l,0}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} - \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} Y_l^0(\theta) \times \left[ \frac{e^{-ikr} e^{i\pi/2} - e^{ikr} e^{-i\pi/2}}{2ikr} - \frac{e^{ikr}}{r} \frac{1}{k} e^{-i\pi/2} e^{i\delta_l} \sin \delta_l \right] \quad (106-8)$$

با در نظر گرفتن (۷۸-۸) و (۸۴-۸)، در اولین جمله طرف راست، موج تخت  $e^{ikz}$  را بسط مجانبی می‌دهیم، و نهایتاً عبارت زیر را به‌دست می‌آوریم

$$\sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} \bar{\varphi}_{k,l,0}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{ikz} + f_k(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (107-8)$$

که در آن<sup>۱</sup>

$$f_k(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} e^{i\delta_l} \sin \delta_l Y_l^0(\theta). \quad (108-8)$$

به این ترتیب نشان دادیم که بسط (۱۰۳-۸) صحیح است و در عین حال دامنه پراکندگی  $f_k(\theta)$  را برحسب انتقال فازهای  $\delta_l$  پیدا کردیم.

(ب) محاسبه سطح مقطع

سطح مقطع دیفرانسیلی پراکندگی از فرمول (۷۷-۸) به دست می آید

$$\sigma(\theta) = |f_k(\theta)|^2 = \frac{1}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} e^{i\delta_l} \sin \delta_l Y_l^0(\theta) \right|^2 \quad (109-8)$$

که با انتگرال گیری بر روی زوایا، فرمول سطح مقطع کل پراکندگی از آن نتیجه می شود

$$\begin{aligned} \sigma &= \int d\Omega \sigma(\theta) = \frac{1}{k^2} \sum_{l,l'} 4\pi \sqrt{(2l+1)(2l'+1)} e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \sin \delta_l \sin \delta_{l'} \\ &\times \int d\Omega Y_{l'}^0*(\theta) Y_l^0(\theta) \end{aligned} \quad (110-8)$$

از آنجا که هماهنگهای کروی راست هنجارند [فرمول (۲-۲۳)] از فصل ۶، نهایتاً داریم

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (111-8)$$

بنابراین جملات حاصل از تداخل امواج با تکانه های زاویه ای مختلف، از سطح مقطع کل حذف می شوند. برای هر پتانسیل  $V(r)$ ، سهم  $(4\pi/k^2)(2l+1) \sin^2 \delta_l$  وابسته به یک مقدار معین  $l$ ، مثبت است و به ازاء یک انرژی معین، حد بالایی آن  $(4\pi/k^2)(2l+1)$  است.

از دیدگاه نظری، فرمولهای (۱۰۹-۸) و (۱۱۱-۸) مستلزم دانستن تمام انتقال فازهای  $\delta_l$  است. یادآور می شویم (بخش ۳-۳-۸ الف) که اگر پتانسیل  $V(r)$  معلوم باشد، می توانیم این انتقال

۱. ضریب  $i^l$  توسط  $i^l = (-i)^l = (1/i)^l$  جبران می شود.

فازها را از معادله شاعی محاسبه کنیم؛ این معادله را باید برای هر مقدار  $l$  به طور جداگانه حل کرد (اغلب اوقات، باید به روشهای حل عددی متوسل شد). به عبارت دیگر، روش پاره‌موجها، از لحاظ عملی، تنها زمانی جالب توجه است که تعداد انتقال فازهای غیرصفر، به حد کافی کم باشد: (در بخش ۸-۳-۲) دیدیم که برای یک پتانسیل با برد متناهی  $V(r)$  انتقال فازهای  $\delta_l$ ، به ازای  $l_M > l$ ، قابل اغماض اند، مقدار بحرانی  $l_M$  توسط فرمول (۸-۱۰) تعریف می‌شود.

وقتی پتانسیل  $V(r)$  از ابتدا مجهول باشد، سعی می‌کنیم با معرفی تعداد کمی انتقال فاز غیرصفر، منحنیهایی به دست بیاوریم که با منحنیهای تجربی سطح مقطع دیفرانسیلی در یک انرژی معین، سازگار باشند. به علاوه، مشکل وابستگی سطح مقطع به  $\theta$ ، خود غالباً تعداد مینیموم انتقال فاز لازم را پیشنهاد می‌کند. به عنوان مثال، اگر مطالعه خود را به موج  $s$  محدود کنیم، فرمول (۸-۱۰) یک سطح مقطع دیفرانسیلی همسانگرد را به دست می‌دهد ( $Y_0^\circ$  یک مقدار ثابتی است). در نتیجه، اگر آزمایشها، در عمل مؤید تغییر  $\sigma(\theta)$  نسبت به  $\theta$  باشند، این بدان معناست که انتقال فازهایی به غیر از انتقال فازهای موج  $s$  نیز وجود دارند که غیرصفرند. وقتی به این ترتیب، از نتایج تجربی مربوط به انرژیهای مختلف، انتقال فازهایی را که به طور مؤثری در سطح مقطع مشارکت دارند تعیین کردیم، می‌توانیم به جستجوی مدل‌های نظری از پتانسیلهایی بپردازیم که این انتقال فازها و وابستگی آنها به انرژی را ایجاد می‌کنند. یادداشت:

وابستگی سطح مقطعه‌ها به انرژی  $E = \hbar^2 k^2 / 2\mu$  ذره فرودی، درست به همان جالبی وابستگی  $\sigma(\theta)$  به  $\theta$  است. بخصوص اینکه، در بعضی موارد، تغییرات سریعی از سطح مقطع کل  $\sigma$ ، در نزدیکی بعضی از مقادیر انرژی مشاهده می‌شود. مثلاً، اگر یکی از انتقال فازهای  $\delta_l$ ، به ازاء  $E = E_0$  مقدار  $\pi/2$  را بپذیرد، سهم مربوط به آن در  $\sigma$  به حد بالایی خود می‌رسد و ممکن است که سطح مقطع، یک قله تیز در  $E = E_0$  نشان دهد. این پدیده “تشدید پراکندگی” نامیده می‌شود. این پدیده را می‌توانیم با رفتار ضریب عبور چاه پتانسیل “مربعی” یک بعدی، که در فصل ۱ تشریح شد، مقایسه کنیم. ■

### مراجع و پیشنهادات برای مطالعه بیشتر

Dicke and Wittke (1.14), chap. 16; Messiah (1.17), chap. X; Schiff (1.18), chaps. 5 and 9.

مطالب پیشرفته‌تر:

Coulomb scattering: Messiah (1.17), chap. XI; Schiff (1.18), §21; Davydov (1.20), chap. XI, §100.

Formal collision and S-matrix theory: Merzbacher (1.16), chap. 19; Roman (2.3), part II, chap. 4; Messiah (1.17), chap. XIX; Schweber (2.16), part 3, chap. 11.

Description of collisions in terms of wave packets: Messiah (1.17), chap. X, §§4, 5, 6; Goldberger and Watson (2.4), chaps. 3 and 4.

Determination of the potential from the phase shifts (the inverse problem): Wu and Ohmura (2.1), §G.

Applications: Davydov (1.20), chap. XI; Sobel'man (11.12) chap. 11; Mott and Massey (2.5); Martin and Spearman (16.18).

Scattering by multi-particle systems in the Born approximation and space-time correlation functions: Van Hove (2.39).

## مکملهای فصل ۸

فصل ۸، در حد برنامه، اصولاً به عنوان مرجعی برای سایر مباحث فیزیک، نظیر فیزیک هسته‌ای، در نظر گرفته شده است. کاربردهای فیزیکی نظریه برخورد را می‌توان در این مباحث پیدا کرد.

۱. ذره آزاد: حالت‌های مانای با تکانه زاویه‌ای خوش‌تعریف

۱. بررسی اجمالی تابع موج‌ها(ی) مانا برای یک ذره آزاد با تکانه زاویه‌ای خوش‌تعریف. کاربرد عملگرهای  $L_+$  و  $L_-$ ، معرفی توابع کروی بسل را ممکن می‌سازد و بعضی از خواص آنها را که در بخش ۸-۳ مورد استفاده قرار گرفتند، نمایش می‌دهد.

۲. توصیف پدیده‌شناختی برخوردهای همراه با جذب

۲. تعمیم صورتبندی فصل ۸ را به برخوردهای همراه با جذب ممکن می‌سازد و "فضیه نوری" را پی‌ریزی می‌کند. دیدگاهی پدیده‌شناختی، که اصل آن مانسته مکمل  $k_{III}$  است، مورد استفاده قرار می‌گیرد. اگر فصل ۸ به خوبی جاافتاده باشد، این قسمت مشکل نخواهد بود.

۳. چند کاربرد ساده از نظریه پراکندگی

۳. نمایش نتایج فصل ۸ توسط چندین مثال ویژه بخش ۱ برای نخستین مطالعه توصیه می‌شود. زیرا نتایج فیزیکی مهمی را به نحو ساده‌ای نشان می‌دهد (فرمول راترفورد). بخش ۲ را می‌توان به عنوان یک تمرین حل شده در نظر گرفت. بخش ۳ مسائل بدون حل را ارائه می‌دهد.

# مکمل ۱

ذره آزاد: حالت‌های مانای با تکانه زاویه‌ای خوش‌تعریف

۱. معادله شعاعی

۲. امواج کروی آزاد

الف) روابط بازگشتی

ب) محاسبه امواج کروی آزاد

ج) خواص

۳. رابطه میان امواج کروی آزاد و امواج تخت

در بخش ۸-۳-۲ از فصل ۸، دو پایه متمایز از حالت‌های مانای یک ذره آزاد (بدون اسپین) را که هامیلتونی آن به صورت زیر است، معرفی کردیم

$$H_0 = \frac{P^2}{2\mu} \quad (1)$$

اولین پایه، از ویژه حالت‌های مشترک بین  $H_0$  و سه مؤلفه تکانه  $P$  تشکیل شده است؛ تابع موج‌های وابسته، امواج تخت‌اند. دومین پایه، از حالت‌های مانای با تکانه زاویه‌ای خوش‌تعریف، یعنی، از ویژه حالت‌های مشترک  $H_0$ ،  $L^2$  و  $L_z$  تشکیل می‌شود که خواص اصلی آنها را در بخش‌های ۸-۳-۲، ۸-۳-۳ و ۸-۳-۴ از فصل ۸ بیان کردیم. در اینجا، می‌خواهیم این پایه دوم را مفصلتر بررسی کنیم. به‌ویژه، قصد داریم برخی از نتایجی را که در فصل ۸ به‌کار بردیم، به‌دست بیاوریم.

## ۱. معادله شعاعی

هامیلتونی (۱) با هر سه مؤلفه تکانه زاویه‌ای مداری  $L$  ذره، جابه‌جا می‌شود

$$[H_0, L] = 0 \quad (2)$$

در نتیجه، می‌توانیم نظریه عمومی تدوین‌شده در بخش ۷-۱ از فصل ۷ را در مورد این مسئله خاص به‌کار ببریم. به این ترتیب، می‌دانیم که امواج کروی آزاد (ویژه تابع‌های  $H_0$ ،  $L^2$  و  $L_z$ ) الزاماً

به صورت زیرند

$$\varphi_{\kappa,l,m}^{(\circ)}(\mathbf{r}) = R_{\kappa,l}^{(\circ)}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (۳)$$

تابع شعاعی  $R_{\kappa,l}^{(\circ)}(r)$  یک جواب معادله زیر است

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] R_{\kappa,l}^{(\circ)}(r) = E_{\kappa,l} R_{\kappa,l}^{(\circ)}(r) \quad (۴)$$

است که  $E_{\kappa,l}$  ویژه مقدار  $H_0$  وابسته به  $\varphi_{\kappa,l,m}^{(\circ)}(\mathbf{r})$  است. اگر قرار دهیم

$$R_{\kappa,l}^{(\circ)}(r) = \frac{1}{r} u_{\kappa,l}^{(\circ)}(r) \quad (۵)$$

تابع  $u_{\kappa,l}^{(\circ)}$  توسط معادله

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\mu E_{\kappa,l}}{\hbar^2} \right] u_{\kappa,l}^{(\circ)}(r) = 0 \quad (۶)$$

داده می شود که شرط

$$u_{\kappa,l}^{(\circ)}(0) = 0 \quad (۷)$$

را باید به آن افزود.

قبل از هر چیز، می توان نشان داد که، معادلات (۶) و (۷)، یافتن طیف هامیلتونی  $H_0$  را، که اکنون آن را از بررسی امواج تخت [ فرمول (۵۸-۸) از فصل ۸ ] می شناسیم، میسر می سازد. برای این منظور، توجه کنید که مقدار مینیموم پتانسیل (که، در واقع متحد با صفر است) صفر است و در نتیجه نمی تواند حالت مانایی با انرژی منفی وجود داشته باشد (مکمل ۸). بنابراین، برای ثابت  $E_{\kappa,l}$ ، که در معادله (۶) ظاهر می شود، یک مقدار مثبت در نظر می گیریم و قرار می دهیم

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2\mu E_{\kappa,l}} \quad (۸)$$



وقتی  $r$  به بینهایت میل می‌کند، جمله مرکزگرایز  $l(l+1)/r^2$  در مقایسه با جمله ثابت معادله (۶) قابل اغماض می‌شود، و لذا می‌توان به‌طور تقریبی نوشت

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + k^2 \right] u_{k,l}^{(0)}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} 0 \quad (9)$$

در نتیجه، تمام جواب‌های معادله (۶) دارای رفتار مجانبی‌ای (ترکیب خطی  $e^{ikr}$  و  $e^{-ikr}$ ) خواهند بود که از نظر فیزیکی پذیرفتنی است. بنابراین، تنها محدودیت، از شرط (۷) ناشی می‌شود: می‌دانیم که (فصل ۷، بخش ۱-۳-۷) برای یک مقدار معین  $E_{k,l}$ ، یک، و فقط یک، تابع وجود دارد (با تقریب یک ضریب ثابت) که در شرایط (۶) و (۷) صدق می‌کند. بنابراین، برای هر مقدار  $E_{k,l}$ ، معادله شعاعی (۶) یک، و فقط یک، جواب قابل قبول دارد.

از این رو، طیف  $H_0$  در واقع تمام انرژی‌های مثبت را شامل می‌شود. به‌علاوه، ملاحظه می‌کنیم که مجموعه مقادیر ممکن  $E_{k,l}$  به  $l$  بستگی ندارد؛ بدین جهت شاخص  $l$  را برای انرژی‌ها حذف خواهیم کرد. در مورد شاخص  $k$  نیز، آن را با ثابتی که در رابطه (۸) تعریف شد، مشخص خواهیم کرد؛ به‌این ترتیب می‌توانیم بنویسیم

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} ; k \geq 0 \quad (10)$$

هر یک از این انرژی‌ها بینهایت بار واگن‌اند. در واقع، برای یک مقدار ثابت  $k$ ، به‌ازاء تمام مقادیر (صحیح مثبت و صفر)  $l$ ، یک جواب قابل قبول  $u_{k,l}^{(0)}(r)$  از معادله شعاعی وابسته به انرژی  $E_k$  وجود دارد. به‌علاوه، فرمول (۳)، تعداد  $(2l+1)$  تابع موج مستقل  $\varphi_{k,l,m}^{(0)}(\mathbf{r})$  به یک تابع شعاعی معین  $u_{k,l}^{(0)}(r)$  مربوط می‌سازد. بنابراین، بار دیگر در این مورد خاص نیز به نتیجه کلی نشان داده شده در بخش ۱-۳-۷ از فصل ۷ می‌رسیم:  $H_0$ ،  $L^2$  و  $L_\infty$  مجموعه کاملی از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاپذیر در فضای  $\mathcal{E}_r$  تشکیل می‌دهند، و تصریح سه شاخص  $k$ ،  $l$ ، و  $m$  اطلاعات کافی برای تعیین یک جواب منحصر به‌فرد در پایه مربوطه به‌دست می‌دهد.

## ۲. امواج کروی آزاد

توابع شعاعی  $u_{k,l}^{(0)}(r) = 1/r R_{k,l}^{(0)}(r)$  را می‌توان مستقیماً از حل معادله (۶) یا معادله (۴) به‌دست آورد. معادله اخیر به‌سادگی به یک معادله دیفرانسیل، موسوم به "معادله کروی بسل" که جواب‌های آن به‌خوبی شناخته شده‌اند تبدیل می‌شود (یادداشت بخش ۸-۲-ج-۲ در قسمت زیر)

به جای اینکه مستقیماً از این نتایج استفاده کنیم، می‌خواهیم ببینیم چگونه می‌توان ویژه‌تابعهای گوناگون و مشترک بین  $H_0$ ،  $L^2$  و  $L_z$  از ویژه‌تابعهای مربوط به ویژه‌مقدار صفر عملگر  $L^2$  به دست آورد.

الف) روابط بازگشتی

عملگر

$$P_+ = P_x + iP_y \quad (11)$$

را بر حسب مؤلفه‌های  $P_x$  و  $P_y$  می‌توانه  $P$  تعریف می‌کنیم. می‌دانیم که  $P$  یک مشاهده‌پذیر برداری است (مکمل ۲ از فصل ۶، بخش ۶-۵-ج)، که در روابط جابه‌جاپذیری<sup>۱</sup> زیر، بین مؤلفه‌های خود و مؤلفه‌های تکانه زاویه‌ای  $L$ ، و معادلاتی که از این معادلات با تبدیل دوره‌ای شاخصهای  $x$ ،  $y$ ، و  $z$  به دست می‌آیند، صدق می‌کند

$$[L_x, P_x] = 0$$

$$[L_x, P_y] = i\hbar P_z \quad (12)$$

$$[L_x, P_z] = -i\hbar P_y$$

با به کار بردن این روابط، یک محاسبه جبری ساده، جابه‌جاگرهای  $L_x$  و  $L^2$  با عملگر  $P_+$  را به دست می‌دهد

$$[L_z, P_+] = \hbar P_+ \quad (الف ۱۳)$$

$$[L^2, P_+] = 2\hbar(P_+L_z - P_zL_+) + 2\hbar^2P_+ \quad (ب ۱۳)$$

بنابراین، یک ویژه‌تابع  $\varphi_{k,l,m}^{(0)}(\mathbf{r})$  مشترک بین  $H_0$ ،  $L^2$  و  $L_z$  را در نظر بگیرید، ویژه‌مقدارهای مربوط عبارت‌اند از  $E_k$ ،  $l(l+1)\hbar^2$  و  $m\hbar$ . با اعمال عملگرهای  $L_+$  و  $L_-$  می‌توانیم تعداد  $2l$  ویژه‌تابع دیگر وابسته به همان انرژی  $E_k$  و همان مقدار  $l$  را به دست بیاوریم. چون  $H_0$  با  $L$  جابه‌جا می‌شود، به عنوان مثال داریم

$$H_0 L_+ \varphi_{k,l,m}^{(0)}(\mathbf{r}) = L_+ H_0 \varphi_{k,l,m}^{(0)}(\mathbf{r}) = E_k L_+ \varphi_{k,l,m}^{(0)}(\mathbf{r}) \quad (14)$$

۱. این روابط را می‌توان مستقیماً از تعریف  $L = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$  و قواعد جابه‌جاپذیری بنیادی به دست آورد.

و  $L_+ \varphi_{k,l,m}^{(0)}(\mathbf{r})$  (که اگر  $m$  با  $l$  متفاوت باشد، صفر نیست) یک ویژه‌تابع  $H$  با همان ویژه‌مقدار  $\varphi_{n,l,m}^{(0)}(\mathbf{r})$  است. بنابراین

$$L_{\pm} \varphi_{k,l,m}^{(0)}(\mathbf{r}) \propto \varphi_{k,l,m \pm 1}^{(0)}(\mathbf{r}) \quad (15)$$

حال اگر  $P_+$  روی  $\varphi_{k,l,m}^{(0)}(\mathbf{r})$  عمل کند. قبل از هر چیز، چون  $H$  با  $P$  جابه‌جا می‌شود، می‌توان استدلال اخیر را برای  $P_+ \varphi_{k,l,m}^{(0)}$  تکرار کرد. به علاوه، از رابطه (۱۳ الف) داریم

$$\begin{aligned} L_z P_+ \varphi_{k,l,m}^{(0)}(\mathbf{r}) &= P_+ L_z \varphi_{k,l,m}^{(0)} + \hbar P_+ \varphi_{k,l,m}^{(0)} \\ &= (m + 1) \hbar P_+ \varphi_{k,l,m}^{(0)}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (16)$$

بنابراین،  $P_+ \varphi_{k,l,m}^{(0)}$  یک ویژه‌تابع  $L_z$  با ویژه‌مقدار  $(m + 1)\hbar$  است. اگر معادله (۱۳ ب) را به همین طریق به‌کار ببریم، ملاحظه می‌کنیم که وجود عبارت  $P_z L_+$  دال بر این است که  $P_+ \varphi_{k,l,m}^{(0)}$  در حالت کلی، ویژه‌تابع  $L^2$  نیست؛ با وجود این، اگر  $m = l$  باشد، سهم این جمله صفر است

$$\begin{aligned} L^2 P_+ \varphi_{k,l,l}^{(0)} &= P_+ L^2 \varphi_{k,l,l}^{(0)} + 2\hbar P_+ L_z \varphi_{k,l,l}^{(0)} + 2\hbar^2 P_+ \varphi_{k,l,l}^{(0)} \\ &= [l(l + 1) + 2l + 2] \hbar^2 P_+ \varphi_{k,l,l}^{(0)} \\ &= (l + 1)(l + 2) \hbar^2 P_+ \varphi_{k,l,l}^{(0)} \end{aligned} \quad (17)$$

در نتیجه،  $P_+ \varphi_{k,l,l}^{(0)}$  یک ویژه‌تابع مشترک  $H$ ،  $L^2$  و  $L_z$  است که ویژه‌مقدارهای متناظر با آن، به ترتیب، عبارت‌اند از  $E_k$ ،  $(l + 1)\hbar^2$  و  $(l + 1)\hbar$ . چون این سه مشاهده‌پذیر تشکیل یک مجموعه کاملی از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاپذیر می‌دهند، فقط یک ویژه‌تابع (با تقریب یک ضریب ثابت  $1$ ) وابسته به این مجموعه ویژه‌مقدارها، وجود دارد

$$P_+ \varphi_{k,l,l}^{(0)}(\mathbf{r}) \propto \varphi_{k,l+1,l+1}^{(0)}(\mathbf{r}) \quad (18)$$

۱. بعداً (در بخش ۲-ب) ضرابی را که راست‌هنجاری orthonormalization پایه  $\{\varphi_{k,l,m}^{(0)}(\mathbf{r})\}$  را تضمین کند، (به مفهوم وسیعتر، زیرا  $k$  یک شاخص پیوسته است)، مشخص خواهیم کرد.

اکنون می‌خواهیم از روابط بازگشتی (۱۵) و (۱۸) برای ساختن پایه  $\{\varphi_{k,l,m}^{(0)}(\mathbf{r})\}$  از توابع  $\varphi_{k,0,0}^{(0)}(\mathbf{r})$  مربوط به ویژه‌مقدارهای صفر  $L_z^2$  و  $L^2$  استفاده کنیم.<sup>۱</sup>

(ب) محاسبهٔ امواج گروی آزاد

۱. حل معادلهٔ شعاعی برای  $l = 0$

برای تعیین توابع  $\varphi_{k,0,0}^{(0)}(\mathbf{r})$ ، به معادلهٔ شعاعی (۶)، که در آن  $l = 0$  قرار داده‌ایم، برمی‌گردیم؛ با توجه به تعریف (۱۰)، این معادله را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + k^2 \right] u_{k,0}^{(0)}(r) = 0 \quad (19)$$

جوابی که در مبدأ صفر می‌شود [شرط (۷)] به صورت زیر است

$$u_{k,0}^{(0)}(r) = a_k \sin kr \quad (20)$$

ثابت  $a_k$  را طوری انتخاب می‌کنیم که توابع  $\varphi_{k,0,0}^{(0)}(\mathbf{r})$ ، راست‌هنجار باشند، یعنی

$$\int d^3r \varphi_{k',0,0}^{(0)*}(\mathbf{r}) \varphi_{k,0,0}^{(0)}(\mathbf{r}) = \delta(k - k') \quad (21)$$

به‌سادگی می‌توان نشان داد که (ادامهٔ مطلب را ببینید) اگر

$$a_k = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \quad (22)$$

باشد، خواهیم داشت

$$\varphi_{k,0,0}^{(0)}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{\sin kr}{kr} \quad (23)$$

۱. نباید تصور کرد که عملگر  $P_- = P_x - iP_y$  این امکان را می‌دهد که از یک مقدار دلخواه  $l$  "به‌طور پله‌ای" به‌صفر برسیم. به‌سادگی می‌توان با استدلالی مشابه قبل، نشان داد که

$$P_- \varphi_{k,l,-l}^{(0)}(\mathbf{r}) \propto \varphi_{k,l+1,-(l+1)}^{(0)}(\mathbf{r})$$

( $Y_0^0$  برابر با  $1/\sqrt{4\pi}$  است)، و شرط (۲۱) برقرار خواهد بود.

حال ثابت می‌کنیم که توابع (۲۳) در رابطه راست‌هنجاری (۲۱) صدق می‌کنند. برای انجام این کار، کافی است انتگرال زیر را محاسبه کنیم

$$\begin{aligned} \int d^3r \varphi_{k,0,0}^{(\circ)}(\mathbf{r}) \varphi_{k',0,0}^{(\circ)}(\mathbf{r}) &= \frac{2}{\pi} k k' \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty r^2 dr \frac{\sin kr}{kr} \frac{\sin k'r}{k'r} \int d\Omega \\ &= \frac{2}{\pi} \int_0^\infty dr \sin kr \sin k'r \end{aligned} \quad (24)$$

با جایگزین کردن توابع نامی مختلط به‌جای سینوسها و بسط بازه انتگرال‌گیری به گستره  $-\infty$  تا  $+\infty$ ، داریم

$$\frac{2}{\pi} \int_0^\infty dr \sin kr \sin k'r = \frac{2}{\pi} \left( -\frac{1}{4} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} dr [e^{i(k+k')r} - e^{i(k-k')r}] \quad (25)$$

چون  $k$  و  $k'$  هر دو مثبت‌اند،  $k + k'$  همواره مخالف صفر، و سهم جمله اول داخل کرشه همیشه صفر است. بنا به فرمول (۲۴) پیوست ۱۱، نهایتاً داریم

$$\begin{aligned} \int d^3r \varphi_{k,0,0}^{(\circ)*}(\mathbf{r}) \varphi_{k',0,0}^{(\circ)}(\mathbf{r}) &= \frac{2}{\pi} \left( -\frac{1}{4} \right) (-2\pi) \delta(k - k') \\ &= \delta(k - k') \end{aligned} \quad (26)$$

۲. ساختن سایر امواج به روش بازگشتی

اکنون عملگر  $P_+$  را که قبلاً در (۱۱) تعریف کردیم بر توابع  $\varphi_{k,0,0}^{(\circ)}(\mathbf{r})$  که در بالا به‌دست آوردیم، اعمال می‌کنیم. بنا به رابطه (۱۸)

$$\begin{aligned} \varphi_{k,1,1}^{(\circ)}(\mathbf{r}) &\propto P_+ \varphi_{k,0,0}^{(\circ)}(\mathbf{r}) \\ &\propto P_+ \frac{\sin kr}{kr} \end{aligned} \quad (27)$$

در نمایش  $\{|r\rangle\}$ ، که تاکنون از آن استفاده کرده‌ایم،  $P_+$  یک عملگر دیفرانسیلی است

$$P_+ = \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad (28)$$

در فرمول (۲۷)، این عملگر بر روی تابعی که تنها تابع  $r$  است عمل می‌کند. حال

$$\begin{aligned} P_+ f(r) &= \frac{\hbar}{i} \left( \frac{x}{r} + i \frac{y}{r} \right) \frac{d}{dr} f(r) \\ &= \frac{\hbar}{i} \sin \theta e^{i\varphi} \frac{d}{dr} f(r) \end{aligned} \quad (29)$$

پس داریم

$$\varphi_{k,\nu,\nu}^{(0)}(r) \propto \sin \theta e^{i\varphi} \left[ \frac{\cos kr}{kr} - \frac{\sin kr}{(kr)^2} \right] \quad (30)$$

وابستگی زاویه‌ای  $Y_1^1(\theta, \varphi)$  را می‌شناسیم [مکمل ۱ از فصل ۶، فرمول (۳۲)]، با اعمال  $L_-$  می‌توانیم  $\varphi_{k,1,0}^{(0)}(r)$  و  $\varphi_{k,1,-1}^{(0)}(r)$  را محاسبه کنیم.

هر چند که  $\varphi_{k,\nu,\nu}^{(0)}(r)$  به  $\theta$  و  $\varphi$  بستگی دارد، اما اعمال  $P_+$  بر این تابع بسیار ساده است. روابط جابه‌جایی بنیادی بلافاصله نشان می‌دهند که

$$[P_+, X + iY] = 0 \quad (31)$$

در نتیجه،  $\varphi_{k,\nu,\nu}^{(0)}(r)$  به صورت زیر داده می‌شود

$$\begin{aligned} \varphi_{k,\nu,\nu}^{(0)}(r) &\propto P_+^{\nu} \frac{\sin kr}{kr} \\ &\propto P_+ \frac{x + iy}{r} \frac{d}{dr} \frac{\sin kr}{kr} \\ &\propto (x + iy) P_+ \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \frac{\sin kr}{kr} \\ &\propto (x + iy)^{\nu} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left[ \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \frac{\sin kr}{kr} \right] \end{aligned} \quad (32)$$

به‌طور کلی

$$\varphi_{k,l,l}^{(0)}(r) \propto (x + iy)^l \left( \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^l \frac{\sin kr}{kr} \quad (33)$$

وابستگی زاویه‌ای  $\varphi_{k,l,l}^{(\circ)}$  در عامل

$$(x + iy)^l = r^l (\sin \theta)^l e^{il\varphi} \quad (۳۴)$$

نهفته است که در واقع متناسب با  $Y_l^l(\theta, \varphi)$  است.

اکنون، تابع زیر را تعریف می‌کنیم

$$j_l(\rho) = (-1)^l \rho^l \left( \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \frac{\sin \rho}{\rho} \quad (۳۵)$$

$j_l$ ، که به این صورت تعریف می‌شود، تابع کروی بسل از مرتبه  $l$  است. محاسبه قبل نشان می‌دهد که  $\varphi_{k,l,l}^{(\circ)}(\mathbf{r})$  با حاصلضرب  $Y_l^l(\theta, \varphi)$  و  $j_l(kr)$  متناسب است. با نوشتن (مسئله بهنجارش زیر را نگاه کنید)

$$R_{k,l}^{(\circ)}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2k^r}{\pi}} j_l(kr) \quad (۳۶)$$

امواج کروی آزاد به این صورت در می‌آیند

$$\varphi_{k,l,m}^{(\circ)}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2k^r}{\pi}} j_l(kr) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (۳۷)$$

که در رابطه راست‌هنجاری

$$\int d^3r \varphi_{k,l,m}^{(\circ)}(\mathbf{r}) \varphi_{k',l',m'}^{(\circ)*}(\mathbf{r}) = \delta(k - k') \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (۳۸)$$

و رابطه بستاری زیر صدق می‌کنند

$$\int_0^\infty dk \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^{+l} \varphi_{k,l,m}^{(\circ)}(\mathbf{r}) \varphi_{k,l,m}^{(\circ)*}(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (۳۹)$$

حال بهنجارش توابع (۳۷) را امتحان می‌کنیم. برای این منظور، ابتدا ضرایب تناسب روابط بازگستی (۱۵)

و (۱۸) را مشخص می‌کنیم. برای رابطه اول، این ضریب را، از روی خواص هماهنگ‌های کروی (به مکمل ۱

از فصل ۶، از قبل می‌دانیم

$$L_{\pm} \varphi_{k,l,m}^{(\circ)}(\mathbf{r}) = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} \varphi_{k,l,m \pm 1}^{(\circ)}(\mathbf{r}) \quad (40)$$

اما در مورد رابطه (۱۸)، به سادگی می‌توان نشان داد که، با استفاده از عبارت صریح  $Y_l^m(\theta, \varphi)$  [فرمولهای (۴) و (۱۴)] از مکمل ۱ فصل ۶، معادلات (۳۱) و (۲۹) و تعریف (۳۵)، و در نظر گرفتن (۳۷)، این رابطه را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$P_+ \varphi_{k,l,l}^{(\circ)}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar k}{i} \sqrt{\frac{2l+2}{2l+3}} \varphi_{k,l+1,l+1}^{(\circ)}(\mathbf{r}) \quad (41)$$

در رابطه راست‌هنجاری (۲۸)، ضرایب  $\delta_{ll'}$ ،  $\delta_{mm'}$  در طرف راست، از انتگرال‌گیری زاویه‌ای و راست‌هنجاری هماهنگهای کروی حاصل می‌شوند. برای اینکه رابطه (۳۸) برقرار باشد، کافی است نشان دهیم که انتگرال

$$I_l(k, k') = \int d^3r \varphi_{k,l,l}^{(\circ)*}(\mathbf{r}) \varphi_{k',l,l}^{(\circ)}(\mathbf{r}) \quad (42)$$

برابر است با  $\delta(k - k')$ . قبلاً از رابطه (۲۶) می‌دانیم که  $I_0(k, k')$  برابر با این مقدار است. در نتیجه نشان می‌دهیم که اگر

$$I_l(k, k') = \delta(k - k') \quad (43)$$

باشد، برای  $I_{l+1}(k, k')$  نیز همین‌طور است. با استفاده از رابطه (۴۱) می‌توان  $I_{l+1}(k, k')$  را به صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned} I_{l+1}(k, k') &= \frac{1}{\hbar^2 k k'} \frac{2l+3}{2l+2} \int d^3r [P_+ \varphi_{k,l,l}^{(\circ)}(\mathbf{r})]^* [P_+ \varphi_{k',l,l}^{(\circ)}(\mathbf{r})] \\ &= \frac{1}{\hbar^2 k k'} \frac{2l+3}{2l+2} \int d^3r \varphi_{k,l,l}^{(\circ)*}(\mathbf{r}) P_- P_+ \varphi_{k',l,l}^{(\circ)}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (44)$$

که در آن  $P_- = P_x - iP_y$  عملگر الحاقی  $P_+$  است. حال

$$P_- P_+ = P_x^2 + P_y^2 = \mathbf{P}^2 - P_z^2 \quad (45)$$

$\varphi_{k',l,l}^{(\circ)}$  یک ویژه‌تابع  $\mathbf{P}^2$  است. چون، علاوه بر آن،  $P_z$  هرمیتی است، نتیجه می‌شود که

$$\begin{aligned} I_{l+1}(k, k') &= \frac{1}{\hbar^2 k k'} \frac{2l+3}{2l+2} \left\{ \hbar^2 k'^2 I_l(k, k') \right. \\ &\quad \left. - \int d^3r [P_z \varphi_{k,l,l}^{(\circ)}(\mathbf{r})]^* [P_z \varphi_{k',l,l}^{(\circ)}(\mathbf{r})] \right\} \end{aligned} \quad (46)$$



ذره آزاد: حالت‌های مانای با تکانه زاویه‌ای خوش تعریف ۶۱

اکنون باید  $P_z \varphi_{k,l,l}^{(0)}(\mathbf{r})$  را محاسبه کنیم. با استفاده از این واقعیت که  $Y_l^l(\theta, \varphi)$  با  $(x+iy)^l/r^l$  متناسب است، بنا به فرمول (۳۵) از مکمل ۱ فصل ۶، به سادگی خواهیم داشت

$$\begin{aligned} P_z \varphi_{k,l,l}^{(0)}(\mathbf{r}) &= -\frac{\hbar k}{i} \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} \cos \theta Y_l^l(\theta, \varphi) j_{l+1}(kr) \\ &= -\frac{\hbar k}{i} \frac{1}{\sqrt{2l+3}} \varphi_{k,l+1,l}^{(0)}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (47)$$

با قرار دادن این نتیجه در (۴۶)، بالاخره می‌رسیم به

$$I_{l+1}(k, k') = \frac{2l+3}{2l+2} \frac{k'}{k} I_l(k, k') - \frac{1}{2l+2} I_{l+1}(k, k') \quad (48)$$

بنابراین، فرضیه (۴۳) ثابت می‌کند که

$$I_{l+1}(k, k') = \delta(k - k') \quad (49)$$

که روش بازگشتی را نتیجه می‌دهد.

### ج) خواص

۱. رفتار در مبدأ

وقتی  $\rho$  به سمت صفر میل می‌کند، تابع  $j_l(\rho)$  رفتاری مانند

$$j_l(\rho) \underset{\rho \rightarrow 0}{\sim} \frac{\rho^l}{(2l+1)!!} \quad (50)$$

خواهد داشت (ادامه مطلب را ببینید) در نتیجه،  $\varphi_{k,l,m}^{(0)}(\mathbf{r})$  در مجاورت مبدأ، متناسب با  $r^l$  است

$$\varphi_{k,l,m}^{(0)}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow 0}{\sim} \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} Y_l^m(\theta, \varphi) \frac{(kr)^l}{(2l+1)!!} \quad (51)$$

برای اثبات فرمول (۵۰)، با شروع از تعریف (۳۵)، کافی است  $\sin \rho/\rho$  را به صورت یک رشته نمایشی

از  $\rho$  بسط بدهیم

$$\frac{\sin \rho}{\rho} = \sum_{p=0}^{\infty} (-1)^p \frac{\rho^{2p}}{(2p+1)!} \quad (52)$$

و سپس عملگر  $(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho})^l$  را اعمال کنیم که منجر می شود به

$$\begin{aligned} j_l(\rho) &= (-1)^l \rho^l \left( \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^{l-1} \sum_{p=0}^{\infty} (-1)^p \frac{2p}{(2p+1)!} \rho^{2p-1-1} \\ &= (-1)^l \rho^l \sum_{p=0}^{\infty} (-1)^p \frac{2p(2p-2)(2p-4) \cdots [2p-2(l-1)]}{(2p+1)!} \rho^{2p-2l} \end{aligned} \quad (53)$$

$l$  جمله اول این حاصل جمع (از  $p=0$  تا  $l-1$ ) صفرند، و جمله  $(l+1)$ ام به صورت زیر نوشته می شود

$$j_l(\rho) \underset{\rho \rightarrow 0}{\sim} (-1)^l \rho^l (-1)^l \frac{2l(2l-2)(2l-4) \cdots 2}{(2l+1)!} \quad (54)$$

که فرمول (50) را اثبات می کند.

۲. رفتار مجانبی

توابع کروی بسل، وقتی آرگومانشان به سمت بینهایت میل می کند، به شکل زیر به توابع مثلثاتی مربوط می شوند

$$j_l(\rho) \underset{\rho \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{\rho} \sin \left( \rho - l \frac{\pi}{2} \right) \quad (55)$$

بنابراین، رفتار مجانبی امواج کروی آزاد عبارت است از

$$\varphi_{k,l,m}^{(0)}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} Y_l^m(\theta, \varphi) \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} \quad (56)$$

اگر عملگر  $\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho}$  را یک بار بر  $\sin \rho / \rho$  اعمال کنیم، می توانیم  $j_l(\rho)$  را به صورت زیر بنویسیم

$$j_l(\rho) = (-1)^l \rho^l \left( \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^{l-1} \left[ \frac{\cos \rho}{\rho^2} - \frac{\sin \rho}{\rho^2} \right] \quad (57)$$

وقتی  $\rho$  به سمت بینهایت میل می کند، جمله دوم داخل کروشه در مقایسه با جمله اول قابل اغماض است. به علاوه، وقتی  $d/d\rho$  را برای مرتبه دوم اعمال کنیم، جمله برتر، باز از مشتق کسینوس حاصل می شود.

بنابراین ملاحظه می کنیم که

$$j_l(\rho) \underset{\rho \rightarrow \infty}{\sim} (-1)^l \rho^l \frac{1}{\rho^l} \frac{1}{\rho} \left( \frac{d}{d\rho} \right)^l \sin \rho \quad (58)$$

زیرا

$$\left(\frac{d}{d\rho}\right)^l \sin \rho = (-1)^l \sin\left(\rho - l\frac{\pi}{2}\right) \quad (59)$$

نتیجه، در واقع همان (۵۵) خواهد بود.

یادداشت:

اگر قرار دهیم

$$kr = \rho \quad (60)$$

[ $k$  طبق فرمول (۱۰) تعریف شده است]، معادله شعاعی (۴) به صورت زیر در خواهد آمد

$$\left[ \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \left( 1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) \right] R_l(\rho) = 0 \quad (61)$$

این عبارت، معادله کروی بسل از مرتبه  $l$  است. این معادله دارای دو جواب مستقل خطی است، که می‌توان آنها را، مثلاً از رفتارشان در مبدأ، از یکدیگر تمیز داد. یکی از آنها تابع بسل کروی  $j_l(\rho)$  است، که در (۵۰) و (۵۵) صدق می‌کند. برای جواب دیگر، می‌توانیم "تابع کروی مرتبه  $l$  نویمان" را که به صورت  $n_l(\rho)$  نمایش داده می‌شوند، و دارای خواص زیر هستند

$$n_l(\rho) \underset{\rho \rightarrow 0}{\sim} \frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+1}} \quad (62\text{الف})$$

$$n_l(\rho) \underset{\rho \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - l\frac{\pi}{2}\right) \quad (62\text{ب})$$

انتخاب کنیم.

### ۳. رابطه میان امواج کروی آزاد و امواج تخت

ما اکنون دو پایه متمایز از ویژه‌حالت‌های  $H_0$  را می‌شناسیم: امواج تخت  $v_k^{(0)}(\mathbf{r})$  که ویژه‌تابع‌های سه مؤلفه تکانه  $\mathbf{P}$  اند؛ و امواج کروی آزاد  $\varphi_{k,l,m}^{(0)}(\mathbf{r})$ ، که ویژه‌تابع‌های  $\mathbf{L}^2$  و  $L_z$  هستند. این دو پایه با یکدیگر متفاوت‌اند زیرا  $\mathbf{P}$  با  $\mathbf{L}^2$  و  $L_z$  جابه‌جا نمی‌شود.

بدیهی است که یک تابع مفروض از یکی از این پایه‌ها را می‌توان برحسب پایه دیگر بسط داد. مثلاً، موج تخت  $v_k^{(0)}(\mathbf{r})$  را به صورت برهم‌نهی خطی امواج کروی آزاد بیان خواهیم کرد.

بنابراین، یک بردار  $k$  در فضای معمولی را در نظر بگیرید. موج تخت  $v_k^{(0)}(\mathbf{r})$  که این بردار آن را مشخص می‌کند، یک ویژه تابع  $H_0$  با ویژه مقدار  $\hbar^2 k^2 / 2\mu$  است. بنابراین، بسط آن تنها شامل  $\varphi_{k,l,m}^{(0)}$  مربوط به این انرژی، یعنی شامل امواجی است که برای آنها

$$k = |k| \quad (63)$$

باشد. لذا، این بسط به صورت زیر خواهد بود

$$v_k^{(0)}(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} c_{l,m}(k) \varphi_{k,l,m}^{(0)}(\mathbf{r}) \quad (64)$$

شاخصهای آزاد  $k$  و  $k$  توسط معادله (۶۳) به یکدیگر مربوط می‌شوند. با استفاده از خواص هماهنگهای کروی (مکمل ۱ از فصل ۶) و توابع بسل کروی، به آسانی می‌توان نشان داد که

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} i^l Y_l^{m*}(\theta_k, \varphi_k) j_l(kr) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (65)$$

که در آن  $\theta_k$  و  $\varphi_k$  زوایای قطبی نماینده جهت بردار  $k$  هستند. اگر  $k$  در امتداد  $Oz$  باشد، بسط (۶۵) به صورت زیر در می‌آید

$$\begin{aligned} e^{ikz} &= \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} j_l(kr) Y_l^0(\theta) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) \end{aligned} \quad (66)$$

که  $P_l$  چندجمله‌ای لژاندر از درجه  $l$  است [معادله (۵۷) از مکمل ۱ فصل ۶].

ابتدا رابطه (۶۶) را ثابت می‌کنیم. برای این کار، فرض می‌کنیم بردار  $k$  با  $Oz$  همخط است، یعنی،

$$k_x = k_y = 0 \quad (67)$$

و همگی در یک جهت باشند. در این صورت، معادله (۶۳) تبدیل می‌شود به

$$k_z = k \quad (68)$$

همچنین می‌خواهیم تابع

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} \quad (۶۹)$$

را در پایه  $\{\varphi_{k,l,m}^{(\circ)}(\mathbf{r})\}$  بسط دهیم. چون این تابع مستقل از  $\varphi$  است، فقط یک ترکیب خطی از توابع پایه‌ای خواهد بود که برای آنها  $m = 0$  است

$$\begin{aligned} e^{ikr \cos \theta} &= \sum_{l=0}^{\infty} a_l \varphi_{k,l,0}^{(\circ)}(\mathbf{r}) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} c_l j_l(kr) Y_l^0(\theta) \end{aligned} \quad (۷۰)$$

برای محاسبه اعداد  $c_l$ ، می‌توانیم  $e^{ikr \cos \theta}$  را به‌عنوان تابعی از متغیر  $\theta$  در نظر بگیریم که در آن  $r$  نقش یک پارامتر را بازی کند. چون هماهنگ‌های کروی برای توابعی از  $\theta$  و  $\varphi$ ، یک پایه راست‌هنجار تشکیل می‌دهند، "ضریب"  $c_l j_l(kr)$  را می‌توان به‌صورت زیر بیان کرد

$$c_l j_l(kr) = \int d\Omega Y_l^{0*}(\theta) e^{ikr \cos \theta} \quad (۷۱)$$

با جایگزین کردن  $Y_l^0$  از رابطه  $Y_l^0(\theta, \varphi)$  [فرمول (۲۵) مکمل ۱ از فصل ۶] خواهیم داشت

$$\begin{aligned} c_l j_l(kr) &= \frac{1}{\sqrt{(2l)!}} \int d\Omega \left[ \left( \frac{L_-}{\hbar} \right)^l Y_l^l(\theta, \varphi) \right]^* e^{ikr \cos \theta} \\ &= \frac{1}{\sqrt{(2l)!}} \int d\Omega Y_l^{l*}(\theta, \varphi) \left[ \left( \frac{L_+}{\hbar} \right)^l e^{ikr \cos \theta} \right] \end{aligned} \quad (۷۲)$$

زیرا  $L_+$  عملگر الحاقی  $L_-$  است. بدین ترتیب، فرمول (۱۶) از مکمل ۱ فصل ۶ منجر می‌شود به

$$\begin{aligned} \left( \frac{L_+}{\hbar} \right)^l e^{ikr \cos \theta} &= (-1)^l e^{il\varphi} (\sin \theta)^l \frac{d^l}{d(\cos \theta)^l} e^{ikr \cos \theta} \\ &= (-1)^l e^{il\varphi} (\sin \theta)^l (ikr)^l e^{ikr \cos \theta} \end{aligned} \quad (۷۳)$$

حال،  $(\sin \theta)^l e^{il\varphi}$ ، با تقریب یک ضریب ثابت، دقیقاً همان  $Y_l^l(\theta, \varphi)$  است [فرمول‌های (۴) و (۱۴) از مکمل ۱ فصل ۶]. در نتیجه

$$c_l j_l(kr) = (ikr)^l \frac{2^l l!}{\sqrt{(2l)!}} \sqrt{\frac{4\pi}{(2l+1)!}} \int d\Omega |Y_l^l(\theta, \varphi)|^l e^{ikr \cos \theta} \quad (۷۴)$$

بنابراین برای محاسبه  $c_l$ ، کافی است، مقدار خاصی از  $kr$  را، که به‌ازاء آن مقدار  $j_l(kr)$  را می‌دانیم، انتخاب کنیم. مثلاً فرض کنید  $kr$  به‌سمت صفر میل کند، در این صورت می‌دانیم که  $j_l(kr)^l$  مانند  $(kr)^l$  رفتار می‌کند، و در واقع طرف راست معادله (۷۴) نیز چنین رفتاری دارد. به‌طور دقیقتر، با استفاده از (۵۰)، خواهیم داشت

$$c_l \frac{1}{(2l+1)!!} = i^l \frac{2^l l!}{\sqrt{(2k)^l}} \sqrt{\frac{4\pi}{(2l+1)!}} \int d\Omega |Y_l^l(\theta, \varphi)|^2 \quad (75)$$

یعنی، چون  $Y_l^l$  بهنجاریده به ۱ است، داریم

$$c_l = i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} \quad (76)$$

که فرمول (۶۶) را اثبات می‌کند.

بنابراین، رابطه کلی (۶۵) را می‌توانیم به‌صورت نتیجه‌ای از قضیه جمع هماهنگهای کروی [فرمول (۷۰) از مکمل ۱ فصل ۶]، به‌دست بیاوریم. جهت  $k$  (که با زوایای قطبی  $\theta_k$  و  $\varphi_k$  تعریف می‌شود) هر چه باشد، همواره می‌توانیم، با دوران دستگاه محورها، به‌حالتی بازگردیم که هم‌اکنون بررسی کردیم. در نتیجه، بسط (۶۶) معتبر باقی می‌ماند، مشروط بر اینکه جای  $k_z$  را با  $k \cdot r$  و  $\cos \theta$ ، را با  $\cos \alpha$  عوض کنیم؛ که در آن  $\alpha$  زاویه بین  $k$  و  $r$  است

$$e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \alpha) \quad (77)$$

اما قضیه جمع هماهنگهای کروی این امکان را می‌دهد که  $P_l(\cos \alpha)$  را برحسب زوایای  $(\theta, \varphi)$  و  $(\theta_k, \varphi_k)$  بیان کنیم؛ در این صورت، نهایتاً فرمول (۶۵) حاصل می‌شود.

بسطهای (۶۵) و (۶۶) نشان می‌دهند که یک حالت با تکانه خطی خوش‌تعریف، تمام تکانه‌های زاویه‌ای مداری ممکن شامل می‌شود را در بر می‌گیرد.

برای به‌دست آوردن بسط یک تابع معین  $\varphi_{k,l,m}^{(0)}(\mathbf{r})$  برحسب امواج تخت، کافی است فرمول (۶۵) را، با استفاده از رابطه راست‌هنجاری هماهنگهای کروی که تابع  $\theta_k$  و  $\varphi_k$  هستند، وارونه کنیم. از این کار نتیجه می‌شود

$$\int d\Omega_k Y_l^m(\theta_k, \varphi_k) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = 4\pi i^l j_l(kr) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (78)$$

و لذا خواهیم داشت

$$\varphi_{k,l,m}^{(0)}(\mathbf{r}) = \frac{(-1)^l}{4\pi} i^l \sqrt{\frac{2k^l}{\pi}} \int d\Omega_k Y_l^m(\theta_k, \varphi_k) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (79)$$

ذره آزاد: حالت‌های مانای با تکانه زاویه‌ای خوش‌تعریف ۶۷

پس، یک ویژه‌تابع  $L^2$  و  $L_z$ ، یک برهم‌نهی خطی از تمام امواج تخت هم‌انرژی است: یک حالت با تکانه زاویه‌ای خوش‌تعریف، تمام جهت‌های ممکن تکانه خطی را در بر می‌گیرد.

مراجع برای مطالعه بیشتر

Messiah (1.17), App. B, §6; Arfken (10.4), § 11.6; Butkov (10.8), chap. 9, §9; see the subsection "Special functions and tables" of section 10 of the bibliography.

## مکمل ۲

### توصیف پدیده شناختی برخورد های همراه با جذب

۱. اساس روش

۲. محاسبه سطح مقطعها

الف) سطح مقطع پراکندگی کشسان

ب) سطح مقطع جذب

ج) سطح مقطع کل. قضیه نوری

در فصل ۸، مطالعه خود را به پراکندگی کشسان ذرات توسط یک پتانسیل، محدود کردیم. ولی در مقدمه فصل ۸ خاطرنشان کردیم که برخوردهای میان ذرات می‌توانند ناکشسان نیز باشند و تحت شرایط معینی، منجر به واکنشهای متعدد دیگری (آفرینش یا نابودی ذرات و غیره ...) شوند بخصوص اگر انرژی ذرات ورودی زیاد باشد، وقتی چنین واکنشهایی ممکن باشند و ما فقط ذراتی را که به طور کشسان پراکنده شده‌اند آشکارسازی کنیم، مشاهده می‌کنیم که بعضی از ذرات یاریکه فرودی "ناپدید" شده‌اند؛ یعنی، نه در یاریکه عبوری یافت می‌شوند و نه در بین ذراتی که به طور کشسان پراکنده شده‌اند. در این صورت اصطلاحاً می‌گوییم که این ذرات ضمن برهم‌کنش "جذب" شده‌اند؛ در واقع، این ذرات در واکنشهایی غیر از پراکندگی ساده کشسان شرکت داشته‌اند. اگر تنها پراکندگی کشسان مورد نظر باشد، در پی توصیف کلی پدیده "جذب"، برمی‌آییم، بدون اینکه به جزئیات سایر واکنشهای ممکن پردازیم. در اینجا می‌خواهیم نشان دهیم که روش پاره‌موجها، چارچوب مناسبی برای یک چنین توصیف پدیده شناختی است.

### ۱. اساس روش

فرض خواهیم کرد که برهم‌کنشهایی که مسئول ناپدید شدن ذرات فرودی هستند، نسبت به دوران حول  $O$  ناوردا باشند. بنابراین، همواره می‌توان دامنه پراکندگی را به پاره‌موجهایی تجزیه کرد، که هر یک از آنها به یک مقدار ثابت تکانه زاویه‌ای مربوط است.

در این بخش، خواهیم دید که چگونه می‌توان روش پاره‌موجها را تغییر داد تا برهم‌کنش احتمالی جذب را نیز در بر بگیرد. برای انجام این کار، به تعبیر پاره‌موجها که در بخش ۸-۳-۳-ب-۱ از فصل ۸ آمده است باز می‌گردیم. یک موج آزاد ورودی، به حوزه تأثیر پتانسیل نفوذ می‌کند و یک موج خروجی ایجاد می‌کند. تأثیر پتانسیل این است که این موج خروجی را در  $e^{i\delta_1}$  ضرب کند. چون مدول این برابر ۱ است (انتقال فاز  $\delta_1$  حقیقی است)، دامنه موج خروجی با دامنه موج ورودی



برابر خواهد بود. در نتیجه (محاسبهٔ ۲-ب در قسمت زیر)، شار کل موج ورودی با شار کل موج خروجی مساوی است: در خلال پراکندگی، احتمال پایسته است، یعنی، تعداد کل ذرات ثابت است. این بررسیها پیشنهاد می‌کند که، در مواردی که پدیدهٔ جذب اتفاق می‌افتد، به‌سادگی می‌توان با دادن یک قسمت موهومی به انتقال فاز، به‌طوری که

$$|e^{2i\delta_l}| < 1 \quad (1)$$

باشد، آنها را به حساب آورد. بنابراین، دامنهٔ موج خروجی با تکانهٔ زاویه‌ای  $l$ ، از دامنهٔ موج ورودی‌ای که آن را ایجاد کرده، کوچکتر است. این حقیقت که شار احتمال خروجی از شار احتمال ورودی کوچکتر است مبین "ناپدید شدن" تعدادی از ذرات است.

اکنون نظر فوق را بازتر می‌کنیم و از آن، روابطی را برای سطح مقطعهای پراکندگی و جذب به‌دست می‌آوریم. با این همه تأکید می‌کنیم که این صرفاً یک روش پدیده‌شناختی است: پارامترهایی که با آنها جذب را مشخص خواهیم کرد (مدول  $e^{2i\delta_l}$  برای هر پاره‌موج) اغلب اوقات یک واقعیت بسیار پیچیده را مستور می‌کنند. همچنین توجه کنید که اگر احتمال کل، دیگر پایسته نباشد، غیرممکن است که بتوان برهم‌کنش را توسط یک پتانسیل ساده تشریح کرد. به‌این ترتیب، بررسی صحیح مجموعه پدیده‌هایی که می‌توانند در ضمن برخورد ایجاد شوند احتیاج به صورتبندی دقیقتری از آنچه در فصل ۸ آمده است، خواهد داشت.

## ۲. محاسبهٔ سطح مقطعها

به محاسبات بخش ۸-۳-۴ از فصل ۸ برمی‌گردیم و قرار می‌دهیم

$$\eta_l = e^{2i\delta_l} \quad (2)$$

چون احتمال ایجاد واکنشهایی غیر از پراکندگی کشسان، همواره با کاهش تعداد ذرات پراکنده شده به‌طور کشسان همراه است، باید داشته باشیم

$$|\eta_l| \leq 1 \quad (3)$$

(تساوی برای مواردی است که فقط پراکندگی کشسان ممکن باشد). بنابراین شکل مجانبی تابع موجی که پراکندگی کشسان را توصیف می‌کند عبارت است از [ فرمول (۸-۴-۱) از فصل ۸ ]

$$v_k^{\text{diff}}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} - \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} Y_l^0(\theta) \frac{e^{-ikr} e^{i\pi/2} - \eta_l e^{ikr} e^{-i\pi/2}}{2ikr} \quad (4)$$

## الف) سطح مقطع پراکندگی کشسان

استدلال بخش ۸-۳-۴ الف از فصل ۸ معتبر باقی می ماند و دامنه پراکندگی  $f_k(\theta)$  را به شکل زیر بیان می کند

$$f_k(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} Y_l^0(\theta) \frac{\eta_l - 1}{2i} \quad (5)$$

از این رابطه سطح مقطع دیفرانسیلی پراکندگی، یعنی

$$\sigma_{el}(\theta) = \frac{1}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} Y_l^0(\theta) \frac{\eta_l - 1}{2i} \right|^2 \quad (6)$$

و سطح مقطع کل پراکندگی، یعنی

$$\sigma_{el} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |1 - \eta_l|^2 \quad (7)$$

را به دست می آوریم.

یادداشت:

بنابر بحثی که در بخش ۱ آمد، وقتی  $|\eta|$  صفر است، یعنی، هنگامی که

$$\eta_l = 0 \quad (8)$$

جذب موج ( $l$ ) به یک ماکزیموم می رسد. ولی فرمول (۷) نشان می دهد که، حتی در این حالت حدی نیز سهم موج ( $l$ ) در سطح مقطع پراکندگی کشسان صفر نیست.<sup>۱</sup> به عبارت دیگر، حتی اگر ناحیه برهم کنش کاملاً جذب کننده باشد، باز پراکندگی کشسان ایجاد می کند. این پدیده مهم صرفاً یک اثر کوانتومی است. این پدیده را می توان با رفتار یک موج نوری که به یک ماده جذب کننده برخورد می کند مقایسه کرد. حتی اگر جذب کامل باشد (یک کره یا قرص کاملاً سیاه)، باز یک موج پراشیده مشاهده می شود (متمركز در یک زاویه فضایی که با بزرگتر شدن سطح قرص کوچکتر می شود). به این دلیل است که پراکندگی کشسان حاصل از یک برهم کنش کاملاً جذب کننده را اصطلاحاً پراکندگی سایه می نامیم.

۱. این سهم، تنها زمانی که  $\eta = 1$  است، یعنی وقتی انتقال فاز حقیقی مضرب صحیحی از  $\pi$  باشد، صفر است [فرمول (۸-۱۱۱) از فصل ۸ شامل این مطلب است].

## ب) سطح مقطع جذب

در ادامه همان اصلی که در بخش ۸-۱-۳ فصل ۸ آمد، سطح مقطع جذب  $\sigma_{\text{abs}}$  را به صورت: "نسبت تعداد ذرات جذب شده در واحد زمان به شار فرودی"، تعریف می‌کنیم.

برای محاسبه این سطح مقطع، کافی است، مانند بخش ۸-۲-۲ فصل ۸، مقدار احتمال کل  $\Delta \mathcal{P}$  را که در واحد زمان "ناپدید" می‌شود تعیین کنیم. این احتمال را می‌توان از جریان  $\mathbf{J}$  وابسته به تابع موج (۴) به دست آورد.  $\Delta \mathcal{P}$  برابر است با تفاضل شار امواج ورودی به یک کره  $(S)$  با شعاع بسیار بزرگ  $R_0$  و شار امواج خروجی؛ لذا این احتمال برابر است با منهای شار خالص بردار  $\mathbf{J}$  که از این کره خارج می‌شود. پس

$$\Delta \mathcal{P} = - \int_{(S)} \mathbf{J} \cdot d\mathbf{S} \quad (9)$$

که

$$\mathbf{J} = \text{Re} \left[ v_k^{(\text{diff})*}(\mathbf{r}) \frac{\hbar}{i\mu} \nabla v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r}) \right] \quad (10)$$

فقط مؤلفه شعاعی  $J_r$  مربوط به جریان در انتگرال (۹) شرکت می‌کند

$$\Delta \mathcal{P} = - \int_{r=R_0} J_r r^2 d\Omega \quad (11)$$

که در آن

$$J_r = \text{Re} \left[ v_k^{(\text{diff})*}(\mathbf{r}) \frac{\hbar}{i\mu} \frac{\partial}{\partial r} v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r}) \right] \quad (12)$$

در فرمول (۱۲)، عمل مشتقگیری تغییری در وابستگی زاویه‌ای جملات مختلفی که  $v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r})$  را تشکیل می‌دهند، ایجاد نمی‌کند [فرمول (۴)]. در نتیجه به علت بهنجاری هماهنگهای کروی، سهم جملات ناشی از حاصلضرب عوامل غیرمتناظر یک پاره‌موج  $(l)$  موجود در  $v_k^{(\text{diff})}(\mathbf{r})$  و موج متفاوت  $(l')$  موجود در  $v_k^{(\text{diff})*}(\mathbf{r})$ ، در انتگرال (۱۱) صفر است. بنابراین داریم

$$\Delta \mathcal{P} = - \sum_{l=0}^{\infty} \int_{r=R_0} J_r^{(l)} r^2 d\Omega \quad (13)$$

که  $J_r^{(l)}$  مؤلفه شعاعی جریان وابسته به پاره‌موج ( $l$ ) است. با یک محاسبه ساده داریم

$$J_r^{(l)} \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{\hbar k}{\mu} \frac{\pi(\nu l + 1)}{k^2 r^2} [1 - |\eta_l|^2] |Y_l^\circ(\theta)|^2 \quad (14)$$

چون  $Y_l^\circ(\theta)$  پهنجار است، بالاخره نتیجه می‌شود

$$\Delta \mathcal{P} = \frac{\hbar k}{\mu} \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (\nu l + 1) [1 - |\eta_l|^2] \quad (15)$$

بنابراین، سطح مقطع جذب  $\sigma_{\text{abs}}$  برابر است با احتمال  $\Delta \mathcal{P}$  تقسیم بر جریان فرودی  $\hbar k/\mu$

$$\sigma_{\text{abs}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (\nu l + 1) [1 - |\eta_l|^2] \quad (16)$$

بدیهی است که اگر مدول تمام  $\eta_l$ ها برابر ۱ باشد، یعنی بنا به (۲) تمام انتقال فازها حقیقی باشند،  $\sigma_{\text{abs}}$  صفر است. در این صورت، فقط پراکندگی کشسان وجود دارد و شار خالص احتمال خروج از کره‌ای به شعاع بزرگ  $R_0$ ، همواره صفر خواهد بود. احتمال کل حمل شده توسط امواج فرودی، کلاً به امواج خروجی منتقل می‌شود. از طرف دیگر، وقتی  $\eta_l$  صفر باشد، سهم موج ( $l$ ) در سطح مقطع جذب، ماکزیموم خواهد بود.

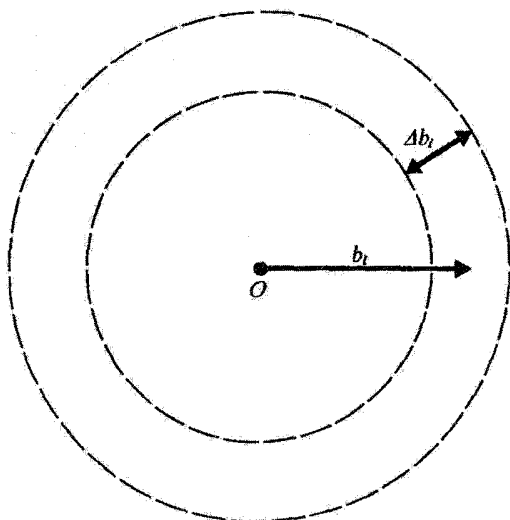
یادداشت:

محاسبه عبارت (۱۵) نشان می‌دهد که  $(\hbar k/\mu)(\pi/k^2)(\nu l + 1)$  مقدار احتمالی است که در واحد زمان از پاره‌موج ( $l$ ) وارد می‌شود. اگر این مقدار را بر جریان ورودی  $\hbar k/\mu$  تقسیم کنیم، سطحی به دست می‌آید که می‌توان آن را "سطح مقطع ورودی به پاره‌موج ( $l$ )" نامید

$$\sigma_l = \pi/k^2(\nu l + 1) \quad (17)$$

این فرمول را می‌توان به‌طور کلاسیک تعبیر کرد: موج تخت ورودی را به‌عنوان توصیف‌کنندهٔ باریکه‌ای از ذرات با چگالی یکنواخت، و تکانه  $\hbar k$ ی موازی با  $Oz$ ، در نظر می‌گیریم. چه بخشی از این ذرات یا تکانه زاویه‌ای  $\hbar\sqrt{l(l+1)}$  به پتانسیل پراکندگی می‌رسند؟ قبلاً ارتباط بین تکانه زاویه‌ای و پارامتر برخورد را در مکانیک کلاسیک ذکر کرده‌ایم [ فرمول (۷۶-۸) از فصل ۸ ]

$$|\mathcal{L}| = b|p| = \hbar k b \quad (18)$$



شکل ۱ ذرات ورودی باید با پارامتر برخوردی که با تقریب برابر با  $b_l$  است به پتانسیل برسند تا تکانه زاویه ای کلاسیک آنها با تقریب  $\hbar$  برابر با  $\hbar\sqrt{l(l+1)}$  باشد.

پس آنچه باید انجام دهیم این است که در صفحه نقطه  $O$  و عمود بر  $Oz$ ، یک حلقه دایره ای به مرکز  $O$  و به شعاع متوسط  $b_l$  رسم کنیم به طوری که

$$\hbar\sqrt{l(l+1)} = \hbar k b_l \quad (19)$$

و پهنای  $\Delta b_l$  این حلقه مربوط به  $\Delta l = 1$  در فرمول (۱۹) باشد (شکل ۱). تمام ذراتی که از این سطح عبور می کنند به پتانسیل پراکندگی می رسند و تکانه زاویه ای آنها، در موقع رسیدن به پتانسیل، با تقریب  $\hbar$  برابر با  $\hbar\sqrt{l(l+1)}$  است. از رابطه (۱۹)، در صورتی که  $l \gg 1$  باشد، خواهیم داشت

$$b_l = \frac{1}{k} \sqrt{l(l+1)} \simeq \frac{1}{k} \left( l + \frac{1}{2} \right) \quad (20)$$

و در نتیجه

$$\Delta b_l = \frac{1}{k} \quad (21)$$

مساحت حلقه دایره ای شکل ۱ برابر است با

$$2\pi b_l \Delta b_l \simeq \frac{\pi}{k^2} (2l + 1) \quad (22)$$

بنابراین، بار دیگر  $\sigma_l$  به سادگی به دست می آید.

## ج) سطح مقطع کل. قضیه نوری

وقتی یک برخورد بتواند منجر به چند واکنش یا پدیده پراکندگی مختلف شود، سطح مقطع کل،  $\sigma_{tot}$ ، را به صورت مجموع سطح مقطعیهای مربوط به تمام این فرایندها، (که روی تمام جهات فضا انتگرال گیری می شود)، تعریف می کنیم. بنابراین، سطح مقطع کل برابر است با تعداد ذراتی که، در واحد زمان، در هر یک از واکنشهای ممکن شرکت می کنند، تقسیم بر شار فرودی. اگر مانند آنچه گذشت پراکندگی کشسان را جدا از تمام واکنشهای دیگر در نظر بگیریم، به سادگی داریم

$$\sigma_{tot} = \sigma_{el} + \sigma_{abs} \quad (23)$$

سپس از فرمولهای (۷) و (۱۶) خواهیم داشت

$$\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(1 - \text{Re } \eta_l) \quad (24)$$

در اینجا،  $(1 - \text{Re } \eta_l)$  قسمت حقیقی  $(1 - \eta_l)$  است که در دامنه پراکندگی کشسان [فرمول (۵)] ظاهر می شود. به علاوه، مقدار  $Y_l^\circ(\theta)$  به ازاء  $\theta = 0$  عبارت است از

$$Y_l^\circ(0) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \quad (25)$$

[مکمل ۱ از فصل ۶ فرمولهای (۵۷) و (۶۰)]. در نتیجه اگر از رابطه (۵) قسمت موهومی دامنه پراکندگی الاستیک در جهت جلو را محاسبه کنیم، نتیجه می شود

$$\text{Im } f_k(0) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{1 - \text{Re } \eta_l}{2} \quad (26)$$

با مقایسه این رابطه با فرمول (۲۴)، ملاحظه می کنیم که

$$\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k} \text{Im } f_k(0) \quad (27)$$

این رابطه بین سطح مقطع کل و قسمت موهومی دامنه پراکندگی کشسان در جهت جلو، به مفهوم بسیار عمومی معتبر است! این رابطه آنچه را که قضیه نوری می نامند، تشکیل می دهد.

یادداشت:

بدیهی است که قضیه نوری در حالتی که پراکندگی صرفاً کُشسان باشد نیز معتبر است ( $\sigma_{\text{tot}} = \sigma_{\text{el}}$ ) و ( $\sigma_{\text{abs}} = 0$ ). این حقیقت را که  $f_{\text{R}}(\theta) - f_{\text{L}}(\theta)$  یعنی، موج پراکنده در جهت جلو به سطح مقطع کل مربوط است می‌توانستیم از بحثی که در بخش ۸-۲-۲-۲ از فصل ۸ شده است، پیش‌بینی کنیم. این تداخل بین موج تخت ورودی و موج پراکنده در جهت جلو است که برای تضعیف پرتوی عبوری، ناشی از پراکندگی ذرات در تمام جهات فضا، به حساب می‌آید. ■

مراجع برای مطالعه بیشتر

Optical model: Valentin (16.1), §X-3. High energy proton-proton collisions: Amaldi (16.31).

## مکمل ۳

### چند کاربرد ساده از نظریه پراکندگی

۱. تقریب بورن برای پتانسیل یوکاوا

الف) محاسبه دامنه و سطح مقطع پراکندگی

ب) حد برد نامتناهی

۲. پراکندگی توسط یک کره سخت در انرژی پایین

۳. تمرینات

الف) پراکندگی موج  $p$  توسط کره سخت

ب) "چاه کروی مربعی": حالت‌های مقید و تشدیدهای پراکندگی

هیچ پتانسیلی وجود ندارد که برای آن بتوان مسئله پراکندگی را با یک محاسبه تحلیلی ساده، دقیقاً حل کرد. به همین جهت در مثالهایی که در اینجا قصد بررسی آنها را داریم، به استفاده از تقریبهایی که در فصل ۸ معرفی کردیم، بسنده می‌کنیم.

### ۱. تقریب بورن برای پتانسیل یوکاوا

پتانسیلی به صورت

$$V(\mathbf{r}) = V_0 \frac{e^{-\alpha r}}{r} \quad (1)$$

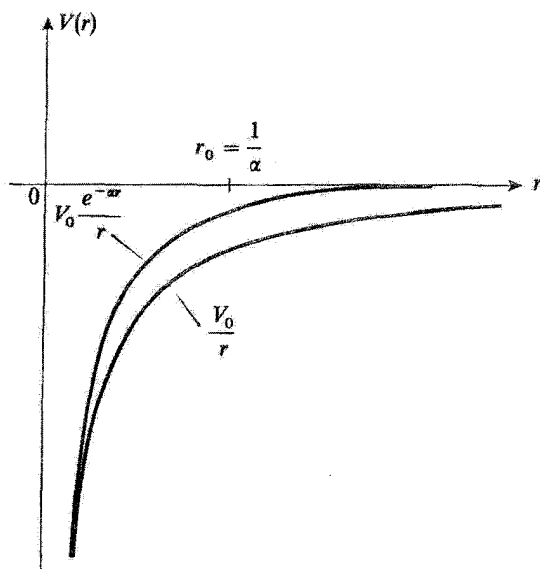
در نظر بگیرید که در آن  $V_0$  و  $\alpha$  ثابت‌هایی حقیقی‌اند و  $\alpha$  مثبت است. بسته به اینکه  $V_0$  منفی باشد یا مثبت، این پتانسیل جاذبه یا دافعه است. هر چه  $|V_0|$  بزرگتر باشد پتانسیل قویتر خواهد بود. برد این پتانسیل توسط فاصله

$$r_0 = \frac{1}{\alpha} \quad (2)$$

مشخص می‌شود، زیرا، همان‌طور که از شکل ۱ پیداست وقتی  $r$  از  $2r_0$  یا  $3r_0$  تجاوز کند،  $V(r)$  عملاً صفر است.

۱. در واقع پتانسیل کولنی را می‌توانیم دقیقاً حل کنیم؛ اما همان‌گونه که در فصل ۸ (بخش ۸-۲-۱) ذکر کردیم، این کار مستلزم روش خاصی است.





شکل ۱ پتانسیل یوکاوا و پتانسیل کولنی. وجود جمله  $e^{-\alpha r}$  باعث می‌شود که وقتی  $r_0 = 1/\alpha = r \gg r_0$  (برد پتانسیل) باشد، پتانسیل یوکاوا خیلی سریعتر به سمت صفر میل کند.

پتانسیل (۱) از این نظر اسم یوکاوا یدک می‌کشد که عقیده داشت این پتانسیل به نیروهای هسته‌ای وابسته است که بردش حدود یک فرمی است. یوکاوا برای تشریح منشأ این پتانسیل، وجود مزون  $\pi$  را، که بعداً کشف شد، پیش‌بینی کرد. توجه کنید که به ازای  $\alpha = 0$  این پتانسیل به پتانسیل کولنی تبدیل می‌شود، و به این ترتیب می‌توان فرض کرد که پتانسیل کولنی پتانسیل یوکاوا با برد نامتناهی است.

### الف) محاسبه دامنه و سطح مقطع پراکندگی

فرض می‌کنیم  $|V_0|$  آن قدر کوچک است که تقریب بورن (بخش ۸-۲-۴ فصل ۸) معتبر باشد. در این صورت، طبق فرمول (۸-۵۲) از فصل ۸، دامنه پراکندگی  $f_k^{(B)}(\theta, \varphi)$  توسط رابطه زیر داده می‌شود

$$f_k^{(B)}(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2\mu V_0}{\hbar^2} \int d^3r e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} \frac{e^{-\alpha r}}{r} \quad (3)$$

که  $\mathbf{K}$  تکانه انتقال یافته در جهت  $(\theta, \varphi)$  است که با رابطه (۸-۴۷) از فصل ۸ تعریف می‌شود.

عبارت (۳) شامل تبدیل فوریه پتانسیل یوکاواست. چون این پتانسیل فقط به متغیر  $r$  بستگی دارد، انتگرالهای زاویه‌ای به سادگی قابل محاسبه‌اند (بخش ۸-۲ از پوست ۱)، و در نتیجه، دامنه پراکندگی به صورت زیر در می‌آید

$$f_k^{(B)}(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2\mu V_0}{\hbar^2} \frac{4\pi}{|\mathbf{K}|} \int_0^\infty r dr \sin |\mathbf{K}|r \frac{e^{-\alpha r}}{r} \quad (4)$$

پس از یک محاسبه ساده داریم

$$f_k^{(B)}(\theta, \varphi) = -\frac{2\mu V_0}{\hbar^2} \frac{1}{\alpha^2 + |\mathbf{K}|^2} \quad (5)$$

از شکل ۶ فصل ۸ پیداست که

$$|\mathbf{K}| = 2k \sin \frac{\theta}{2} \quad (6)$$

که  $k$  مدول بردار موج فرودی و  $\theta$  زاویه پراکندگی است.

بنابراین، سطح مقطع دیفرانسیلی پراکندگی، در تقریب بورن، به صورت زیر نوشته می‌شود

$$\sigma^{(B)}(\theta) = \frac{4\mu^2 V_0^2}{\hbar^4} \frac{1}{[\alpha^2 + 4k^2 \sin^2 \theta/2]^2} \quad (7)$$

این سطح مقطع، مستقل از زاویه سمتی  $\varphi$  است، و این مطلبی است که می‌توانستیم آنرا از مقارن بورن پراکندگی توسط پتانسیل مرکزی نسبت به دوران حول امتداد باریکه فرودی، پیش‌بینی کنیم. از طرف دیگر، به‌ازاء یک انرژی معین (یعنی، به‌ازای یک  $k$  ثابت) این سطح مقطع به زاویه پراکندگی بستگی دارد: بخصوص، سطح مقطع در جهت جلو ( $\theta = 0$ ) از سطح مقطع در جهت عقب ( $\theta = \pi$ ) بزرگتر است. بالاخره،  $\sigma^{(B)}(\theta)$  به‌ازای  $\theta$  ثابت، تابعی نزولی از انرژی است. به‌علاوه، توجه کنید که علامت  $V_0$  در مسئله پراکندگی، لااقل در تقریب بورن، هیچ اهمیتی ندارد.

سطح مقطع کل پراکندگی به سادگی از انتگرال‌گیری زیر به دست می‌آید

$$\sigma^{(B)} = \int d\Omega \sigma^{(B)}(\theta) = \frac{4\mu^2 V_0^2}{\hbar^4} \frac{4\pi}{\alpha^2(\alpha^2 + 4k^2)} \quad (8)$$

(ب) حد برد نامتناهی

دیدیم که وقتی  $\alpha$  به سمت صفر میل می‌کند، پتانسیل یوکاوا به پتانسیل کولنی میل می‌کند. بنابراین، در این مورد حدی، چه بر سر فرمولهایی که در بالا به دست آوردیم می‌آید؟ برای به دست آوردن پتانسیل برهم‌کنش کولنی میان دو ذره با بارهای  $Z_1 q$  و  $Z_2 q$  ( $q$  بار الکترون است) می‌نویسیم

$$\alpha = 0$$

$$V_0 = Z_1 Z_2 e^2 \quad (9)$$

که در آن

$$e^2 = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \quad (10)$$

سپس از فرمول (۷) داریم

$$\begin{aligned} \sigma^{(C)}(\theta) &= \frac{4\mu^2}{\hbar^2} \frac{Z_1^2 Z_2^2 e^4}{16k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}} \\ &= \frac{Z_1^2 Z_2^2 e^4}{16E^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}} \end{aligned} \quad (11)$$

(به جای  $\hbar$ ، مقدار آن را برحسب انرژی گذاشته‌ایم).

رابطه (۱۱) در واقع همان سطح مقطع پراکندگی کولنی (فرمول رادرفورد) است. البته روشی که از طریق آن این رابطه را به دست آوردیم چیزی را اثبات نمی‌کند: نظریه‌ای که به کار برده‌ایم در مورد پتانسیل کولنی قابل اعمال نیست. ولی جالب است که مشاهده می‌کنیم تقریب بورن برای پتانسیل یوکاوا در یک وضعیت حدی که در آن برد پتانسیل به بینهایت میل می‌کند، دقیقاً فرمول رادرفورد را به دست می‌دهد.

یادداشت:

سطح مقطع کل پراکندگی برای پتانسیل کولنی بینهایت است زیرا انتگرال مربوطه به ازاء مقادیر کوچک  $\theta$  واگراست [وقتی  $\alpha$  به سمت صفر میل می‌کند رابطه (۸) بینهایت می‌شود]. این امر،

نتیجه‌ای از برد بینهایت پتانسیل کولنی است؛ حتی اگر ذره از فاصله‌ای بسیار دور از نقطه  $O$  بگذرد پتانسیل بر آن اثر می‌کند. این نکته بیان می‌دارد که چرا سطح مقطع پراکندگی باید بینهایت باشد. اما، در عالم وجود، هرگز به‌طور دقیق یک برهم‌کنش صرفاً کولنی با برد بینهایت مشاهده نمی‌شود. پتانسیل ناشی از یک ذره باردار همواره به‌خاطر حضور ذرات دیگری با بار مخالف، که کمابیش در مجاورت بلافاصل آن قرار دارند، تغییر پیدا می‌کند (اثر استار). ■

## ۲. پراکندگی توسط یک کره سخت در انرژی پایین

پتانسیل مرکزی زیر را در نظر می‌گیریم

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r > r_0 \\ \infty & r < r_0 \end{cases} \quad \text{به‌ازای} \quad (12)$$

در این مورد، می‌گوییم که یک "کره سخت" به شعاع  $r_0$  را در نظر گرفته‌ایم. فرض می‌کنیم که انرژی ذره ورودی آن قدر کم باشد که  $kr_0$  خیلی کوچکتر از ۱ شود. در این صورت می‌توانیم (بخش ۸-۳-۳-۲ از فصل ۸، تمرین ۳-الف در قسمت زیر) از تمام انتقال فازها به‌جز انتقال فاز موج  $s$  ( $l = 0$ ) صرف‌نظر کنیم. تحت این شرایط، دامنه پراکندگی  $f_k(\theta)$  به‌صورت زیر نوشته می‌شود

$$f_k(\theta) = \frac{1}{k} e^{i\delta_0(k)} \sin \delta_0(k) \quad (13)$$

(زیرا  $Y_0^0 = 1/\sqrt{4\pi}$  است)؛ سطح مقطع دیفرانسیلی همسانگرد است

$$\sigma(\theta) = |f_k(\theta)|^2 = \frac{1}{k^2} \sin^2 \delta_0(k) \quad (14)$$

بنابراین، سطح مقطع کل برابر است با

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0(k) \quad (15)$$

برای محاسبه انتقال فاز  $\delta_0(k)$ ، لازم است که معادله شعاعی مربوط به  $l = 0$  را حل کنیم. این معادله به صورت زیر نوشته می شود [فرمول (۸۸-۸) از فصل ۸].

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + k^2 \right] u_{k,0}(r) = 0 \quad \text{برای} \quad r > r_0. \quad (16)$$

که باید با شرط

$$u_{k,0}(r_0) = 0 \quad (17)$$

کامل شود، زیرا به ازاء  $r = r_0$  پتانسیل بینهایت می شود. جواب  $u_{k,0}(r)$  مربوط به معادلات (۱۶) و (۱۷)، با تقریب یک ضریب ثابت یکتاست

$$\begin{aligned} u_{k,0}(r) &= C \sin k(r - r_0) & \text{برای} & \quad r > r_0 \\ &= 0 & \text{برای} & \quad r < r_0. \end{aligned} \quad (18)$$

بنابر تعریف، انتقال فاز  $\delta_0$  توسط شکل مجانبی  $u_{k,0}(r)$  داده می شود

$$u_{k,0}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \sin(kr + \delta_0) \quad (19)$$

بنابراین، با استفاده از جواب (۱۸) داریم

$$\delta_0(k) = -kr_0. \quad (20)$$

اگر این مقدار را در رابطه (۱۵) برای سطح مقطع کل قرار دهیم، می رسمیم به

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 kr_0 \simeq 4\pi r_0^2 \quad (21)$$

زیرا بنا به فرض  $kr_0$  خیلی کوچکتر از ۱ است. بنابراین،  $\sigma$  مستقل از انرژی و چهار برابر سطح ظاهری کره سختی است که توسط ذرات باریکه ورودی دیده می شود. یک محاسبه مبتنی بر مکانیک کلاسیک برای سطح مقطع، سطح ظاهری  $\pi r_0^2$  را به دست خواهد داد: فقط ذراتی که برخورد کشسان داشته باشند منحرف خواهند شد. اما، در مکانیک کوانتومی، تحول موج وابسته

به ذرات ورودی مورد مطالعه قرار می‌گیرد، و تغییر ناگهانی  $V(r)$  در  $r = r_0$  پدیده‌ای مشابه با پراش موج نور را ایجاد می‌کند.

یادداشت:

حتی اگر طول موج ذرات ورودی در مقایسه با  $r_0$  قابل اغماض باشد ( $kr_0 \gg 1$ )، سطح مقطع کوانتومی به سمت  $\pi r_0^2$  میل نخواهد کرد. برای  $k$ های خیلی بزرگ، می‌توان رشته‌هایی که سطح مقطع کل را برحسب انتقال فازها به دست می‌دهد با یکدیگر جمع کرد [فرمول (۸-۱۱۱) از فصل ۸] در این صورت داریم

$$\sigma \underset{k \rightarrow \infty}{\sim} 2\pi r_0^2 \quad (22)$$

بنابراین، آثار موجی در حالت حدی طول موجهای خیلی کوچک، پابرجا می‌مانند. این امر ناشی از این حقیقت است که پتانسیل مورد مطالعه در  $r = r_0$  ناپیوسته است: پتانسیل همیشه در بازه‌ای که از طول موج ذرات کوچکتر است، به طور قابل ملاحظه‌ای تغییر می‌کند. ■

### ۳. تمرینات

الف) پراکندگی موج  $p$  توسط یک کره سخت

می‌خواهیم انتقال فاز  $\delta_1(k)$  را که توسط یک کره سخت روی موج  $p$  ( $l = 1$ ) ایجاد می‌شود مطالعه کنیم. بخصوص، می‌خواهیم ثابت کنیم که در انرژی پایین، این انتقال فاز در مقابل  $\delta_0(k)$  قابل اغماض می‌شود.

۱. معادله شعاعی را برای تابع  $u_{k,1}(r)$  به ازای  $r > r_0$  بنویسید. نشان دهید که جواب عمومی این معادله به صورت

$$u_{k,1}(r) = C \left[ \frac{\sin kr}{kr} - \cos kr + a \left( \frac{\cos kr}{kr} + \sin kr \right) \right]$$

است، که در آن  $C$  و  $a$  مقادیری ثابت‌اند.

۲. نشان دهید که تعریف  $\delta_1(k)$  به این معناست که

$$a = \tan \delta_1(k)$$

۳. ثابت  $a$  را از شرطی که در  $r = r_0$  بر  $u_{k,1}(r)$  تحمیل می‌شود، تعیین کنید.

۴. نشان دهید که وقتی  $k$  به سمت صفر میل می‌کند،  $\delta_1(k)$  رفتاری مانند  $(kr_0)^2$  خواهد داشت،<sup>۱</sup> که آن را در مقابل  $\delta_0(k)$  قابل اغماض می‌سازد.

ب) "چاه کروی مربعی": حالت‌های مقید و تشدیدهای پراکندگی

یک پتانسیل مرکزی  $V(r)$  به صورت زیر در نظر بگیرید

$$\begin{aligned} V(r) &= -V_0 & \text{به ازای } r < r_0 \\ &= 0 & \text{به ازای } r > r_0 \end{aligned}$$

که  $V_0$  یک ثابت مثبت است. فرض کنید

$$k_0 = \sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}}$$

۱. این نتیجه به طور کلی درست است؛ برای هر پتانسیلی با برد محدود  $r_0$ ، انتقال فاز  $\delta_l(k)$  در انرژیهای پایین مانند  $(kr_0)^{2l+1}$  رفتار می‌کند.

مطالعه خود را به بررسی موج  $s$  ( $l = 0$ ) محدود می‌کنیم.

۱. حالت‌های مقید ( $E < 0$ )

(الف) معادله شعاعی را در دو ناحیه  $r > r_0$  و  $r < r_0$  و همچنین شرطی را که در مبدأ برقرار است، بنویسید. نشان دهید که با فرض

$$\rho = \sqrt{\frac{-2\mu E}{\hbar^2}}$$

$$K = \sqrt{k_0^2 - \rho^2}$$

تابع  $u_0(r)$  الزاماً به صورت زیر است

$$u_0(r) = A e^{-\rho r} \quad r > r_0$$

$$= B \sin Kr \quad r < r_0$$

(ب) شرایط تطابق در  $r = r_0$  را بنویسید و از آن نتیجه بگیرید که تنها مقادیر ممکن برای  $\rho$  آنهایی هستند که در معادله زیر صدق می‌کنند.

$$\tan Kr_0 = -\frac{K}{\rho}$$

(ج) این معادله را مورد بحث قرار دهید: تعداد حالت‌های مقید  $s$  را به صورت تابعی از عمق چاه (برای  $r_0$  ثابت) بنویسید و نشان دهید که، بخصوص، اگر عمق چاه بسیار کم باشد هیچ حالت مقیدی وجود نخواهد داشت.

۲. تشدیدهای پراکندگی ( $E > 0$ )

(الف) مجدداً معادله شعاعی را بنویسید، این بار فرض کنید

$$k = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$$

$$K' = \sqrt{k_0^2 + k^2}$$



نشان دهید که  $u_{k_0}(r)$  به صورت زیر است

$$\begin{aligned} u_{k_0}(r) &= A \sin(kr + \delta_0) & r > r_0 \\ &= B \sin K'r & r < r_0 \end{aligned}$$

(ب)  $A$  را مساوی ۱ بگیرید ( $A = 1$ ). با استفاده از شرایط پیوستگی در  $r = r_0$  نشان دهید که ثابت  $B$  و انتقال فاز  $\delta_0$  از روابط زیر به دست می‌آیند

$$B^2 = \frac{k^2}{k^2 + k_0^2 \cos^2 K'r_0}$$

$$\delta_0 = -kr_0 + \alpha(k)$$

که در آن

$$\tan \alpha(k) = \frac{k}{K'} \tan K'r_0$$

(ج) منحنی  $B^2$  را به صورت تابعی از  $k$  رسم کنید. این منحنی، به وضوح تشدیدهایی را که برای آنها  $B^2$  ماکزیموم است، نشان می‌دهد. مقادیر  $k$ ی وابسته به این تشدیدها چیست؟ در این صورت مقدار  $\alpha(k)$  چقدر است؟ نشان دهید که اگر چنین تشدیدیهی به ازاء یک انرژی پایین ( $kr_0 \ll 1$ ) وجود داشته باشد، سهم موج  $s$  در سطح مقطع کل، عملاً ماکزیموم است.

۳. رابطه بین حالت‌های مقید و تشدیدهای پراکندگی

فرض کنید،  $k_0 r_0$  به  $(2n+1)\pi/2$  بسیار نزدیک باشد، که  $n$  یک عدد صحیح است، و قرار دهید

$$k_0 r_0 = (2n+1)\frac{\pi}{2} + \varepsilon \quad \text{با} \quad \varepsilon \ll 1$$

(الف) نشان دهید که اگر  $\varepsilon$  مثبت باشد، یک حالت مقید وجود دارد که انرژی بستگی آن،

$$E = -\hbar^2 \rho^2 / 2\mu$$

$$\rho \simeq \varepsilon k_0$$

(ب) نشان دهید که اگر  $\varepsilon$  منفی باشد، در انرژی  $E = \hbar^2 k^2 / 2\mu$  یک تشدید پراکندگی وجود دارد به طوری که

$$k^2 \simeq \frac{2k_0 \varepsilon}{r_0}$$

(ج) از این رابطه نتیجه بگیرید که با کاهش تدریجی عمق چاه (برای  $r_0$  ثابت)، حالت مقیدی که به هنگام گذشتن  $k_0 r_0$  از یک مضرب فرد  $\pi/2$  ناپدید می‌شود، به یک تشدید پراکندگی در انرژی پایین می‌انجامد.

مراجع برای مطالعه بیشتر

Messiah (1.17), chap. IX, §10 and chap. X, §§III and IV; Valentin (16.1), Annexe II.

۹

اسپین الکترون

۱-۹ معرفی اسپین الکترون

۱-۱-۹ شواهد تجربی

الف) ساختار ریز خطوط طیفی

ب) اثر "بی هنجار" زمین

ج) وجود تکانه‌های زاویه‌ای نیمه صحیح

۲-۱-۹ توصیف کوانتومی: اصول موضوع نظریهٔ پاولی

۲-۹ خواص ویژهٔ تکانهٔ زاویه‌ای

۱/۲

۳-۹ توصیف غیرنسبیتی یک

۱-۳-۹ مشاهده پذیرها و بردارهای حالت

الف) فضای حالت

ب) نمایش  $\{|\mathbf{r}, \epsilon\rangle\}$

ذره با اسپین ۱/۲

۲-۳-۹ محاسبات احتمالی برای یک اندازه‌گیری فیزیکی

تاکون الکترون را یک ذره نقطه‌ای با سه درجه آزادی مربوط به سه مختصه  $x, y, z$  و  $\hbar$  آن در نظر گرفته‌ایم. در نتیجه، نظریه کوانتومی‌ای که تا اینجا تدوین کرده‌ایم مبتنی بر این فرضیه است که حالت الکترون، در یک زمان معین، با یک تابع موج  $\psi(x, y, z)$  مشخص می‌شود که فقط به  $x, y, z$  بستگی دارد. در این چارچوب، تعدادی از سیستم‌های فیزیکی را مطالعه کرده‌ایم: از آن جمله، اتم هیدروژن (در فصل ۷)، که به خاطر آزمایش‌های بسیار دقیقی که می‌توان بر روی آن انجام داد، از اهمیت خاصی برخوردار است. نتایج به دست آمده در فصل ۷، طیف‌های گسلی و جذبی هیدروژن را خیلی دقیق توصیف می‌کنند. این نتایج، ترازهای انرژی را به طور صحیح به دست می‌دهند و تشریح قواعد گزینش را (که نشان می‌دهند از میان تمام بسامدهای ممکن پور، کدام بسامدها در طیف ظاهر می‌شوند)، با استفاده از تابع‌موجهای متناظر، ممکن می‌سازند. اتم‌هایی که تعداد الکترونهای آنها زیاد است را نیز می‌توانیم به روش مشابهی بررسی کنیم (البته با استفاده از تقریب، زیرا پیچیدگی معادله شرودینگر، حتی برای اتم دو الکترونی هلیوم، حل تحلیلی دقیق مسئله را ناممکن می‌سازد). با این همه، وقتی جزئیات طیف‌های اتمی را بررسی می‌کنیم، همان‌گونه که خواهیم دید، پدیده‌هایی ظاهر می‌شوند که نمی‌توانیم آنها را در چارچوب نظریه گفته شده، تعبیر کنیم. این نتیجه، شگفت‌انگیز نیست. مسلماً لازم است که نظریه قبلی را با چند تصحیح نسبیاتی کامل کنیم: باید اصلاحاتی را که سینماتیک نسبیتی ایجاب می‌کند (تعبیر جرم با سرعت و غیره) و آثار مغناطیسی‌ای را که نادیده گرفته‌ایم، به حساب بیاوریم. می‌دانیم که این تصحیحات کوچک‌اند (بخش ۷-۳-۴ الف) از فصل ۷): اما به هر حال وجود دارند و قابل اندازه‌گیری‌اند.

معادله دیراک توصیف کوانتومی نسبیتی الکترون را ارائه می‌دهد. این معادله، در مقایسه با معادله شرودینگر، بر تجدیدنظری عمیق در توصیف کوانتومی خواص الکترون دلالت می‌کند؛ علاوه بر تصحیحاتی که در رابطه با متغیرهای مکانی آن خاطر نشان کردیم، مشخصه جدیدی از الکترون هم ظاهر می‌شود، که همان اسپین الکترون است. به بیان وسیعتر، ساختار گروه لورنتس (گروه تبدیلات نسبیتی فضا-زمان) نشان می‌دهد که اسپین، برای ذرات گوناگون، خصوصیتی ذاتی، در ردیف مثلاً جرم در حال سکون<sup>۱</sup> آنهاست.

از لحاظ سابقه تاریخی، اسپین الکترون قبل از معرفی معادله دیراک به طور تجربی کشف شده بود. علاوه بر این، پاؤلی نظریه‌ای را ارائه کرد که اجازه می‌داد، اسپین را از طریق افزودن چند اصل موضوع تکمیلی، به‌سادگی در مکانیک کوانتومی غیرنسبیتی<sup>۲</sup> وارد کرد. پس از آن، پیش‌بینی‌های

۱. این بدان معنی نیست که اسپین منشأ صرفاً نسبیتی دارد؛ می‌توان آن را از ساختار گروه تبدیل غیرنسبیتی (گروه گالیهایی) استنتاج کرد.

۲. نظریه پاؤلی را می‌توان از یک مورد حدی نظریه دیراک، وقتی سرعت الکترون در مقایسه با سرعت نور کم باشد، به دست آورد.

نظری‌ای برای طیفهای اتمی به دست آمدند که با نتایج تجربی<sup>۱</sup> کاملاً مطابقت می‌کردند. در این فصل، نظریهٔ پاولی را که خیلی ساده‌تر از نظریهٔ دیراک است شرح می‌دهیم. بخش ۱-۹ را با تشریح چند نتیجهٔ تجربی مؤید وجود اسپین الکترون، شروع می‌کنیم. سپس، اصول موضوعی را که نظریهٔ پاولی مبتنی بر آنهاست بیان می‌کنیم. به دنبال آن، در بخش ۲-۹، خواص ویژهٔ یک تکانهٔ زاویه‌ای  $1/2$  را مورد بررسی قرار می‌دهیم. بالاخره در ۳-۹ نشان خواهیم داد که چگونه می‌توان متغیرهای مکانی و اسپین ذره‌ای مانند الکترون را همزمان مد نظر گرفت.

## ۱-۹ معرفی اسپین الکترون

### ۱-۱-۹ شواهد تجربی

دلایل تجربی مبنی بر وجود اسپین الکترون متعددند و در بسیاری از پدیده‌های مهم فیزیکی ظاهر می‌شوند. مثلاً، خواص مغناطیسی بسیاری از مواد، به‌ویژه فلزات فرومغناطیسی را فقط وقتی می‌توان تشریح کرد که اسپین را دخالت دهیم. لیکن، در اینجا بحثمان را به چند پدیدهٔ ساده، که به‌طور تجربی در فیزیک اتمی مشاهده شده‌اند. از جمله: محدود می‌کنیم ساختار ریز خطوط طیفی، اثر زیمان و بالاخره رفتار اتمهای نقره در آزمایش اشترن-گرلاخ.

### الف) ساختار ریز خطوط طیفی

مطالعهٔ دقیق تجربی خطوط طیفی اتمی (مثلاً برای اتم هیدروژن)، یک ساختار ریز را آشکار می‌کند: هر خط، در حقیقت از چند مؤلفهٔ تقریباً هم‌سامد، تشکیل شده است،<sup>۲</sup> که می‌توان آنها را به کمک دستگاهی با قدرت تفکیک خوب، به‌وضوح از یکدیگر تمیز داد. این می‌رساند که گروههایی از ترازهای اتمی وجود دارند که خیلی به‌هم نزدیک‌اند و در عین حال مجزا هستند. بخصوص، محاسبات ۳-۷ از فصل ۷ انرژیهای متوسط گروه ترازهای مختلف اتم هیدروژن را به دست می‌دهد ولی شکافتگیهای داخل هر گروه را تشریح نمی‌کند.

۱. مثلاً در فصل ۱۲، که نظریهٔ عمومی (اختلال Perturbation) بررسی شده در فصل ۱۱ را مورد استفاده قرار می‌دهیم، خواهیم دید که، چگونه تصحیحات نسبی و وجود الکترون، ما را قادر به بیان کمی جزئیات طیف اتمی هیدروژن (که اگر می‌خواستیم مطالعهٔ خود را به نظریهٔ فصل ۷ محدود کنیم، غیرقابل تشریح می‌بود) می‌سازد.

۲. مثلاً خط تشدید (گذار  $1s \leftrightarrow 2p$ ) اتم هیدروژن در واقع یک دوتایی است: دو مؤلفهٔ آن با فاصله‌ای در حدود  $10^{-2} eV$  از یکدیگر جدا هستند (یعنی، در حدود  $10^5$  مرتبه کوچکتر از انرژی متوسط گذار  $1s \leftrightarrow 2p$ ، که برابر با  $10/2eV$  است).

(ب) اثر "بی‌هنجار" زمین

وقتی یک اتم در میدان مغناطیسی یکنواخت قرار داده شود، هر یک از خطوط آن (یعنی، هر مؤلفه ساختار ریز) به چند خط هم‌فاصله شکافته می‌شود که این فاصله متناسب با میدان مغناطیسی است؛ این پدیده، اثر زمین است. با استفاده از نتایج فصلهای ۶ و ۷ (مکمل ۴ از فصل ۷) به آسانی می‌توان به منشأ اثر زمین پی برد. توضیح نظری بر این واقعیت مبتنی است که یک گشتاور مغناطیسی  $M$  به تکانه زاویه‌ای  $L$  الکترون وابسته است

$$M = \frac{\mu_B}{\hbar} L \quad (1-9)$$

که  $\mu_B$  همان "مگنتون بور" است

$$\mu_B = \frac{q\hbar}{2m_e} \quad (2-9)$$

لیکن، با آنکه این نظریه (موسوم به اثر "بهنجار" زمین) در بعضی موارد توسط آزمایش تأیید می‌شود، در مواردی، از توضیح کمی پدیده‌های مشاهده شده (موسوم به اثر "بی‌هنجار" زمین) عاجز است. برجسته‌ترین مورد "بی‌هنجاری" برای اتمهای با عدد اتمی  $Z$  فرد (به‌ویژه برای اتم هیدروژن) ظاهر می‌شود: ترازهای این قبیل اتمها به تعداد زوجی از زیرترازهای زمین تقسیم می‌شود، در حالی که بنا به نظریه گفته شده، این تعداد باید همواره فرد و برابر با  $(2l + 1)$  باشد، که در آن  $l$  یک عدد صحیح است.

(ج) وجود تکانه‌های زاویه‌ای نیمه‌صحیح

مشکل ما در اینجا، همان مشکلی است که در آزمایش اشترن-گرلاخ، فصل ۴ (بخش ۱-۴)، با آن روبرو بودیم، باریکه اتمهای نقره به‌طور متقارن به دو قسمت شکافته می‌شود. این نتایج حاکی از آنند که مقادیر نیمه‌صحیح  $l$  (که در بخش ۳-۶ فصل ۶ دیدیم یک امکان مسئله است) بدون شک وجود دارند. ولی این خود یک مشکل جدی ایجاد می‌کند، زیرا در بخش ۶-۴-۱ از فصل ۶ نشان دادیم که تکانه زاویه‌ای مداری ذره‌ای مانند الکترون فقط می‌تواند عدد صحیح باشد (به بیان دقیقتر، این عدد کوانتومی  $l$  است که باید عدد صحیح باشد). حتی در اتمهای چندالکترونی هم، تکانه زاویه‌ای مداری هر یک از الکترونها یک عدد صحیح است، و در فصل ۱۰ نشان خواهیم داد که تحت این شرایط، تکانه زاویه‌ای مداری کل اتم الزاماً یک عدد صحیح است. بنابراین، وجود تکانه‌های زاویه‌ای نیمه‌صحیح را نمی‌توان بدون فرضیه‌های اضافی تشریح کرد.

یادداشت:

ممکن نیست بتوان مستقیماً با استفاده از دستگاه اشترن-گرلاخ تکانه زاویه‌ای الکترون را اندازه گرفت. الکترونها برخلاف اتمهای نقره، دارای بار الکتریکی  $q$  هستند، و نیروی ناشی از برهم‌کنش گشتاور مغناطیسی آنها و میدان مغناطیسی ناهمگن، کاملاً توسط نیروی لورنتس  $q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$  پوشانده می‌شود.

### ۹-۱-۲ توصیف کوانتومی: اصول موضوع نظریهٔ پاؤلی

برای برطرف کردن اشکالات قبل، اولن‌بک و گوداشمیت (۱۹۲۵) فرضیهٔ زیر را پیشنهاد کردند: الکترون "می‌چرخد" و این چرخش، به الکترون یک تکانهٔ زاویه‌ای ذاتی می‌دهد که اسپین نامیده می‌شود. برای تعبیر نتایج تجربی توصیف‌شده در بالا، همچنین باید فرض کنیم که به این تکانهٔ زاویه‌ای  $S$ ، یک گشتاور مغناطیسی  $M_S$  وابسته است<sup>۱</sup>

$$M_S = \gamma \frac{\mu_B}{\hbar} S \quad (۳-۹)$$

توجه کنید که ضریب تناسب میان تکانهٔ زاویه‌ای و گشتاور مغناطیسی در (۳-۹)، دو برابر ضریب موجود در (۱-۹) است: اصطلاحاً گفته می‌شود که نسبت ژیرومغناطیسی اسپینی، دو برابر نسبت ژیرومغناطیسی مداری است.

بعدها پاؤلی این فرضیه را دقیقتر بیان کرد و توصیفی کوانتومی از اسپین ارائه داد که در حد غیرنسبیتی معتبر است. باید به اصول موضوع مکانیک کوانتومی که در فصل ۳ بیان کردیم، چند اصل موضوع دیگر در ارتباط با اسپین بیفزاییم.

تاکنون، کوانتیدگی متغیرهای مداری را مورد مطالعه قرار داده‌ایم. به مکان  $\mathbf{r}$  و تکانه  $\mathbf{p}$  ذره‌ای مانند الکترون، مشاهده‌پذیرهای  $\mathbf{R}$  و  $\mathbf{P}$  را نسبت دادیم که در فضای حالت  $\mathcal{E}_r$ ، که هم‌ریخت (ایزومرف) فضای  $\mathcal{F}$  تابع موجهاست، عمل می‌کنند. کلیهٔ کمیت‌های فیزیکی، توابعی از متغیرهای اساسی  $\mathbf{r}$  و  $\mathbf{p}$  هستند، و قواعد کوانتش ما را قادر می‌سازند که به آنها مشاهده‌پذیرهایی را که در  $\mathcal{E}_r$  عمل می‌کنند، نسبت بدهیم.  $\mathcal{E}_r$  را فضای حالت مداری می‌نامیم.

به‌این متغیرهای مداری، متغیرهای اسپین را که در اصول موضوع زیر صدق می‌کنند می‌افزاییم:

۱. در واقع، وقتی جفت‌شدگی الکترون با میدان الکترومغناطیسی کوانتیده (الکتروپوینامیک کوانتومی) را در نظر می‌گیریم، ملاحظه می‌کنیم که ضریب تناسب بین  $M_S$  و  $S$  دقیقاً  $2\mu_B/\hbar$  نیست. این اختلاف، که در مقدار نسبی از مرتبه  $10^{-2}$  است، به‌آسانی به‌طور تجربی قابل مشاهده است؛ و غالباً "گشتاور مغناطیسی غیرعادی" الکترون نامیده می‌شود.



۱. عملگر اسپین  $S$ ، یک تکانه زاویه‌ای است. این بدان معنی است که (بخش ۲-۲-۶ از فصل ۶) سه مؤلفه آن مشاهده‌پذیرهایی هستند که در روابط جابه‌جایی

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z \quad (۴-۹)$$

و دو رابطه دیگری که از جایگشت دوره‌ای شاخصهای  $x, y, z$  حاصل می‌شود، صدق می‌کنند.  
 ۲. عملگرهای اسپین در یک فضای جدید، یعنی "فضای حالت اسپین"  $\mathcal{E}_s$ ، عمل می‌کنند، که در آن  $S^2$  و  $S_z$  مجموعه‌کاملی از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جایی تشکیل می‌دهند. بنابراین، فضای  $\mathcal{E}_s$  توسط مجموعه ویژه‌حالت‌های  $|s, m\rangle$  مشترک بین  $S^2$  و  $S_z$  پدید می‌آیند

$$S^2 |s, m\rangle = s(s+1)\hbar^2 |s, m\rangle \quad (۵-۹ \text{ الف})$$

$$S_z |s, m\rangle = m\hbar |s, m\rangle \quad (۵-۹ \text{ ب})$$

بنا به نظریه عمومی تکانه زاویه‌ای (بخش ۳-۶ از فصل ۶)، می‌دانیم که  $S$  باید یک عدد صحیح یا نیمه‌صحیح باشد، و  $m$  تمام مقادیر بین  $-s$  و  $s$  را که اختلافشان با این دو عدد برابر یک عدد صحیح (که ممکن است صفر هم باشد) است، اختیار می‌کند. هر ذره معین توسط یک مقدار منحصر به فرد  $s$  مشخص می‌شود؛ در این صورت، اصطلاحاً می‌گویند که این ذره دارای اسپین  $s$  است. بنابراین، ابعاد فضای حالت اسپین  $\mathcal{E}_s$  همواره متناهی و برابر است با  $(2s+1)$ ، و کلیه حالت‌های اسپین، ویژه‌بردارهای  $S^2$  با همان ویژه‌مقدار  $s(s+1)\hbar^2$  خواهند بود.  
 ۳. فضای حالت  $\mathcal{E}$  ذره مورد نظر، حاصلضرب تانسوری  $\mathcal{E}_r$  و  $\mathcal{E}_s$  است

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_r \otimes \mathcal{E}_s \quad (۶-۹)$$

در نتیجه، (بخش F از فصل ۲)، کلیه مشاهده‌پذیرهای اسپینی با مشاهده‌پذیرهای مداری جابه‌جا می‌شوند.

بنابراین، جز برای مورد خاص  $s=0$ ، یک کیت متعلق به  $\mathcal{E}_s$  (یعنی یک تابع موج انتگرال‌پذیر مربعی) به تنهایی برای مشخص کردن حالت یک ذره کافی نیست. به عبارت دیگر، مشاهده‌پذیرهای  $X, Y, Z$  در فضای حالت  $\mathcal{E}$  ذره، مجموعه‌کاملی از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جایی تشکیل نمی‌دهند (برای  $P_x, P_y, P_z$  یا هر مجموعه‌کاملی از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جایی دیگر از  $\mathcal{E}_r$  نیز چنین است). همچنین حالت اسپین ذره را نیز باید بدانیم، یعنی، به مجموعه‌کاملی از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جایی متعلق به  $\mathcal{E}_s$ ، یک مجموعه‌کاملی از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جایی از

$\mathcal{E}_s$ ، که از مشاهده پذیرهای اسپین، مثلاً  $S^2$  و  $S_z$  (یا  $S_x$  و  $S_y$ )، ترکیب یافته است، بیفزاییم. هر حالت ذره، یک ترکیب خطی از بردارهایی است که حاصلضرب تانسوری یک کیت از  $\mathcal{E}_s$  و یک کیت از  $\mathcal{E}_s$  هستند (بخش ۹-۳ زیر که در پی می آید).

۴. الکترون، یک ذره با اسپین  $1/2$  است ( $s = 1/2$ ) و گشتاور مغناطیسی ذاتی آن با فرمول (۹-۳) داده می شود. بنابراین فضای  $\mathcal{E}_s$ ، برای الکترون، یک فضای دوبعدی است.

### یادداشتها:

۱. پروتون و نوترون، که اجزاء تشکیل دهنده هسته اند، نیز ذراتی با اسپین  $1/2$  می باشند، ولی نسبتهای ژیرومغناطیسی آنها با نسبت ژیرومغناطیسی الکترون متفاوت است. در حال حاضر از وجود ذراتی با اسپینهای  $0$ ،  $1/2$ ،  $1$ ،  $3/2$ ،  $2$ ، ... تا مقادیری بالاتر مانند  $11/2$  آگاهییم.

۲. برای توضیح وجود اسپین، می توانیم تصور کنیم که ذره ای مانند الکترون به جای اینکه یک نقطه باشد، دارای بعد فضایی است. در این صورت دوران الکترون حول خودش باعث ایجاد یک تکانه زاویه ای ذاتی می شود. اما، توجه به این نکته مهم است، که برای توصیف یک ساختار پیچیده تر از نقطه مادی، به بیش از سه متغیر مکانی نیاز داریم. اگر، به عنوان مثال، الکترون مانند یک جسم صلب رفتار می کرد، شش متغیر لازم می بود: سه مختصه برای مشخص کردن یکی از نقاط آن، مانند گرانیکاه، یک بار و برای همیشه، و سه زاویه که جهت آنرا در فضا تعیین کنند. نظریه ای که در اینجا بررسی می کنیم کاملاً متفاوت است. این نظریه، به نقطه ای انگاشتن الکترون ادامه خواهد داد (مکان آن با سه مختصه مشخص می شود). تکانه زاویه ای اسپین از هیچ متغیر مکانی یا تکانه ای به دست نمی آید.<sup>۱</sup> بنابراین، اسپین هیچ مانسته کلاسیکی ندارد. ■

## ۹-۲ خواص ویژه تکانه زاویه ای $1/2$

از این به بعد مطالعه خود را به مورد الکترون، که ذره ای با اسپین  $1/2$  است، محدود خواهیم کرد. از فصلهای قبل می دانیم که چگونه با متغیرهای مداری آن رفتار کنیم. اکنون می خواهیم درجات آزادی اسپین آنرا دقیقتر بررسی کنیم.

فضای حالت اسپین  $\mathcal{E}_s$  فضایی دوبعدی است. سیستم راست هنجار  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$  متشکل از ویژه کتهای مشترک  $S^2$  و  $S_z$  را که در معادلات زیر صدق می کنند، به عنوان پایه در نظر می گیریم

$$\begin{cases} S^2|\pm\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\pm\rangle & (۹-۷الف) \\ S_z|\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|\pm\rangle & (۹-۷ب) \end{cases}$$

۱. به علاوه اگر چنین بود، لزوماً یک عدد صحیح می بود.

$$\begin{cases} \langle +|- \rangle = 0 & (الف ۸-۹) \\ \langle +|+ \rangle = \langle -|- \rangle = 1 & (ب ۸-۹) \end{cases}$$

$$|+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -| = 1 \quad (۹-۹)$$

عمومی‌ترین حالت اسپین توسط یک بردار دلخواه از فضای  $\mathcal{E}_s$  توصیف می‌شود

$$|\chi\rangle = c_+|+\rangle + c_-|-\rangle \quad (۱۰-۹)$$

که در آن  $c_+$  و  $c_-$  اعدادی مختلط‌اند. طبق (الف ۷-۹) تمام کتهای متعلق به  $\mathcal{E}_s$ ، ویژه بردارهای  $S^z$  با ویژه مقدار یکسان  $3\hbar^2/4$  هستند، که باعث می‌شود  $S^z$  با عملگر همانی فضای  $\mathcal{E}_s$  متناسب باشد

$$S^z = \frac{3}{4}\hbar^2 I \quad (۱۱-۹)$$

چون،  $S$ ، بنا به تعریف تکانه زاویه‌ای است، کلیه خواص عمومی به دست آمده در بخش ۳-۶ از فصل ۶ را داراست. اثر عملگرهای

$$S_{\pm} = S_x \pm iS_y \quad (۱۲-۹)$$

بر روی بردارهای پایه،  $|+\rangle$  و  $|-\rangle$ ، با قرار دادن  $j = s = 1/2$  در فرمولهای کلی از فصل ۶ به دست می‌آید

$$S_+|+\rangle = 0 \quad S_+|-\rangle = \hbar|+\rangle \quad (الف ۱۳-۹)$$

$$S_-|+\rangle = \hbar|-\rangle \quad S_-|-\rangle = 0 \quad (ب ۱۳-۹)$$

هر عملگر را که در فضای  $\mathcal{E}_s$  عمل می‌کند، می‌توان، در پایه  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ ، با یک ماتریس  $2 \times 2$  نمایش داد. بخصوص، با استفاده از (الف ۷-۹) و (ب ۱۳-۹)، ماتریسهای متناظر با  $S_x$ ،  $S_y$  و  $S_z$  به صورت زیرند

$$(S) = \frac{\hbar}{2}\sigma \quad (۱۴-۹)$$

که در آن،  $\sigma$  معرف مجموعه سه ماتریس پاؤلی است

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (۱۵-۹)$$

همچنین، ماتریسهای پاؤلی دارای خواص زیرند، که می‌توان به سادگی آنها را با استفاده از شکل صریح (۱۵-۹) اثبات کرد (همچنین، مکمل ۱ از فصل ۴)

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1 \quad (۱۶-۹ \text{ الف})$$

$$\sigma_x \sigma_y + \sigma_y \sigma_x = 0 \quad (۱۶-۹ \text{ ب})$$

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i \sigma_z \quad (۱۶-۹ \text{ ج})$$

$$\sigma_x \sigma_y = i \sigma_z \quad (۱۶-۹ \text{ د})$$

به سه فرمول آخر، می‌بایست فرمولهایی را که از تبدیل دوره‌ای شاخصهای  $x$ ،  $y$ ، و  $z$  به دست می‌آیند، بیفزاییم. همچنین از (۱۵-۹) نتیجه می‌شود که

$$\text{Tr } \sigma_x = \text{Tr } \sigma_y = \text{Tr } \sigma_z = 0 \quad (۱۷-۹ \text{ الف})$$

$$\text{Det } \sigma_x = \text{Det } \sigma_y = \text{Det } \sigma_z = -1 \quad (۱۷-۹ \text{ ب})$$

به علاوه هر ماتریس  $2 \times 2$  را می‌توان به صورت یک ترکیب خطی از سه ماتریس پاؤلی و ماتریس یکه، با ضرایب مختلط، نوشت. این امر، ناشی از آن است که یک ماتریس  $2 \times 2$  فقط چهار عنصر دارد. بالاخره، به سادگی می‌توان اتحاد زیر را به دست آورد (مکمل ۱ از فصل ۴)

$$(\sigma \cdot A)(\sigma \cdot B) = A \cdot B + i\sigma \cdot (A \times B) \quad (۱۸-۹)$$

که  $A$  و  $B$  دو بردار دلخواه، یا دو عملگر برداری‌اند که سه مؤلفه آنها با مؤلفه‌های  $S$  جابه‌جا می‌شوند، اگر  $A$  و  $B$  با یکدیگر جابه‌جا نشوند، باز هم اتحاد فوق به شرطی که ترتیب قرار گرفتن  $A$  و  $B$  در دو طرف رابطه یکی باشد، برقرار است.

عملگرهای وابسته به اسپین الکترون، تمام خواصی را که مستقیماً از نظریه عمومی تکانه زاویه‌ای نتیجه می‌شوند، دارا هستند. به علاوه، این عملگر دارای بعضی خواص ویژه دیگر، در

ارتباط با مقدار بخصوص  $s$  (یعنی، مقدار بخصوص  $z$ )، که کوچکترین مقدار ممکن (به استثناء صفر) است، نیز هستند. این خواص ویژه را می‌توان مستقیماً از (۹-۱۴) و (۹-۱۶) به دست آورد

$$S_x^2 = S_y^2 = S_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} \quad (۹-۱۹ \text{ الف})$$

$$S_x S_y + S_y S_x = 0 \quad (۹-۱۹ \text{ ب})$$

$$S_x S_y = \frac{i}{2} \hbar S_z \quad (۹-۱۹ \text{ ج})$$

$$S_+^2 = S_-^2 = 0 \quad (۹-۱۹ \text{ د})$$

### ۹-۳ توصیف غیرنسبیتی یک

#### ذره با اسپین ۱/۲

اکنون می‌دانیم که چگونه به طور مجزا درجه‌های آزادی خارجی (مداری) و داخلی (اسپین) الکترون را توصیف کنیم. در این بخش، می‌خواهیم این مفاهیم متفاوت را در یک فرمولبندی به طور یکدست ادغام کنیم.

### ۹-۳-۱ مشاهده‌پذیرها و بردارهای حالت

#### الف) فضای حالت

وقتی تمام درجه‌های آزادی الکترون به حساب آیند. حالت کوانتومی یک الکترون توسط یک کیت متعلق به فضای  $\mathcal{E}$  مشخص می‌شود که حاصلضرب تانسوری  $\mathcal{E}_s$  و  $\mathcal{E}_r$  است (بخش ۲-۱). بر طبق روش توضیح داده شده در بند ۲-۱b از فصل دوم، هر دو عملگری که ابتدا در  $\mathcal{E}_r$  تعریف شده‌اند و عملگرهایی که در ابتدا در  $\mathcal{E}_s$  اثر کرده‌اند را، در  $\mathcal{E}$  بسط می‌دهیم (ما به استفاده از همان نماد که برای عملگرها استفاده می‌کردیم برای این عملگرهای بسط داده شده ادامه خواهیم داد). بنابراین یک مجموعه کامل از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاپذیر یا (مکمچ) در  $\mathcal{E}_r$  به دست می‌آوریم که از روی هم‌افتادگی یک مجموعه کامل از این مشاهده‌پذیرها از  $\mathcal{E}_s$ ، و یکی از  $\mathcal{E}_s$  تشکیل می‌شود. به عنوان مثال، در  $\mathcal{E}_s$  می‌توانیم  $S^2$  و  $S_z$  را (یا  $S^2$  و هر مؤلفه از  $S$ ) در نظر بگیریم. در  $\mathcal{E}_r$ ، می‌توانیم  $\{X, Y, Z\}$  یا  $\{P_x, P_y, P_z\}$  را انتخاب کنیم، یا اگر  $H$  معرف هامیلتونی وابسته به یک پتانسیل مرکزی،  $\{H, L^2, L_z\}$ ، و غیره باشد، انتخاب شود. از روی آن

می‌توان مجموعه کامل از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاپذیر متفاوت در  $\mathcal{E}_r$  نتیجه گرفت:

$$\{X, Y, Z, S^z, S_z\} \quad (۹-۲۰ الف)$$

$$\{P_x, P_y, P_z, S^z, S_z\} \quad (۹-۲۰ ب)$$

$$\{H, L^z, L_z, S^z, S_z\} \quad (۹-۲۰ ج)$$

و غیره. چون تمام کتهای  $\mathcal{E}$  ویژه‌بردارهای  $S^z$  با یک ویژه‌مقدار می‌باشند [فرمول (۹-۱۱)], می‌توانیم  $S^z$  را از مجموعه‌های مشاهده‌پذیرها حذف کرد.

حال می‌خواهیم در اینجا از اولین این مجموعه کامل از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاپذیر استفاده کنیم (۹-۲۰ الف). به‌عنوان پایه‌ای از  $\mathcal{E}_r$ ، مجموعه بردارهای به‌دست آمده از ضرب تانسوری کتهای  $|r\rangle \equiv |x, y, z\rangle$  از  $\mathcal{E}_r$  و کتهای  $|\varepsilon\rangle$  از  $\mathcal{E}_s$ ، استفاده می‌کنیم:

$$|r, \varepsilon\rangle \equiv |x, y, z, \varepsilon\rangle = |r\rangle \otimes |\varepsilon\rangle \quad (۹-۲۱)$$

که مؤلفه‌های  $x, y, z$  از بردار  $r$ ، می‌توانند از  $-\infty$  تا  $+\infty$  تغییر کنند (نمایه‌های پیوسته)، و  $\varepsilon$  برابر است با  $+$  یا  $-$  (نمایه منفصل). بنا به تعریف،  $|r, \varepsilon\rangle$  یک ویژه‌بردار مشترک در  $S^z, Z, Y, X, S^z$  و  $S_z$  است:

$$X|r, \varepsilon\rangle = x|r, \varepsilon\rangle$$

$$Y|r, \varepsilon\rangle = y|r, \varepsilon\rangle$$

$$Z|r, \varepsilon\rangle = z|r, \varepsilon\rangle$$

$$S^z|r, \varepsilon\rangle = \frac{\hbar}{2}|r, \varepsilon\rangle$$

$$S_z|r, \varepsilon\rangle = \varepsilon \frac{\hbar}{2}|r, \varepsilon\rangle \quad (۹-۲۲)$$

هر کت  $|r, \varepsilon\rangle$  در حد یک عامل ثابت، یکه می‌باشد، زیرا  $X, Y, Z, S^z$ ، و  $S_z$  تشکیل یک مجموعه کامل از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاپذیر (کمپج) می‌دهند. دستگاه  $\{|r, \varepsilon\rangle\}$  راست‌هنجارند (به مفهوم بسط داده شده). زیرا مجموعه‌های  $\{|r\rangle\}$  و  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$  هر کدام به‌ترتیب در  $\mathcal{E}_r$  و  $\mathcal{E}_s$  راست‌هنجارند

$$\langle r', \varepsilon' | r, \varepsilon \rangle = \delta_{\varepsilon' \varepsilon} \delta(r' - r) \quad (۹-۲۳)$$

$\delta_{\varepsilon'\varepsilon}$  بسته به اینکه  $\varepsilon'$  و  $\varepsilon$  یکسان یا متفاوت باشند برابر ۱ یا ۰ است. بالاخره، در رابطه بستاری در  $\mathcal{E}$  صادق است:

$$\sum_{\varepsilon} \int d^3r |\mathbf{r}, \varepsilon\rangle \langle \mathbf{r}, \varepsilon| = \int d^3r |\mathbf{r}, +\rangle \langle \mathbf{r}, +| + \int d^3r |\mathbf{r}, -\rangle \langle \mathbf{r}, -| = 1 \quad (24-9)$$

ب) نمایش  $\{|\mathbf{r}, \varepsilon\rangle\}$

۱. بردارهای حالت

هر حالت از فضای  $\mathcal{E}$  می‌تواند در پایه  $\{|\mathbf{r}, \varepsilon\rangle\}$  بسط داده شود. برای این منظور، کافی است از رابطه بستاری (۲۴-۹) استفاده کنیم:

$$|\psi\rangle = \sum_{\varepsilon} \int d^3r |\mathbf{r}, \varepsilon\rangle \langle \mathbf{r}, \varepsilon|\psi\rangle \quad (25-9)$$

پس بردار  $|\psi\rangle$  می‌تواند توسط مجموعه مختصاتش در پایه  $\{|\mathbf{r}, \varepsilon\rangle\}$  نمایش داده شود، یعنی توسط اعداد:

$$\langle \mathbf{r}, \varepsilon|\psi\rangle = \psi_{\varepsilon}(\mathbf{r}) \quad (26-9)$$

که بستگی به سه نمایه  $x, y, z$  (یا مختصراً  $\mathbf{r}$ ) و نمایه منفصل  $\varepsilon$  (+ یا -) دارد. برای مشخص کردن کامل حالت یک الکترون، بنابراین، لازم است که دو تابع از متغیرهای فضایی  $x, y, z$  و  $\varepsilon$  را مشخص کنیم:

$$\begin{aligned} \psi_{+}(\mathbf{r}) &= \langle \mathbf{r}, +|\psi\rangle \\ \psi_{-}(\mathbf{r}) &= \langle \mathbf{r}, -|\psi\rangle \end{aligned} \quad (27-9)$$

این دو تابع اغلب به شکل یک اسپینور دومولفه‌ای نوشته می‌شوند که به صورت  $[\psi](\mathbf{r})$  خواهیم نوشت:

$$[\psi](\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_{+}(\mathbf{r}) \\ \psi_{-}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (28-9)$$

برای  $|\psi\rangle$  وابسته به کت  $|\psi\rangle$  توسط الحاق (۹-۲۵) داده می‌شود

$$\langle\psi| = \sum_{\epsilon} \int d^3r \langle\psi|\mathbf{r}, \epsilon\rangle \langle\mathbf{r}, \epsilon| \quad (۹-۲۹)$$

یعنی با احتساب (۹-۲۶)

$$\langle\psi| = \sum_{\epsilon} \int d^3r \psi_{\epsilon}^*(\mathbf{r}) \langle\mathbf{r}, \epsilon| \quad (۹-۳۰)$$

بنابراین، "برای"  $|\psi\rangle$  با دو تابع  $\psi_{+}^*(\mathbf{r})$  و  $\psi_{-}^*(\mathbf{r})$  نمایش داده می‌شود، که می‌توان آن را به شکل اسپینوری که الحاقی (۹-۲۸) است، نوشت

$$[\psi]^{\dagger}(\mathbf{r}) = (\psi_{+}^*(\mathbf{r}) \quad \psi_{-}^*(\mathbf{r})) \quad (۹-۳۱)$$

با این قرارداد، حاصلضرب زده‌ای دو بردار حالت  $|\psi\rangle$  و  $|\varphi\rangle$  را، که مطابق (۹-۲۴) برابر است با

$$\begin{aligned} \langle\psi|\varphi\rangle &= \sum_{\epsilon} \int d^3r \langle\psi|\mathbf{r}, \epsilon\rangle \langle\mathbf{r}, \epsilon|\varphi\rangle \\ &= \int d^3r [\psi_{+}^*(\mathbf{r})\varphi_{+}(\mathbf{r}) + \psi_{-}^*(\mathbf{r})\varphi_{-}(\mathbf{r})] \end{aligned} \quad (۹-۳۲)$$

می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \int d^3r [\psi]^{\dagger}(\mathbf{r})[\varphi](\mathbf{r}) \quad (۹-۳۳)$$

این فرمول خیلی شبیه به فرمولی است که محاسبه حاصلضرب زده‌ای دو کت متعلق به  $\mathcal{E}_r$  را از تابع موجهای متناظر ممکن می‌ساخت. ولی توجه به این نکته حائز اهمیت است که در اینجا می‌بایست عمل ضرب ماتریسی اسپینورهای  $[\psi]^{\dagger}(\mathbf{r})$  و  $[\psi](\mathbf{r})$ ، بر انتگرال‌گیری فضایی مقدم باشد. مخصوصاً، بهنجارش بردار  $|\psi\rangle$  به صورت زیر بیان می‌شود

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int d^3r [\psi]^{\dagger}(\mathbf{r})[\psi](\mathbf{r}) = \int d^3r [|\psi_{+}(\mathbf{r})|^2 + |\psi_{-}(\mathbf{r})|^2] = 1 \quad (۹-۳۴)$$

در میان بردارهای متعلق به  $\mathcal{E}_r$ ، بعضیها حاصلضرب تانسوری یک کت از  $\mathcal{E}_r$  و یک کت از  $\mathcal{E}_r$  اند (مثلاً، در مورد بردارهای پایه این چنین است). اگر بردار حالت مورد نظر از نوع زیر باشد

$$|\psi\rangle = |\varphi\rangle \otimes |x\rangle \quad (۹-۳۵)$$



که در آن

$$|\varphi\rangle = \int d^3r \varphi(\mathbf{r}) |\mathbf{r}\rangle \in \mathcal{E}_r$$

$$|\chi\rangle = c_+|+\rangle + c_-|-\rangle \in \mathcal{E}_s \quad (۳۶-۹)$$

اسپینور وابسته به آن، شکل ساده زیر را خواهد داشت

$$[\psi](\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \varphi(\mathbf{r})c_+ \\ \varphi(\mathbf{r})c_- \end{pmatrix} = \varphi(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} \quad (۳۷-۹)$$

این رابطه، از تعریف حاصلضرب نرده‌ای در فضای  $\mathcal{E}$  نتیجه می‌شود، و در این مورد داریم

$$\psi_+(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}, + | \psi \rangle = \langle \mathbf{r} | \varphi \rangle \langle + | \chi \rangle = \varphi(\mathbf{r})c_+ \quad (الف ۳۸-۹)$$

$$\psi_-(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}, - | \psi \rangle = \langle \mathbf{r} | \varphi \rangle \langle - | \chi \rangle = \varphi(\mathbf{r})c_- \quad (ب ۳۸-۹)$$

به این ترتیب، مربع هنج  $|\psi\rangle$  از رابطه زیر به دست می‌آید

$$\langle \psi | \psi \rangle = \langle \varphi | \varphi \rangle \langle \chi | \chi \rangle = (|c_+|^2 + |c_-|^2) \int d^3r |\varphi(\mathbf{r})|^2 \quad (۳۹-۹)$$

## ۲. عملگرها

فرض کنید  $|\psi'\rangle$  کتی باشد که از عمل یک عملگر خطی  $A$  روی کت  $|\psi\rangle$  از فضای  $\mathcal{E}$  به دست می‌آید. مطابق نتایج بخش پیش،  $|\psi'\rangle$  و  $|\psi\rangle$  را می‌توان با اسپینورهای دو مؤلفه‌ای  $[\psi'](\mathbf{r})$  و  $[\psi](\mathbf{r})$  نمایش داد. می‌خواهیم نشان بدهیم که می‌توان به  $A$  یک ماتریس  $2 \times 2$ ، به صورت  $[[A]]$ ، نسبت داد، به طوری که داشته باشیم

$$[\psi'](\mathbf{r}) = [[A]][\psi](\mathbf{r}) \quad (۴۰-۹)$$

که در حالت کلی، عناصر ماتریسی به صورت عملگرهای دیفرانسیلی نسبت به متغیر  $\mathbf{r}$  باقی می‌مانند.

۱. عملگرهای اسپینی: این عملگرها ابتدا در فضای  $\mathcal{E}_s$  تعریف شدند. در نتیجه، فقط روی

شاخص  $\varepsilon$  بردارهای پایه  $|\mathbf{r}, \varepsilon\rangle$  عمل می‌کنند، و شکل ماتریسی آنها همان است که در بخش ۹-۲

بیان شد. در اینجا به ذکر یک مثال اکتفا می‌کنیم و، مثلاً، عملگر  $S_+$  را در نظر می‌گیریم: عمل  $S_+$  روی یک بردار  $|\psi\rangle$  که نظیر (۲۵-۹) بسط داده شده است، به بردار

$$|\psi'\rangle = \hbar \int d^3r \psi_-(\mathbf{r}) |\mathbf{r}, +\rangle \quad (۴۱-۹)$$

منتهی می‌شود، زیرا  $S_+$  تمام کتهای  $|\mathbf{r}, +\rangle$  را نابود و  $|\mathbf{r}, -\rangle$  را به  $\hbar |\mathbf{r}, +\rangle$  تبدیل می‌کند. بنا به (۴۱-۹)، مؤلفه‌های  $|\psi'\rangle$  در پایه  $\{|\mathbf{r}, \varepsilon\rangle\}$  عبارت‌اند از

$$\langle \mathbf{r}, + | \psi' \rangle = \psi'_+(\mathbf{r}) = \hbar \psi_-(\mathbf{r})$$

$$\langle \mathbf{r}, - | \psi' \rangle = \psi'_-(\mathbf{r}) = 0 \quad (۴۲-۹)$$

بنابراین، اسپینور معرف  $|\psi'\rangle$  عبارت است از

$$[\psi'](\mathbf{r}) = \hbar \begin{pmatrix} \psi_-(\mathbf{r}) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (۴۳-۹)$$

این در واقع همان چیزی است که از ضرب ماتریسی اسپینور  $[\psi](\mathbf{r})$  در

$$[S_+] = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} (\sigma_x + i\sigma_y) = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (۴۴-۹)$$

به‌دست می‌آید.

۲. عملگرهای مداری: برخلاف عملگرهای اسپینی، این عملگرها همیشه شاخص  $\varepsilon$  از بردار پایه  $|\mathbf{r}, \varepsilon\rangle$  را بدون تغییر باقی می‌گذارند: ماتریسهای  $2 \times 2$  وابسته به آنها همواره با ماتریس یک‌ه متناظر است. از طرف دیگر، این عملگرها درست به همان صورت که روی تابع‌موجهای معمولی عمل می‌کنند، روی قسمت وابسته به  $\mathbf{r}$  اسپینورها نیز عمل می‌کنند. مثلاً، کتهای  $|\psi'\rangle = X|\psi\rangle$  و  $|\psi''\rangle = P_x|\psi\rangle$  را در نظر بگیرید. مؤلفه‌های آنها در پایه  $\{|\mathbf{r}, \varepsilon\rangle\}$  به‌ترتیب عبارت‌اند از

$$\psi'_\varepsilon(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}, \varepsilon | X | \psi \rangle = x \psi_\varepsilon(\mathbf{r}) \quad (\text{الف } ۴۵-۹)$$

$$\psi''_\varepsilon(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}, \varepsilon | P_x | \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi_\varepsilon(\mathbf{r}) \quad (\text{ب } ۴۵-۹)$$

بنابراین، اسپینورهای  $[\psi'](\mathbf{r})$  و  $[\psi''](\mathbf{r})$  از  $[\psi](\mathbf{r})$  به وسیله ماتریسهای  $2 \times 2$

$$[[X]] = \begin{pmatrix} x & 0 \\ 0 & x \end{pmatrix} \quad (۹-۴۶\text{الف})$$

$$[[P_x]] = \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix} \quad (۹-۴۶\text{ب})$$

به دست می‌آیند.

۳. عملگرهای آمیخته: عمومی‌ترین عملگری که در فضای  $\mathcal{E}$  عمل می‌کند، در نمادگذاری ماتریسی با یک ماتریس  $2 \times 2$  که عناصر آن عملگرهای دیفرانسیلی نسبت به متغیر  $\mathbf{r}$  هستند، نمایش داده می‌شود. مثل

$$[[L_z S_z]] = \frac{\hbar}{\gamma} \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{pmatrix} \quad (۹-۴۷)$$

یا

$$[[\mathbf{S} \cdot \mathbf{P}]] = \frac{\hbar}{\gamma} (\sigma_x P_x + \sigma_y P_y + \sigma_z P_z) = \frac{\hbar^2}{\gamma i} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial z} & \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} & -\frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \quad (۹-۴۸)$$

یادداشتها:

۱. نمایش اسپینوری  $\{|\mathbf{r}, \epsilon\rangle\}$ ، مانسته نمایش  $\{|\mathbf{r}\rangle\}$  از  $\mathcal{E}_r$  است. عنصر ماتریسی،  $\langle \psi | A | \varphi \rangle$  هر عملگر  $A$  از  $\mathcal{E}$  با فرمول زیر داده می‌شود

$$\langle \psi | A | \varphi \rangle = \int d^3 r [\psi]^\dagger(\mathbf{r}) [[A]] [\varphi](\mathbf{r}) \quad (۹-۴۹)$$

که  $[[A]]$  معرف یک ماتریس  $2 \times 2$  است که نشان‌دهنده عملگر  $A$  است (ابتدا ضربهای ماتریسی را انجام می‌دهیم و سپس روی تمام فضا انتگرال می‌گیریم). این نمایش را تنها زمانی به کار خواهیم

برد که استدلالها و محاسبه‌ها را ساده کند: همان‌گونه که در  $\mathcal{E}_r$ ، خود بردارها و عملگرها را به‌کار می‌بریم، در این حالت نیز حتی الامکان چنین خواهیم کرد.

۲. بدیهی است که یک نمایش  $\{|\mathbf{p}, \varepsilon\rangle\}$  نیز وجود دارد که بردارهای پایه آن، ویژه‌بردارهای مشترک مجموعه کامل مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاپذیر  $\{P_x, P_y, P_z, S^2, S_z\}$  هستند. از تعریف حاصلضرب در فضای  $\mathcal{E}$  داریم

$$\langle \mathbf{r}, \varepsilon | \mathbf{p}, \varepsilon' \rangle = \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle \langle \varepsilon | \varepsilon' \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \delta_{\varepsilon\varepsilon'} \quad (50-9)$$

در نمایش  $\{|\mathbf{p}, \varepsilon\rangle\}$ ، به هر بردار  $|\psi\rangle$  از فضای  $\mathcal{E}$ ، یک اسپینور دو مؤلفه‌ای به صورت زیر، نسبت می‌دهیم

$$[\bar{\psi}](\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \bar{\psi}_+(\mathbf{p}) \\ \bar{\psi}_-(\mathbf{p}) \end{pmatrix} \quad (51-9)$$

که در آن

$$\bar{\psi}_+(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p}, + | \psi \rangle$$

$$\bar{\psi}_-(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p}, - | \psi \rangle \quad (52-9)$$

مطابق (50-9)،  $\bar{\psi}_+(\mathbf{p})$  و  $\bar{\psi}_-(\mathbf{p})$  تبدیلهای فوریۀ  $\psi_+(\mathbf{r})$  و  $\psi_-(\mathbf{r})$  می‌باشند

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_\varepsilon(\mathbf{p}) &= \langle \mathbf{p}, \varepsilon | \psi \rangle = \sum_{\varepsilon'} \int d^3r \langle \mathbf{p}, \varepsilon | \mathbf{r}, \varepsilon' \rangle \langle \mathbf{r}, \varepsilon' | \psi \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \psi_\varepsilon(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (53-9)$$

عملگرها، باز هم توسط ماتریسهای  $2 \times 2$  نمایش داده می‌شوند، و آنهایی که وابسته به عملگرهای اسپینی هستند به همان صورتی که در نمایش  $\{|\mathbf{r}, \varepsilon\rangle\}$  بودند، باقی می‌مانند. ■

### ۹-۳-۲ محاسبات احتمالی برای یک اندازه‌گیری فیزیکی

با استفاده از فرمولها و روابطی که در بالا تشریح کردیم، می‌توانیم اصول موضوع فصل ۳ را به‌کار ببریم تا درباره اندازه‌گیریهی گوناگونی که انجام آنها بر روی الکترون میسر است، پیش‌بینیهایی را به‌دست آوریم.

ابتدا تعبیر احتمالی مؤلفه‌های  $\psi_+(\mathbf{r})$  و  $\psi_-(\mathbf{r})$  از  $|\psi\rangle$  را که فرض می‌کنیم بهنجار باشد در نظر می‌گیریم. [فرمول (۹-۳۴)]. فرض کنید که می‌خواهیم مکان الکترون و مؤلفه اسپین آن در امتداد  $Oz$  را، همزمان اندازه بگیریم. چون  $X, Y, Z$ ، و  $S_z$  مجموعه کاملی از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاپذیر تشکیل می‌دهند، فقط یک بردار حالت وجود دارد که با یک نتیجه معین  $x, y, z$  و  $\pm \hbar/2$  متناظر است. احتمال  $d^3\mathcal{P}(\mathbf{r}, +)$  برای یافتن الکترون در یک حجم بینهایت کوچک  $d^3r$  در حوالی نقطه  $\mathbf{r}(x, y, z)$  و با اسپین "بالا" (یعنی مؤلفه اسپین در امتداد  $Oz$  برابر با  $+\hbar/2$ ) برابر است با

$$d^3\mathcal{P}(\mathbf{r}, +) = |\langle \mathbf{r}, + | \psi \rangle|^2 d^3r = |\psi_+(\mathbf{r})|^2 d^3r \quad (۵۴-۹)$$

به همین طریق مقدار

$$d^3\mathcal{P}(\mathbf{r}, -) = |\langle \mathbf{r}, - | \psi \rangle|^2 d^3r = |\psi_-(\mathbf{r})|^2 d^3r \quad (۵۵-۹)$$

برابر است با احتمال یافتن الکترون در همان حجم ولی با اسپین "پایین" (یعنی مؤلفه اسپین در امتداد  $Oz$  برابر با  $-\hbar/2$ ).

اگر بخواهیم همزمان با مکان ذره، مؤلفه اسپین آن را در امتداد  $Ox$  اندازه بگیریم، آنچه لازم است انجام دهیم این است که فرمولهای (۲۰-۷) از فصل ۴ را به‌کار ببریم. عملگرهای  $X, Y, Z$ ، و  $S_z$  نیز مجموعه کاملی از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاپذیر تشکیل می‌دهند؛ یعنی به نتیجه اندازه‌گیری  $\{x, y, z, \pm \hbar/2\}$ ، یک بردار حالت وابسته است

$$|\mathbf{r}\rangle_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\mathbf{r}, +\rangle \pm |\mathbf{r}, -\rangle] \quad (۵۶-۹)$$

به این ترتیب، احتمال یافتن الکترون در حجم  $d^3r$  در حوالی نقطه  $\mathbf{r}$ ، با اسپین در جهت مثبت محور  $Ox$ ، برابر است با

$$d^3r \times \left| \frac{1}{\sqrt{2}}[\langle \mathbf{r}, + | \psi \rangle + \langle \mathbf{r}, - | \psi \rangle] \right|^2 = \frac{1}{2} |\psi_+(\mathbf{r}) + \psi_-(\mathbf{r})|^2 d^3r \quad (۵۷-۹)$$

بدیهی است که می‌توان به جای مکان الکترون، تکانه آن را اندازه گرفت. در این صورت، مؤلفه‌های  $|\psi\rangle$  را نسبت به بردارهای  $|\mathbf{p}, \varepsilon\rangle$  [یادداشت (۲) از فصل ۱]، یعنی تبدیلهای فوری  $\bar{\psi}_{\pm}(\mathbf{p})$

مربوط به  $\psi_{\pm}(\mathbf{r})$  را، به کار می‌بریم. احتمال  $d^3\mathcal{P}(\mathbf{p}, \pm)$  برای اینکه تکانه الکترون با تقریب  $d^3p$  برابر با  $\mathbf{p}$ ، و مؤلفه اسپین در امتداد  $Oz$  برابر با  $\pm\hbar/2$  باشد، با رابطه زیر داده می‌شود

$$d^3\mathcal{P}(\mathbf{p}, \pm) = |\langle \mathbf{p}, \pm | \psi \rangle|^2 d^3p = |\bar{\psi}_{\pm}(\mathbf{p})|^2 d^3p \quad (58-9)$$

اندازه‌گیری‌های مختلفی که تاکنون بررسی کرده‌ایم، همگی از این جهت که هر کدام به مجموعه کاملی از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاپذیر مربوط‌اند "کامل" اند. برای "اندازه‌گیری‌های ناکامل"، چندین حالت متعامد، مربوط به یک نتیجه‌اند، و لازم است که مربعهای مدولهای "دامنه احتمال" های مربوط را با هم جمع کنیم.

مثلاً اگر نخواهیم اسپین الکترون را اندازه بگیریم، احتمال  $d^3\mathcal{P}(\mathbf{r})$  برای یافتن الکترون در حجم  $d^3r$  در حوالی نقطه  $\mathbf{r}$ ، برابر است با

$$d^3\mathcal{P}(\mathbf{r}) = [|\psi_+(\mathbf{r})|^2 + |\psi_-(\mathbf{r})|^2] d^3r \quad (59-9)$$

زیرا دو بردار حالت متعامد  $|\mathbf{r}, +\rangle$  و  $|\mathbf{r}, -\rangle$ ، مربوط به نتیجه  $\{x, y, z\}$  هستند، و دامنه‌های احتمال مربوط به آنها  $\psi_+(\mathbf{r})$  و  $\psi_-(\mathbf{r})$  است.

بالاخره، احتمال  $\mathcal{P}_+$  را برای اینکه مؤلفه اسپین در امتداد  $Oz$  برابر با  $+\hbar/2$  باشد محاسبه می‌کنیم (در این مورد، به دنبال اندازه‌گیری متغیرهای مداری نیستیم). تعداد بینهایت حالت متعامد وجود دارند، مثلاً تمام حالت‌های  $|\mathbf{r}, -\rangle$  با  $\mathbf{r}$ های دلخواه، که مربوط به این نتیجه اندازه‌گیری‌اند. بنابراین، باید مربعهای مدولهای دامنه‌های  $\psi_+(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}, + | \psi \rangle$  را روی تمام مقادیر ممکن  $\mathbf{r}$  جمع بزنیم

$$\mathcal{P}_+ = \int d^3r |\psi_+(\mathbf{r})|^2 \quad (60-9)$$

البته اگر به جای مؤلفه اسپین در امتداد  $Oz$ ، مؤلفه آن در امتداد  $Ox$  مورد نظر باشد، نتیجه (57-8) را روی تمام فضا انتگرال می‌گیریم. این نظریه‌ها، نظریه‌هایی را که در بخش 4-2-2 از فصل 4 گفتیم، تعمیم می‌دهند. در آنجا، فقط مشاهده‌پذیرهای اسپینی را بررسی کردیم، زیرا متغیرهای مداری می‌توانستند به‌طور کلاسیک بررسی شوند.

مراجع برای مطالعه بیشتر

History of the discovery of spin and references to original articles: Jammer (4.8), §3-4.

Evidence of spin in atomic physics: Eisberg and Resnick (1.3), chap. 8; Born (11.4), chap. VI; kuhn (11.1), chap. III §§A.5, A.6 and F; see references of chapter IV relating to the Stern-Gerlach experiment.

The spin magnetic moment of the electron: Cagnac and Pebay-Peyroula (11.2), chap. XII; Crane (11.16).

The Dirac equation: Schiff (1.18), chap. 13; Messiah (1.17), chap. XX; Bjorken and Drell (2.6), chaps. 1 to 4.

The Lorentz group: Omnes (16.13), chap. 4; Bacry (10.31), chaps. 7 and 8.

Spin 1 particles: Messiah (1.17), §XIII.21.

## مکملهای فصل ۹

چندین مکمل درباره خواص اسپین  $1/2$ ، در آخر فصل ۴ وجود دارد. به همین جهت فصل ۹ تنها دارای دو مکمل است.

---

۱. عملگرهای دوران برای ذره‌ای با اسپین  $1/2$   
۱. دنباله مکمل ۲ از فصل ۶ است. در این قسمت، رابطه بین تکانه زاویه‌ای اسپین  $1/2$  و دورانهای هندسی این اسپین به طور مفصل مطالعه می‌شود. قسمتهای نسبتاً مشکل را می‌توان در دور اول مطالعه کرد.

---

۲. تمرینات  
۲. تمرین ۴ به تفصیل حل شده است. در این مسئله، قطبش یک باریکه ذرات با اسپین  $1/2$  راکه در اثر بازتاب از یک ماده فرومغناطیسی آهنربایی شده، ایجاد می‌شود، مورد مطالعه قرار می‌دهیم. در واقع، از این روش در چند آزمایش استفاده می‌شود.

---



# مکمل ۱

## عملگرهای دوران برای ذره‌ای با اسپین $1/2$

۱. عملگرهای دوران در فضای حالت

الف) تکانه زاویه‌ای کل

ب) تجزیه عملگرهای دوران به حاصلضربهای تانسوری

۲. دوران حالت‌های اسپین

الف) محاسبه مستقیم عملگرهای دوران در  $\mathbb{C}^2$

ب) عملگر وابسته به یک دوران  $2\pi$

ج) رابطه میان ماهیت برداری S و رفتار یک حالت اسپین در اثر دوران

۳. دوران اسپینورهای دومؤلفه‌ای

می‌خواهیم ایده‌هایی را که درباره دوران در مکمل ۲ از فصل ۶ مطرح کردیم، در مورد ذره‌ای با اسپین  $1/2$  به‌کار ببریم. ابتدا، شکل عملگرهای دوران را در این مورد، مطالعه می‌کنیم. سپس رفتار کت معرف حالت ذره و اسپینور دومؤلفه‌ای وابسته به آنرا، تحت دوران بررسی خواهیم کرد.

## ۱. عملگرهای دوران در فضای حالت

الف) تکانه زاویه‌ای کل

یک ذره با اسپین  $1/2$  دارای یک تکانه زاویه‌ای مداری  $L$  و یک تکانه زاویه‌ای اسپینی  $S$  است. طبیعی است که تکانه زاویه‌ای کل این ذره را به‌صورت مجموع این دو تکانه زاویه‌ای تعریف کنیم

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (1)$$

این تعریف، به‌وضوح با بررسی‌های کلی بحث شده در مکمل ۲ از فصل ۶ سازگار است. این، تضمین می‌کند که نه تنها  $R$  و  $P$  بلکه  $S$  نیز یک مشاهده‌پذیر برداری است. (برای تحقیق در درستی این نکته، کافی است جابه‌جاگرهای بین مؤلفه‌های این مشاهده‌پذیرها و مؤلفه‌های  $J$  را محاسبه کنیم؛ بخش ۵-۶ ج از فصل ۶ مکمل ۲).

ب) تجزیه عملگرهای دوران به حاصلضربهای تانسوری

در فضای حالت ذره مورد نظر، عملگر دوران  $R_u(\alpha)$  وابسته به دوران هندسی  $\mathcal{R}_u(\alpha)$  به اندازه زاویه  $\alpha$  حول بردار یکه  $u$  وابسته است (بخش ۴ از مکمل ۲ از فصل ۶)

$$R_u(\alpha) = e^{-i/\hbar \alpha \mathbf{J} \cdot \mathbf{u}} \quad (2)$$

که  $\mathbf{J}$  همان تکانه زاویه‌ای کل (۱) است.

چون  $\mathbf{L}$  فقط در فضای  $\mathcal{E}_r$ ، و  $\mathbf{S}$  فقط در فضای  $\mathcal{E}_s$  عمل می‌کند (که بخصوص می‌رساند، که تمام مؤلفه‌های  $\mathbf{L}$  با تمام مؤلفه‌های  $\mathbf{S}$  جابه‌جا می‌شوند)، می‌توانیم  $R_u(\alpha)$  را به صورت یک حاصلضرب تانسوری بنویسیم

$$R_u(\alpha) = {}^{(r)}R_u(\alpha) \otimes {}^{(s)}R_u(\alpha) \quad (3)$$

که در آن

$${}^{(r)}R_u(\alpha) = e^{-i/\hbar \alpha \mathbf{L} \cdot \mathbf{u}} \quad (4)$$

و

$${}^{(s)}R_u(\alpha) = e^{-i/\hbar \alpha \mathbf{S} \cdot \mathbf{u}} \quad (5)$$

بدین ترتیب، عملگرهای دوران وابسته به  $\mathcal{R}_u(\alpha)$  در  $\mathcal{E}_r$  و  $\mathcal{E}_s$  هستند. در نتیجه، اگر دوران  $\mathcal{R}_u(\alpha)$  را روی ذره‌ای با اسپین  $1/2$ ، تشکیل دهیم، که حالتش با کیتی به صورت حاصلضرب تانسوری زیر باشد

$$|\psi\rangle = |\varphi\rangle \otimes |\chi\rangle \quad (6)$$

که در آن

$$|\varphi\rangle \in \mathcal{E}_r$$

$$|\chi\rangle \in \mathcal{E}_s \quad (7)$$

حالت بعد از دوران آن به صورت زیر خواهد بود

$$|\psi'\rangle = R_u(\alpha)|\psi\rangle = [{}^{(r)}R_u(\alpha)|\varphi\rangle] \otimes [{}^{(s)}R_u(\alpha)|\chi\rangle] \quad (۸)$$

بنابراین، دوران، در حالت اسپین ذره نیز اثر خواهد گذاشت. این چیزی است که می‌خواهیم آن را در بخش ۲ به تفصیل مطالعه کنیم.

## ۲. دوران حالت‌های اسپین

قبلاً عملگرهای دوران  $R^{(r)}$  در فضای  $\mathcal{E}_r$  را بررسی کردیم (بخش ۳ از مکمل ۲ از فصل ۶). در اینجا، عملگرهای  $R^{(s)}$  که در فضای حالت اسپین  $\mathcal{E}_s$  عمل می‌کنند، مورد نظر ما هستند.

الف) محاسبه مستقیم عملگرهای دوران در  $\mathcal{E}_s$

مانند فصل ۹، قرار می‌دهیم

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \quad (۹)$$

می‌خواهیم عملگر زیر را محاسبه کنیم

$${}^{(s)}R_u(\alpha) = e^{-i/\hbar \alpha \mathbf{S} \cdot \mathbf{u}} = e^{-i\alpha/2 \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u}} \quad (۱۰)$$

برای این کار، از تعریف نمایی یک عملگر استفاده می‌کنیم

$$\begin{aligned} {}^{(s)}R_u(\alpha) &= 1 - \frac{i\alpha}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u} + \frac{1}{2!} \left(-i\frac{\alpha}{2}\right)^2 (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u})^2 \\ &+ \dots + \frac{1}{n!} \left(-i\frac{\alpha}{2}\right)^n (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u})^n + \dots \end{aligned} \quad (۱۱)$$

حال، با به‌کار بردن اتحاد (۹-۱۸) از فصل ۹، داریم

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u})^2 = \mathbf{u}^2 = 1 \quad (۱۲)$$

که منجر می‌شود به

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u})^n = \begin{cases} 1 & \text{وقتی } n \text{ زوج باشد,} \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u} & \text{وقتی } n \text{ فرد باشد,} \end{cases} \quad (13)$$

در نتیجه، اگر جملات زوج و فرد را به ترتیب دسته‌بندی کنیم، بسط (۱۱) را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned} {}^{(S)}R_{\mathbf{u}}(\alpha) &= \left[ 1 - \frac{1}{2!} \left(\frac{\alpha}{2}\right)^2 + \dots + \frac{(-1)^p}{(2p)!} \left(\frac{\alpha}{2}\right)^{2p} + \dots \right] \\ &\quad - i \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u} \left[ \frac{\alpha}{2} - \frac{1}{3!} \left(\frac{\alpha}{2}\right)^3 + \dots + \frac{(-1)^p}{(2p+1)!} \left(\frac{\alpha}{2}\right)^{2p+1} + \dots \right] \end{aligned} \quad (14)$$

که بالاخره می‌رسیم به

$$\boxed{{}^{(S)}R_{\mathbf{u}}(\alpha) = \cos \frac{\alpha}{2} - i \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u} \sin \frac{\alpha}{2}} \quad (15)$$

با این شکل عملگر  ${}^{(S)}R$ ، به سادگی می‌توانیم عمل آن را روی هر حالت اسپین محاسبه کنیم. چون از قبل [فرمولهای (۹-۱۵)] از فصل ۹، ماتریسهای معرف  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  را می‌دانیم، با استفاده از فرمول بالا می‌توانیم شکل صریح ماتریس دوران  $R_{\mathbf{u}}^{(1/2)}(\alpha)$  را در پایه  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$  بنویسیم، در نتیجه خواهیم داشت

$$R_{\mathbf{u}}^{(1/2)}(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha}{2} - i u_z \sin \frac{\alpha}{2} & (-i u_x - u_y) \sin \frac{\alpha}{2} \\ (-i u_x + u_y) \sin \frac{\alpha}{2} & \cos \frac{\alpha}{2} + i u_z \sin \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} \quad (16)$$

که  $u_x, u_y, u_z$  مؤلفه‌های دکارتی بردار  $\mathbf{u}$  هستند.

(ب) عملگر وابسته به یک دوران  $2\pi$

اگر زاویه دوران  $\alpha$  را  $2\pi$  اختیار کنیم، بردار  $\mathbf{u}$  هر چه باشد، دوران هندسی  $R_{\mathbf{u}}(2\pi)$  بر دوران همانی منطبق خواهد شد. ولی، اگر در فرمول (۱۵) مقدار  $\alpha = 2\pi$  را قرار دهیم، ملاحظه می‌کنیم

$${}^{(S)}R_u(2\pi) = -1 \quad (17)$$

و حال آنکه

$${}^{(S)}R_u(0) = 1 \quad (18)$$

است. عملگر وابسته به دوران  $2\pi$ ، عملگر همانی نیست، بلکه منفی این عملگر است. بنابراین، از حیث تشابه دورانهای هندسی و عملگرهای دوران در فضای  $\mathcal{E}_s$ ، قانون گروه فقط به‌طور موضعی پایسته است (بحث ۲ از فصل ۶ یادداشت (۳) از قسمت ۳-۳-۳). این به‌خاطر مقدار نیمه‌صحیح تکانه زاویه‌ای اسپین ذره مورد نظر است.

این واقعیت که حالت اسپین بر اثر دورانی به‌اندازه  $2\pi$  تغییر علامت می‌دهد، نگران‌کننده نیست، زیرا دو بردار حالت که فقط در یک ضریب فاز کلی با یکدیگر اختلاف داشته باشند، دارای خواص فیزیکی یکسانی هستند. مهم‌تر آن است که چگونگی تبدیل یک مشاهده‌پذیر  $A$  در چنین دورانی را، بررسی کنیم. به‌سادگی می‌توان نشان داد که

$$A' = {}^{(S)}R_u(2\pi)A{}^{(S)}R_u^\dagger(2\pi) = A \quad (19)$$

این نتیجه، کاملاً منطقی است، زیرا یک دوران  $2\pi$  نمی‌تواند وسیله اندازه‌گیری وابسته به  $A$  را تغییر بدهد. در نتیجه، باید طیف  $A'$  با طیف  $A$  یکسان باقی بماند.

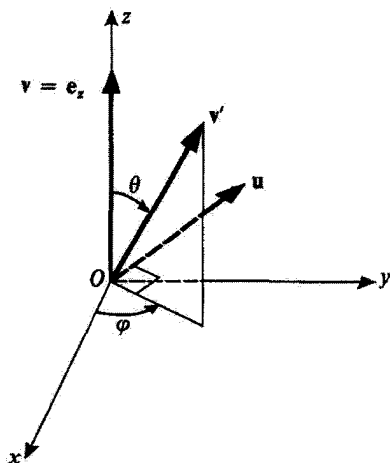
یادداشت:

در مکمل ۲ از فصل ۶ [یادداشت (۳) از قسمت ۳-۳-۳] نشان دادیم که

$${}^{(r)}R_u(2\pi) = 1 \quad (20)$$

در نتیجه، نظیر فضای  $\mathcal{E}_s$ ، در فضای حالت کلی  $\mathcal{E} = \mathcal{E}_r \otimes \mathcal{E}_s$  نیز داریم

$$R_u(2\pi) = {}^{(r)}R_u(2\pi) \otimes {}^{(S)}R_u(2\pi) = -1 \quad (21)$$



شکل ۱ دورانی به اندازه زاویه  $\theta$  حول  $u$  بردار  $v = e_z$  را به بردار یکه  $v'$  با زوایای قطبی  $\theta$  و  $\varphi$  تبدیل می‌کند.

ج) رابطه میان ماهیت برداری  $S$  و رفتار یک حالت اسپین در اثر دوران

یک حالت دلخواه اسپین  $|\chi\rangle$  را در نظر بگیرید. در فصل ۴ (بخش ۴-۲-۱-ج) نشان دادیم که باید زوایایی مانند  $\theta$  و  $\varphi$  وجود داشته باشند به طوری که  $|\chi\rangle$  را بتوان به صورت زیر نوشت (به استثناء یک ضریب فاز کلی، که هیچ معنای فیزیکی ندارد)

$$|\chi\rangle = e^{-i\varphi/2} \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle + e^{i\varphi/2} \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle \quad (22)$$

به این ترتیب،  $|\chi\rangle$  به صورت یک ویژه بردار وابسته به ویژه مقدار  $+\hbar/2$  متعلق به مؤلفه  $S \cdot v$  اسپین  $S$  در امتداد بردار یکه  $v$ ، که با زوایای قطبی  $\theta$  و  $\varphi$  تعریف می‌شود، درمی‌آید. حال،  $|\chi\rangle$  را به اندازه دلخواه دوران می‌دهیم. نتیجه تبدیل بردار  $v$  بر اثر این دوران را  $v'$  می‌نامیم. چون  $S$  یک مشاهده پذیر برداری است، حالت  $|\chi'\rangle$  می‌بایست، پس از دوران، ویژه بردار مؤلفه  $S \cdot v'$  (مؤلفه  $S$  در امتداد بردار یکه  $v'$ )، با ویژه مقدار  $+\hbar/2$ ، باشد (مکمل ۲ از فصل ۶، بخش ۵)

$$|\chi\rangle = |+\rangle_v \implies |\chi'\rangle = R|\chi\rangle \propto |+\rangle_{v'} \quad (23)$$

که

$$v' = Rv \quad (24)$$

با اثبات این مطلب در یک مورد خاص (شکل ۱)، صحت آن را می‌پذیریم. برای  $v$  بردار یکه  $e_z$  در امتداد محور  $Oz$ ، و برای  $v'$  بردار یکه دلخواهی با زوایای قطبی  $\theta$  و  $\varphi$ ، انتخاب می‌کنیم.  $v'$  از دوران  $v = e_z$

به اندازه زاویه  $\theta$  حول بردار یکه  $\mathbf{u}$ ، که با زوایای قطبی

$$\begin{aligned}\theta_u &= \frac{\pi}{4} \\ \varphi_u &= \varphi + \frac{\pi}{4}\end{aligned}\quad (25)$$

مشخص شده است، به دست می‌آید بنابراین باید نشان بدهیم که

$${}^{(S)}R_{\mathbf{u}}(\theta)|+\rangle \propto |+\rangle_{v'} \quad (26)$$

مؤلفه‌های دکارتی بردار  $\mathbf{u}$  عبارت‌اند از

$$\begin{aligned}u_x &= -\sin \varphi \\ u_y &= \cos \varphi \\ u_z &= 0\end{aligned}\quad (27)$$

بنابراین با استفاده از فرمول (۱۵)، عملگر  ${}^{(S)}R_{\mathbf{u}}(\theta)$  را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned}{}^{(S)}R_{\mathbf{u}}(\theta) &= \cos \frac{\theta}{4} - i\sigma \cdot \mathbf{u} \sin \frac{\theta}{4} \\ &= \cos \frac{\theta}{4} - i(-\sigma_x \sin \varphi + \sigma_y \cos \varphi) \sin \frac{\theta}{4} \\ &= \cos \frac{\theta}{4} - \frac{1}{4}(\sigma_+ e^{-i\varphi} - \sigma_- e^{i\varphi}) \sin \frac{\theta}{4}\end{aligned}\quad (28)$$

که در آن

$$\sigma_{\pm} = \sigma_x \pm i\sigma_y \quad (29)$$

اکنون می‌دانیم که [فرمولهای (۹-۱۳) از فصل ۹]

$$\begin{aligned}\sigma_+|+\rangle &= 0 \\ \sigma_-|+\rangle &= 2|-\rangle\end{aligned}\quad (30)$$

بنابراین، نتیجه تبدیل کت  $|+\rangle$  بر اثر اعمال عملگر  ${}^{(S)}R_{\mathbf{u}}(\theta)$  عبارت است از

$${}^{(S)}R_{\mathbf{u}}(\theta)|+\rangle = \cos \frac{\theta}{4}|+\rangle + e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{4}|-\rangle \quad (31)$$

با تقریب یک ضریب فاز، کت  $|+\rangle_{v'}$  را پیدا می‌کنیم [فرمول (۲۲)]

$${}^{(S)}R_{\mathbf{u}}(\theta)|+\rangle = e^{i\varphi/2}|+\rangle_{v'} \quad (32)$$

## ۳. دوران اسپینورهای دو مؤلفه‌ای

اکنون آماده‌ایم تا رفتار کلی یک ذره با اسپین  $1/2$  را بر اثر دوران مطالعه کنیم. یعنی، اینک هر دو درجه آزادی خارجی و داخلی آن را به حساب خواهیم آورد.

ذره‌ای با اسپین  $1/2$  را در نظر بگیرید که حالت آن توسط کت  $|\psi\rangle$  از فضای حالت  $\mathcal{E} = \mathcal{E}_r \otimes \mathcal{E}_s$  نشان داده می‌شود. کت  $|\psi\rangle$  را می‌توان توسط اسپینور  $[\psi](\mathbf{r})$ ، با مؤلفه‌های زیر، نمایش داد

$$\psi_\varepsilon(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}, \varepsilon | \psi \rangle \quad (33)$$

اگر یک دوران هندسی دلخواه  $\mathcal{R}$  روی این ذره انجام دهیم، حالت آن به صورت زیر تبدیل خواهد شد

$$|\psi'\rangle = R|\psi\rangle \quad (34)$$

که در آن

$$R = {}^{(r)}R \otimes {}^{(s)}R \quad (35)$$

عملگر وابسته، به دوران هندسی  $\mathcal{R}$  در فضای  $\mathcal{E}$  است. چگونه اسپینور  $[\psi'](\mathbf{r})$ ، که وابسته به حالت  $|\psi'\rangle$  است از  $[\psi](\mathbf{r})$  به دست می‌آید؟

برای جواب دادن به این سؤال، مؤلفه‌های  $\psi'_\varepsilon(\mathbf{r})$  متعلق به  $[\psi']$  را می‌نویسیم

$$\psi'_\varepsilon(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}, \varepsilon | \psi' \rangle = \langle \mathbf{r}, \varepsilon | R | \psi \rangle \quad (36)$$

می‌توانیم مؤلفه‌های  $[\psi](\mathbf{r})$  را با قرار دادن رابطه بستاری نسبت به پایه  $\{|\mathbf{r}', \varepsilon'\rangle\}$  بین  $R$  و  $|\psi\rangle$  به دست بیاوریم

$$\psi'_\varepsilon(\mathbf{r}) = \sum_{\varepsilon'} \int d^3 r' \langle \mathbf{r}, \varepsilon | R | \mathbf{r}', \varepsilon' \rangle \langle \mathbf{r}', \varepsilon' | \psi \rangle \quad (37)$$

حال، چون بردارهای متعلق به پایه  $\{|\mathbf{r}, \varepsilon\rangle\}$ ، حاصلضربهای تانسوری هستند، می‌توان عناصر ماتریسی عملگر  $R$  در این پایه را به صورت زیر تجزیه کرد

$$\langle \mathbf{r}, \varepsilon | R | \mathbf{r}', \varepsilon' \rangle = \langle \mathbf{r} | {}^{(r)}R | \mathbf{r}' \rangle \langle \varepsilon | {}^{(s)}R | \varepsilon' \rangle \quad (38)$$



از قبل می‌دانیم که [مکمل ۲ از فصل ۶، فرمول (۲۶)]

$$\langle \mathbf{r} |^{(r)} R | \mathbf{r}' \rangle = \langle \mathcal{R}^{-1} \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle = \delta | \mathbf{r}' - (\mathcal{R}^{-1} \mathbf{r}) | \quad (39)$$

در نتیجه با جایگذاری

$$\langle \varepsilon |^{(S)} R | \varepsilon' \rangle = R_{\varepsilon \varepsilon'}^{(1/2)} \quad (40)$$

فرمول (۳۷) را بالاخره می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\boxed{\psi'_{\varepsilon}(\mathbf{r}) = \sum_{\varepsilon'} R_{\varepsilon \varepsilon'}^{(1/2)} \psi_{\varepsilon'}(\mathcal{R}^{-1} \mathbf{r})} \quad (41)$$

یعنی، به طور صریح

$$\begin{pmatrix} \psi'_{+}(\mathbf{r}) \\ \psi'_{-}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{++}^{(1/2)} & R_{+-}^{(1/2)} \\ R_{-+}^{(1/2)} & R_{--}^{(1/2)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{+}(\mathcal{R}^{-1} \mathbf{r}) \\ \psi_{-}(\mathcal{R}^{-1} \mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (42)$$

بنابراین نتیجه می‌شود: هر مؤلفه اسپینور جدید  $[\psi']$  در نقطه  $\mathbf{r}$  ترکیبی خطی است از دو مؤلفه اسپینور اولیه  $[\psi]$ ، که در نقطه  $\mathcal{R}^{-1} \mathbf{r}$ ، (یعنی، در نقطه‌ای که  $\mathbf{r}$  تصویر دورانی آن است) محاسبه شده است. <sup>۱</sup> ضرایب این ترکیبات خطی، عناصر ماتریس  $2 \times 2$  می‌عرف  $R^{(s)}$  در پایه  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$  متعلق به  $\mathcal{C}_0$  هستند [فرمول (۱۶)].

### مراجع و پیشنهادها برای مطالعه بیشتر

Feynman III (1.2), chap. 6; chap. 18, §18-4 and added note 1; Messiah (1.17), App. C; Edmonds (2.21), chap. 4.

Rotation groups and SU (2): Bacrý (10.31), chap. 6; Wigner (2.23), chap. 15; Meijer and Bauer (2.18), chap. 5.

Experiments dealing with rotations of a spin 1/2: article by Werner et al. (11.18).

۱. به مانستگی نزدیک این رفتار و رفتار یک میدان برداری در اثر دوران، توجه کنید.

## مکمل ۲

### تمرینات

۱. ذره‌ای با اسپین  $1/2$  را در نظر بگیرید. اسپین آن را  $S$ ، تکانه زاویه‌ای مداری آن را  $L$  و بردار حالت آن را  $|\psi\rangle$  بنامید. دو تابع  $\psi_+(r)$  و  $\psi_-(r)$  به صورت زیر تعریف می‌شوند

$$\psi_{\pm}(r) = \langle r, \pm | \psi \rangle$$

فرض کنید که

$$\psi_+(r) = R(r) \left[ Y_0^0(\theta, \varphi) + \frac{1}{\sqrt{3}} Y_1^0(\theta, \varphi) \right]$$

$$\psi_-(r) = \frac{R(r)}{\sqrt{3}} \left[ Y_1^1(\theta, \varphi) - Y_1^0(\theta, \varphi) \right]$$

که  $r$ ،  $\theta$  و  $\varphi$  مختصات ذره و  $R(r)$  یک تابع معلوم از  $r$  است.

الف)  $R(r)$  در چه شرطی باید صدق کند تا  $|\psi\rangle$  بهنجار باشد؟

ب) وقتی که ذره در حالت  $|\psi\rangle$  است،  $S_z$  اندازه‌گیری می‌شود. چه نتایجی و با چه احتمالی می‌توان به دست آورد؟ به همین سؤال در مورد  $L_z$  و سپس  $S_x$  جواب دهید.

ج) وقتی که ذره در حالت  $|\psi\rangle$  بوده است، نتیجه یک اندازه‌گیری  $L^2$  صفر شده است. درست بعد از این اندازه‌گیری، ذره در چه حالتی قرار دارد؟ به همین سؤال، وقتی که نتیجه اندازه‌گیری  $L^2$  برابر با  $2\hbar^2$  باشد، جواب دهید.

۲. ذره‌ای با اسپین  $1/2$  را در نظر بگیرید.  $S$  و  $P$ ، معرف مشاهده‌پذیرهای وابسته به تکانه و

اسپین این ذره‌اند. پایه‌های راست‌هنجار  $\{|p_x, p_y, p_z, \pm\rangle$  از ویژه‌بردارهای مشترک  $P_x, P_y, P_z$  و  $S_z$  (که ویژه‌مقدارهای آنها به ترتیب  $p_x, p_y, p_x$  و  $\pm\hbar/2$  است) را به عنوان پایه‌های فضای حالت انتخاب می‌کنیم

می‌خواهیم معادله ویژه‌مقدار عملگر  $A$  را که به صورت

$$A = S \cdot P$$

تعریف می‌شود، حل کنیم.

الف) آیا  $A$  هرمیتی است؟

ب) نشان بدهید که پایه‌ای از ویژه بردارهای  $A$  وجود دارد که ویژه بردارهای  $P_x$ ،  $P_y$  و  $P_z$  نیز هستند. در زیر فضایی که توسط کتهای  $\pm |p_x, p_y, p_z\rangle$  پدید می‌آید،  $p_x$  و  $p_y$  ثابت‌اند، ماتریس معرف  $A$  چیست؟

ج) ویژه مقدارهای  $A$  و درجه واگنی آنها را پیدا کنید. سیستمی از ویژه بردارهای مشترک بین  $A$  و  $P_x$ ،  $P_y$  و  $P_z$  پیدا کنید.

### ۳. هامیلتونی پاؤلی

هامیلتونی الکترونی به جرم  $m$  بار  $q$  و اسپین  $\hbar/2 \sigma(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  و  $\sigma_x$ ،  $\sigma_y$  و  $\sigma_z$  ماتریسهای پاؤلی‌اند) واقع در یک میدان الکترومغناطیسی، که با پتانسیل برداری  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  و پتانسیل اسکالر  $U(\mathbf{r}, t)$  توصیف می‌شود، به صورت زیر نوشته می‌شود

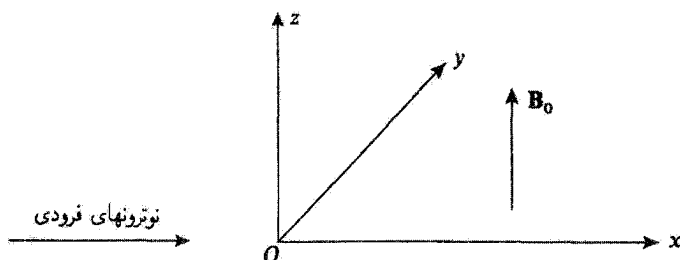
$$H = \frac{1}{2m} [\mathbf{P} - q\mathbf{A}(\mathbf{R}, t)]^2 + qU(\mathbf{R}, t) - \frac{q\hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{R}, t)$$

جمله آخر معرف برهم‌کنش گشتاور مغناطیسی اسپین  $\frac{q\hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma}$  و میدان مغناطیسی  $\mathbf{B}(\mathbf{R}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{R}, t)$  است.

با استفاده از خواص ماتریسهای پاؤلی، نشان بدهید که، این هامیلتونی را می‌توان به صورت زیر نیز نوشت ("هامیلتونی پاؤلی")

$$H = \frac{1}{2m} \{ \boldsymbol{\sigma} \cdot [\mathbf{P} - q\mathbf{A}(\mathbf{R}, t)] \}^2 + qU(\mathbf{R}, t)$$

۴. می‌خواهیم، بازتاب باریکه‌ای از نوترونهای تک انرژی را که به طور عمودی بر قطعه‌ای از یک ماده فرومغناطیسی فرود می‌آید مطالعه کنیم. جهت انتشار باریکه فرودی را محور  $Ox$  و صفحه  $yOz$  را سطح ماده فرومغناطیسی، که تمام ناحیه  $x > 0$  را پوشانده است، اختیار می‌کنیم (شکل را نگاه کنید). فرض کنید انرژی هر نوترون فرودی  $E$  و جرم آن  $m$  است. اسپین نوترونها برابر  $s = 1/2$  و گشتاور مغناطیسی شان برابر با  $\mathbf{M} = \gamma \mathbf{S}$  (نسبت ژیرومغناطیسی و  $\mathbf{S}$  عملگر اسپین است). می‌باشد.



انرژی پتانسیل نوترونها مجموع دو جمله است:

- جمله اول مربوط به برهم کنش با ماده است، که به طور پدیده شناختی، با یک پتانسیل  $V(x)$ ، که به صورت زیر تعریف می شود، نشان داده می شود

$$V(x) = 0 \quad \text{برای} \quad x \leq 0$$

$$V(x) = V_0 > 0 \quad \text{برای} \quad x > 0$$

- جمله دوم، متناظر است با برهم کنش گشتاور مغناطیسی هر نوترون با میدان مغناطیسی داخلی  $B_0$  ماده (فرض می شود که  $B_0$  یکنواخت و موازی  $Oz$  است) متناظر است. بنابراین داریم

$$W = 0 \quad \text{برای} \quad x \leq 0$$

$$W = \omega_0 S_z \quad \text{برای} \quad x > 0 \quad \text{با} \quad (\omega_0 = -\gamma B_0)$$

در این تمرین مطالعه خود را به مورد

$$0 < \frac{\hbar\omega_0}{2} < V_0$$

محدود می کنیم.

الف) حالت های مانای ذره را که به یک تکانه فرودی مثبت و اسپینی موازی یا پادموازی با محور  $Oz$  مربوط باشد، تعیین کنید.

ب) فرض می کنیم که  $V_0 - \hbar\omega_0/2 < E < V_0 + \hbar\omega_0/2$  و باریکه نوترونهاى فرودى، غیرقطبی است. درجه قطبش باریکه بازتابیده را محاسبه کنید. آیا می توانید کاربردى از این اثر را تصور کنید؟

ج) حال، یک حالت کلی را که در آن  $E$  دارای یک مقدار دلخواه مثبت است، در نظر بگیرید. اسپین نوترونهاى فرودى در جهت  $Ox$  است. جهت اسپین ذرات بازتابیده چگونه است (بسته به مقادیر نسبى  $E$  و  $V_0 \pm \hbar\omega_0/2$ ، سه حالت وجود دارد)؟

### حل تمرین ۴

الف) هامیلتونی  $H$  ذره عبارت است از

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(X) + W \quad (1)$$

$V(X)$ ، که تنها روی متغیرهای مدارى عمل می‌کند، با  $S_z$  جابه‌جا می‌شود. چون  $W$  نیز، متناسب با  $S_z$  است، با این عملگر جابه‌جا می‌شود. به علاوه،  $V(X)$  با  $P_y$  و  $P_z$  و نیز با  $W$  جابه‌جا می‌شود. (مسلماً، زیرا  $W$  فقط روی متغیرهای اسپین عمل می‌کند). بنابراین می‌توانیم پایه‌ای از ویژه‌بردارهای مشترک بین  $H$ ،  $S_z$ ،  $P_y$ ، و  $P_z$  پیدا کنیم، که به صورت زیر نوشته می‌شود

$$|\varphi_{E, p_y, p_z}^{\pm}\rangle = |\varphi_E^{\pm}\rangle \otimes |p_y\rangle \otimes |p_z\rangle \otimes |\pm\rangle \quad (2)$$

با

$$|\varphi_E^{\pm}\rangle \in \mathcal{O}_x$$

$$|p_y\rangle \in \mathcal{O}_y; P_y |p_y\rangle = p_y |p_y\rangle$$

$$|p_z\rangle \in \mathcal{O}_z; P_z |p_z\rangle = p_z |p_z\rangle$$

$$|\pm\rangle \in \mathcal{O}_s; S_z |\pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |\pm\rangle \quad (3)$$

که کت  $|\varphi_E^{\pm}\rangle$  جواب معادلهٔ ویژه‌مقدار زیر است

$$\left[ \frac{P_x^2}{2m} + V(X) + \frac{1}{2m}(p_y^2 + p_z^2) \pm \frac{\hbar\omega_0}{2} \right] |\varphi_E^{\pm}\rangle = E |\varphi_E^{\pm}\rangle \quad (4)$$

در صورت مسئله فرض می‌کنیم که باریکهٔ نوترون به طور عمودی می‌تابد، بنابراین،  $p_y = p_z = 0$ . فرض کنید  $\langle x | \varphi_E^{\pm} \rangle = \varphi_E^{\pm}(x)$ ، تابع موج وابسته به  $|\varphi_E^{\pm}\rangle$  باشد؛ این تابع موج در معادلهٔ زیر صدق می‌کند

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \pm \frac{\hbar\omega_0}{2} \right] \varphi_E^\pm(x) = E \varphi_E^\pm(x) \quad (5)$$

بنابراین، مسئله به یک مسئله "چاه مربعی" یک بعدی کلاسیک یعنی، بازتاب از یک "پتانسیل پله‌ای" (مکمل ۲) تبدیل می‌شود.

در ناحیه  $x < 0$ ،  $V(x)$  صفر و انرژی کل  $E$  (که مثبت است) از انرژی پتانسیل بیشتر است. می‌دانیم که در این مورد، تابع موج، برهم‌نهشی از توابع نمایی موهومی نوسانی است

$$\varphi_E^\pm(x) = A_\pm e^{ikx} + B_\pm e^{-ikx} \quad \text{داریم} \quad x < 0 \quad \text{اگر} \quad (6)$$

که در آن

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \quad (7)$$

$A_\pm$ ، دامنه موج وابسته به یک ذره فرودی است که دارای اسپینی موازی یا پادموازی با  $Oz$  است.  $B_\pm$  دامنه موج وابسته به ذره بازتابیده با همان دو جهت اسپین است.

در ناحیه  $x > 0$ ، مقدار  $V(x)$  برابر با  $V_0$  است و بسته به مقدار نسبی  $E$  و  $V_0 \pm \hbar\omega_0/2$  تابع موجها می‌توانند رفتاری به صورت توابع نمایی نوسانی یا میرا داشته باشند. ما، سه مورد را در نظر خواهیم گرفت:

۱. اگر  $E > V_0 + \hbar\omega_0/2$  باشد، قرار می‌دهیم

$$k'_\pm = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left( E - V_0 \mp \frac{\hbar\omega_0}{2} \right)} \quad (8)$$

و موج عبوری مانند یک تابع نمایی نوسانی رفتار می‌کند

$$\varphi_E^\pm(x) = C_\pm e^{ik'_\pm x} \quad \text{داریم} \quad x > 0 \quad \text{اگر} \quad (9)$$

به علاوه، شرایط پیوستگی تابع موج و مشتق آن ایجاب می‌کنند که [مکمل ۱، روابط (۱۳)، (۱۴)]

$$\frac{B_\pm}{A_\pm} = \frac{k - k'_\pm}{k + k'_\pm} \quad \text{و} \quad \frac{C_\pm}{A_\pm} = \frac{2k}{k + k'_\pm} \quad (10)$$

۲. از طرف دیگر، اگر  $E < V_0 - \hbar\omega_0/2$  باشد، کمیت‌های  $\rho_{\pm}$  را باید به صورت

$$\rho_{\pm} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left( V_0 \pm \frac{\hbar\omega_0}{2} - E \right)} \quad (11)$$

تعریف کنیم، و تابع موج در ناحیه  $x > 0$  یک تابع نمایی حقیقی میرا (موج میرا) است

$$\varphi_E^{\pm}(x) = D_{\pm} e^{-\rho_{\pm} x} \quad \text{اگر } x > 0 \text{ داریم} \quad (12)$$

در این مورد [مکمل ۲، معادلات (۲۲) و (۲۳)]

$$\frac{B_{\pm}}{A_{\pm}} = \frac{k - i\rho_{\pm}}{k + i\rho_{\pm}}; \quad \frac{D_{\pm}}{A_{\pm}} = \frac{2k}{k + i\rho_{\pm}} \quad (13)$$

۳. بالاخره، در حالت میانی  $V_0 - \hbar\omega_0/2 < E < V_0 + \hbar\omega_0/2$  داریم

$$\varphi_E^+(x) = D_+ e^{-\rho_+ x}, \quad x > 0 \text{ اگر} \quad (\text{الف } 14)$$

$$\varphi_E^-(x) = C_- e^{ik'_- x}, \quad x > 0 \text{ اگر} \quad (\text{ب } 14)$$

[تعریف‌های (۸) و (۱۱) برای  $\rho_+$  و  $k'_-$  هنوز معتبرند]. بسته به جهت اسپین، موج یا یک تابع نمایی میرا و یا یک تابع نمایی نوسانی است. به این ترتیب، داریم

$$\frac{B_+}{A_+} = \frac{k - i\rho_+}{k + i\rho_+}; \quad \frac{D_+}{A_+} = \frac{2k}{k + i\rho_+} \quad (\text{الف } 15)$$

$$\frac{B_-}{A_-} = \frac{k - k'_-}{k + k'_-}; \quad \frac{C_-}{A_-} = \frac{2k}{k + k'_-} \quad (\text{ب } 15)$$

ب) وقتی  $V_0 - \hbar\omega_0/2 < E < V_0 + \hbar\omega_0/2$  باشد، در وضعیت (ج) قرار دادیم. اگر

تصور اسپین نوترنهای فرودی روی  $Oz$  برابر  $\hbar/2$  باشد، ضریب بازتاب متناظر برابر است با

$$R_+ = \left| \frac{B_+}{A_+} \right|^2 = \left| \frac{k - i\rho_+}{k + i\rho_+} \right|^2 = 1 \quad (16)$$

از طرف دیگر، اگر تصویر اسپین روی  $Oz$  برابر با  $\hbar/2$  باشد، دیگر ضریب بازتاب، برابر با یک نیست، زیرا ضریب بازتاب می‌شود

$$R_- = \left| \frac{B_-}{A_-} \right|^2 = \left( \frac{k - k'_-}{k + k'_-} \right)^2 < 1 \quad (17)$$

بنابراین، ملاحظه می‌کنیم که چگونه باریکه بازتابیده می‌تواند قطبی باشد، زیرا نوترون، بسته به جهت اسپین آن، دارای احتمالهای متفاوتی برای بازتابیدن است. یک باریکه فرودی غیرقطبیده را می‌توان این‌طور در نظر گرفت که، از نوترونهایی تشکیل یافته است که اسپینهایشان با احتمال  $1/2$  در حالت  $|+\rangle$  و با احتمال  $1/2$  در حالت  $|-\rangle$  هستند. با در نظر گرفتن (۱۶) و (۱۷)، ملاحظه می‌کنیم احتمال اینکه اسپین ذره‌ای از باریکه بازتابیده در حالت  $|+\rangle$  باشد، برابر است با  $1/(1 + R_-)$ ، در حالی که این احتمال برای حالت  $|-\rangle$  برابر است با  $R_-/(1 + R_-)$ . بنابراین، درجه قطبیدگی باریکه بازتابیده عبارت است از

$$T = \frac{1 - R_-}{1 + R_-} = \frac{2kk'_-}{k^2 + k'^2} \quad (18)$$

در عمل، برای به دست آوردن باریکه‌های نوترونهای قطبیده در آزمایشگاه، بازتاب از یک ماده فرومغناطیسی اشباع شده را مورد استفاده قرار می‌دهیم. برای افزایش درجه قطبیدگی حاصل، باریکه را به‌طور مایل بر سطح آینه فرومغناطیسی می‌تابانیم؛ بنابراین، نتایجی که در اینجا به‌طور نظری به دست می‌آیند، مستقیماً قابل کاربرد نیستند. لیکن، اساس آزمایش یکی است. ماده فرومغناطیسی انتخابی، غالباً کبالت است. وقتی کبالت تا حد اشباع، مغناطیده می‌شود، درجات بالایی از قطبش  $T$  قابل حصول است ( $T \gtrsim 0.8$ ). به علاوه، توجه کنید که یک دستگاه بازتاب باریکه نوترون را می‌توان هم به‌عنوان یک "تجزیه‌گر" و هم به‌عنوان یک "قطبشگر" برای جهت‌های اسپین به‌کار برد. از این امکان، در اندازه‌گیرهای دقت گشتاور مغناطیسی نوترون استفاده شده است.

ج) نوترونی را که تکانه آن، به بزرگی  $p = \hbar k$  موازی محور  $Ox$  باشد در نظر بگیرید. فرض کنید، تصویر  $\langle S_x \rangle$  اسپین آن برابر با  $\hbar/2$  باشد. حالت این نوترون عبارت است از [فصل ۴ رابطه (۲۰)]

$$|\psi\rangle = |p\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}[|+\rangle + |-\rangle] \quad (19)$$



$$\langle r|p\rangle = \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^{3/2}} e^{ipx/\hbar} \quad (20)$$

چگونه می‌توانیم یک حالت مانای ذره را که در آن موج فرودی به شکل (۱۹) است، بنا کنیم؟ به‌سادگی، باید حالت

$$|\psi_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\varphi_{E,0,0}^+\rangle + |\varphi_{E,0,0}^-\rangle] \quad (21)$$

را در نظر بگیریم که یک ترکیب خطی از دو ویژه کت  $H$ ، تعریف شده در (۲)، وابسته به یک ویژه مقدار  $E = p^2/2m$  است. به‌این ترتیب، قسمتی از کت  $|\psi_S\rangle$  که موج بازتابی را بیان می‌کند عبارت است از

$$|-p\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} [B_+|+\rangle + B_-|-\rangle] \quad (22)$$

$B_-$  و  $B_+$  بسته به وضعیت مورد نظر، توسط (۱۰)، (۳) یا (۱۵) داده می‌شوند (به‌جای  $A_+$  و  $A_-$ ، مقدار ۱ قرار داده می‌شود). اکنون برای حالتی مانند (۲۲)، مقدار متوسط  $\langle S \rangle$  را حساب می‌کنیم. چون این حالت، یک حاصلضرب تانسوری است، متغیرهای اسپینی و متغیرهای مداری همیشه نیستند. بنابراین، به‌سادگی می‌توان  $\langle S \rangle$  را از بردار حالت اسپین  $(B_+|+\rangle + B_-|-\rangle)$  به‌دست آورد، که نتیجه می‌شود

$$\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \frac{B_+^* B_- + B_-^* B_+}{|B_+|^2 + |B_-|^2} \quad (\text{الف } 23)$$

$$\langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{2} \frac{i(B_-^* B_+ - B_+^* B_-)}{|B_+|^2 + |B_-|^2} \quad (\text{ب } 23)$$

$$\langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2} \frac{|B_+|^2 - |B_-|^2}{|B_+|^2 + |B_-|^2} \quad (\text{ج } 23)$$

به‌این ترتیب، سه مورد متمایز داریم:

۱. اگر  $E > V_0 + \hbar\omega_0/2$  باشد از (۱۰) مشاهده می‌شود که  $B_+$  و  $B_-$  حقیقی‌اند. فرمولهای (۲۳) نشان می‌دهد که  $\langle S_x \rangle$  و  $\langle S_z \rangle$  صفر نیستند بلکه  $\langle S_y \rangle = 0$  است. بنابراین، در اثر بازتاب، اسپین، دورانی حول  $Oy$  انجام داده است. از نظر فیزیکی، اختلاف بین درجات

بازتابهای نوترونهایی که اسپین آنها موازی با  $Oz$  و نوترونهایی که اسپینشان پادموازی با  $Oz$  است، بیان می‌کند که چرا مؤلفه  $\langle S_z \rangle$  مثبت می‌شود.

۲. اگر  $E < V_0 - \hbar\omega_0/2$  باشد، معادلات (۱۳) نشان می‌دهند که  $B_+$  و  $B_-$  حقیقی نیستند، بلکه دو عدد مختلط‌اند که فاز آنها متفاوت، ولی مدول آنها یکی است. بر طبق (۲۳)، در این حالت داریم،  $\langle S_z \rangle = 0$  اما  $\langle S_x \rangle \neq 0$  و  $\langle S_y \rangle \neq 0$ . بنابراین، اسپین، در اثر بازتاب، دورانی حول  $Oz$  انجام داده است. منشأ فیزیکی این دوران به شرح زیر است: به خاطر وجود موج میرا، نوترون مدت زمان معینی را در ناحیه  $x > 0$  می‌گذراند؛ حرکت تقدیمی لارمور حول  $B_0$  در خلال این مدت عامل دوران اسپین آن است.

۳. اگر  $V_0 - \hbar\omega_0/2 < E < V_0 + \hbar\omega_0/2$  باشد،  $B_+$  یک عدد مختلط و  $B_-$  یک عدد حقیقی است، و مدولها متفاوت است. به این ترتیب، هیچ‌یک از مؤلفه‌های  $\langle S_x \rangle$ ،  $\langle S_y \rangle$  یا  $\langle S_z \rangle$  صفر نیستند. دوران اسپین که در اثر بازتاب نوترون ایجاد می‌شود، توسط ترکیبی از آثار مورد اشاره در (الف) و (ب)، توضیح داده می‌شود.

۱۰

جمع تکانه‌های زاویه‌ای

۱-۱۰ مقدمه

۱-۱-۱۰ تکانه زاویه‌ای کل در مکانیک کلاسیک

۱-۱-۲۰ اهمیت تکانه زاویه‌ای کل در مکانیک کوانتومی

۲-۱۰ جمع دو اسپین  $1/2$ .

۱-۲-۱۰ بیان مسئله

روش مقدماتی

الف) فضای حالت

ب) اسپین کل  $S$ . روابط جابه‌جایی

ج) تغییر پایه

۱-۲-۲۰ ویژه‌مقدارهای  $S_z$  و درجات واگنی آنها

۱-۲-۳۰ قطری کردن  $S^2$

الف) محاسبه ماتریس معرف  $S^2$

ب) ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای  $S^2$

۱-۲-۴۰ نتایج: سه‌تایی و یکتایی

۳-۱۰ جمع دو تکانه زاویه‌ای

۱-۳-۱۰ مروری بر نظریه عمومی تکانه زاویه‌ای

دلخواه.

۱-۳-۲۰ بیان مسئله

روش عمومی

الف) فضای حالت

ب) تکانه زاویه‌ای کل. روابط جابه‌جایی

ج) تغییر پایه‌ای که باید انجام شود

۱-۳-۳۰ ویژه‌مقدارهای  $J^2$  و  $J_z$

الف) مورد خاص از دو اسپین  $1/2$

ب) ویژه‌مقدارهای  $J_z$  و درجه واگنی آنها

ج) ویژه‌مقدارهای  $J^2$

۱-۳-۴۰ ویژه‌بردارهای مشترک  $J^2$  و  $J_z$

الف) مورد خاص از دو اسپین  $1/2$

ب) حالت عمومی ( $J_1$  و  $J_2$  دلخواه)

ج) ضرایب کلیش گوردن

## ۱-۱۰ مقدمه

## ۱-۱-۱۰ تکانه زاویه‌ای کل در مکانیک کلاسیک

سیستمی متشکل از  $N$  ذره کلاسیکی را در نظر بگیرید. تکانه زاویه‌ای کل  $\mathcal{L}$  این سیستم نسبت به یک نقطه ثابت  $O$  برابر است با جمع برداری تکانه‌های زاویه‌ای تک تک این ذرات، نسبت به نقطه  $O$ .

$$\mathcal{L} = \sum_{i=1}^N \mathcal{L}_i \quad (1-10)$$

که در آن

$$\mathcal{L} = \mathbf{r}_i \times \mathbf{p}_i \quad (2-10)$$

مشق نسبت به زمان  $\mathcal{L}$  برابر با گشتاور نیروهای خارجی نسبت به  $O$  است. در نتیجه، وقتی نیروهای خارجی صفر باشند (سیستم منزوی)، یا تمام نیروها به سمت یک مرکز متوجه باشند، تکانه زاویه‌ای کل سیستم (نسبت به هر نقطه در مورد اول و نسبت به مرکز نیرو در مورد دوم) یک ثابت حرکت است. اگر نیروهای داخلی وجود داشته باشند، یعنی، اگر ذرات مختلف سیستم برهم‌کنش داشته باشند، مطلب فوق برای هر یک از تکانه‌های زاویه‌ای  $\mathcal{L}_i$  به تنهایی، صادق نیست.

این نکته را با ذکر یک مثال نشان می‌دهیم: سیستمی متشکل از دو ذره (۱) و (۲) را در نظر بگیرید که هر دو تحت تأثیر یک میدان نیروی مرکزی یکسان قرار دارند (که می‌تواند ناشی از ذره سوم باشد که آن قدر سنگین فرض می‌شود که در مبدأ بدون حرکت باقی بماند). اگر این دو ذره بر یکدیگر نیرویی وارد نکنند، تکانه‌های زاویه‌ای  $\mathcal{L}_1$  و  $\mathcal{L}_2$  آنها نسبت به مرکز نیروی  $O$ ، هر دو ثابت حرکت‌اند. در این صورت، تنها نیروی وارد بر مثلاً ذره (۱)، متوجه  $O$  است؛ بنابراین گشتاور آن نسبت به این نقطه، و نیز  $(d/dt)\mathcal{L}_1$ ، صفر خواهد بود. از طرف دیگر، اگر ذره (۱) تحت تأثیر نیروی دیگری ناشی از حضور ذره (۲)، نیز قرار داشته باشد، در حالت کلی، گشتاور این نیرو نسبت به  $O$  دیگر صفر نیست و در نتیجه  $\mathcal{L}_1$  یک ثابت حرکت نخواهد بود. ولی اگر برهم‌کنش بین دو ذره از اصل کنش و واکنش تبعیت کند، گشتاور نیروی وارد از (۱) بر (۲) نسبت به  $O$  دقیقاً گشتاور نیروی وارد از (۲) به (۱) را خنثی می‌کند: تکانه زاویه‌ای کل  $\mathcal{L}$  نسبت به زمان پایسته است.

بنابراین، در یک سیستم متشکل از ذرات برهم‌کنشی فقط تکانه زاویه‌ای کل، یک ثابت حرکت است: نیروهای داخل سیستم موجب انتقال تکانه زاویه‌ای از یک ذره به ذره دیگر می‌شوند. بنابراین، ملاحظه می‌کنیم که چرا مطالعه خواص تکانه زاویه‌ای کل حائز اهمیت است.

## ۱۰-۱-۲ اهمیت تکانه زاویه‌ای کل در مکانیک کوانتومی

اکنون، مثال پیش را از دیدگاه مکانیک کوانتومی بررسی می‌کنیم. در مورد دو ذره غیر برهم‌کنشی، هامیلتونی سیستم در نمایش  $\{|\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\rangle\}$  به‌سادگی به‌صورت زیر داده می‌شود

$$H_0 = H_1 + H_2 \quad (3-10)$$

که در آن

$$H_1 = -\frac{\hbar^2}{2\mu_1} \Delta_1 + V(r_1)$$

$$H_2 = -\frac{\hbar^2}{2\mu_2} \Delta_2 + V(r_2) \quad (4-10)$$

$\mu_1$  و  $\mu_2$  جرمهای دو ذره،  $V(r)$  پتانسیل مرکزی‌ای که این ذرات تحت تأثیر آن قرار دارند، و  $\Delta_1$  و  $\Delta_2$  به‌ترتیب عملگرهای لاپلاسی نسبت به مختصات ذرات (۱) و (۲) هستند. از فصل ۷ (بخش ۷-۱-۲-الف) می‌دانیم که سه مؤلفه عملگر  $L_1$  وابسته به تکانه زاویه‌ای  $L_1$  ذره (۱)، با  $H_1$  جابه‌جا می‌شوند

$$[L_1, H_1] = 0 \quad (5-10)$$

همچنین، تمام مشاهده‌پذیرهای مربوط به یکی از ذرات با کلیه مشاهده‌پذیرهای مربوط به ذره دیگر جابه‌جا می‌شوند، بخصوص

$$[L_1, H_2] = 0 \quad (6-10)$$

از (۵-۱۰) و (۶-۱۰) معلوم می‌شود که سه مؤلفه  $L_1$  ثابتهای حرکت‌اند. واضح است که استدلال مشابه، برای  $L_2$  نیز صادق است.

حالا فرض کنید که این دو ذره با یکدیگر برهم‌کنش کنند و انرژی پتانسیل مربوط،  $v(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$  فقط به فاصله میان آنها، یعنی فقط به  $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ ، بستگی داشته باشد،<sup>۱</sup> که در آن

$$|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2} \quad (7-10)$$

۱. در این صورت، نیروهای کلاسیک مربوطه الزاماً از اصل کنش و واکنش تبعیت می‌کنند.

در این صورت، هامیلتونی سیستم عبارت است از

$$H = H_1 + H_2 + v(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \quad (A-10)$$

که  $H_1$  و  $H_2$  از رابطه‌های (۴-۱۰) به دست می‌آیند. طبق (۵-۱۰) و (۶-۱۰)، جابه‌جاگر  $L_1$  با  $H$  به صورت زیر در می‌آید

$$[L_1, H] = [L_1, v(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)] \quad (9-10)$$

یعنی، مثلاً برای مؤلفه  $L_{1z}$  داریم

$$[L_{1z}, H] = [L_{1z}, v(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)] = \frac{\hbar}{i} \left( x_1 \frac{\partial v}{\partial y_1} - y_1 \frac{\partial v}{\partial x_1} \right) \quad (10-10)$$

عبارت (۱۰-۱۰) در حالت کلی صفر نیست:  $L_1$  دیگر ثابت حرکت نیست. از طرف دیگر، اگر عملگر تکانه زاویه‌ای کل  $L$  را توسط رابطه‌ای مشابه با (۱۰-۱۰) تعریف کنیم، یعنی

$$L = L_1 + L_2 \quad (11-10)$$

عملگری به دست می‌آید که سه مؤلفه آن ثابت حرکت‌اند. برای مثال، ملاحظه می‌کنیم که

$$[L_z, H] = [L_{1z} + L_{2z}, H] \quad (12-10)$$

طبق (۱۰-۱۰)، این جابه‌جاگر، برابر است با

$$\begin{aligned} [L_z, H] &= [L_{1z} + L_{2z}, H] \\ &= \frac{\hbar}{i} \left( x_1 \frac{\partial v}{\partial y_1} - y_1 \frac{\partial v}{\partial x_1} + x_2 \frac{\partial v}{\partial y_2} - y_2 \frac{\partial v}{\partial x_2} \right) \end{aligned} \quad (13-10)$$

اما، چون  $v$  فقط به  $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ ، که با رابطه (۷-۱۰) داده می‌شود، بستگی دارد، داریم

$$\frac{\partial v}{\partial x_1} = v' \frac{\partial |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}{\partial x_1} = v' \frac{x_1 - x_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (الف ۱۴-۱۰)$$

$$\frac{\partial v}{\partial x_2} = v' \frac{\partial |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}{\partial x_2} = v' \frac{x_2 - x_1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (ب ۱۴-۱۰)$$

و نیز عبارتهای مانسته‌ای برای  $\partial v / \partial y_1$ ,  $\partial v / \partial y_2$ ,  $\partial v / \partial z_1$ ,  $\partial v / \partial z_2$  و  $v'$  مشتق  $v$  است که به صورت تابعی از یک متغیر تنها در نظر گرفته شده است. با قرار دادن این مقادیر در (۱۰-۳) نتیجه می‌شود

$$[L_z, H] = \frac{\hbar}{i} \frac{v'}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \{x_1(y_1 - y_2) - y_1(x_1 - x_2) + x_2(y_2 - y_1) - y_2(x_2 - x_1)\} = 0 \quad (15-10)$$

بنابراین، به همان نتیجه مکانیک کلاسیک می‌رسیم.

تاکنون به طور ضمنی فرض کرده‌ایم که ذرات مورد مطالعه اسپین نداشته باشند. حالا می‌خواهیم یک مثال مهم دیگر را بررسی کنیم: و آن، یک تک ذره اسپیندار است. ابتدا فرض می‌کنیم که این ذره فقط تحت تأثیر یک پتانسیل مرکزی  $V(r)$  قرار داشته باشد. در این صورت، هامیلتونی آن همان هامیلتونی‌ای است که در بخش ۷-۱ از فصل ۷ دیدیم. می‌دانیم که سه مؤلفه تکانه زاویه‌ای مداری  $\mathbf{L}$  با این هامیلتونی جابه‌جا می‌شوند. به علاوه، چون عملگرهای اسپین با متغیرهای مداری جابه‌جا می‌شوند، سه مؤلفه اسپین  $\mathbf{S}$  نیز ثابتهای حرکت خواهند بود. اما در فصل ۱۲ خواهیم دید که تصحیحات نسبیتی، یک جمله جفت‌شدگی اسپین-مدار به صورت

$$H_{S_0} = \xi(r) \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad (16-10)$$

به هامیلتونی می‌افزاید، که در آن،  $\xi(r)$  یک تابع معلوم از متغیر  $r$  است (مفهوم فیزیکی این جفت‌شدگی در فصل ۱۲ تشریح خواهد شد). وقتی این جمله را به حساب بیاوریم، دیگر  $\mathbf{L}$  و  $\mathbf{S}$  با هامیلتونی کل جابه‌جا نمی‌شوند. مثلاً

$$\begin{aligned} [L_z, H_{S_0}] &= \xi(r) [L_z, L_x S_x + L_y S_y + L_z S_z] \\ &= \xi(r) (i\hbar L_y S_x - i\hbar L_x S_y) \end{aligned} \quad (17-10)$$

و همچنین

$$\begin{aligned} [S_z, H_{S_0}] &= \xi(r) [S_z, L_x S_x + L_y S_y + L_z S_z] \\ &= \xi(r) (i\hbar L_x S_y - i\hbar L_y S_x) \end{aligned} \quad (18-10)$$

۱. برای اثبات (۱۷-۱۰) و (۱۸-۱۰) از این واقعیت استفاده می‌شود که  $\mathbf{L}$ ، که تنها روی متغیرهای زاویه‌ای  $\theta$  و  $\varphi$  اثر می‌کند، با  $\xi(r)$  که فقط به  $r$  بستگی دارد جابه‌جا می‌شود.



ولی، اگر قرار دهیم

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (19-10)$$

سه مؤلفه  $\mathbf{J}$  ثابت حرکت اند. برای نشان دادن این مطلب، طرفین معادلات (۱۷-۱۰) و (۱۸-۱۰) را با هم جمع می‌کنیم

$$[J_z, H_{S_0}] = [L_z + S_z, H_{S_0}] = 0 \quad (20-10)$$

(برای سایر مؤلفه‌های  $\mathbf{J}$  نیز اثبات مانسته‌ای وجود دارد). به عملگر  $\mathbf{J}$  که توسط (۱۹-۱۰) تعریف می‌شود تکانه زاویه‌ای کل یک ذره اسپیندار می‌گویند.

در دو مورد اخیر، دو تکانه زاویه‌ای جزئی  $\mathbf{J}_1$  و  $\mathbf{J}_2$  داریم که با یکدیگر جابه‌جا می‌شوند. یک پایه فضای حالت می‌شناسیم که متشکل از ویژه‌بردارهای مشترک  $\mathbf{J}_1^2$ ،  $\mathbf{J}_2^2$ ،  $\mathbf{J}_1^z$ ،  $\mathbf{J}_2^z$  است. با این همه،  $\mathbf{J}_1$  و  $\mathbf{J}_2$  ثابت‌های حرکت نیستند، در حالی‌که مؤلفه‌های تکانه زاویه‌ای کل

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2 \quad (21-10)$$

با هامیلتونی سیستم جابه‌جا می‌شوند، بنابراین، سعی می‌کنیم با استفاده از پایه قبلی، پایه جدیدی متشکل از ویژه‌بردارهای  $\mathbf{J}^2$  و  $J_z$  بسازیم. بنابراین، مسئله‌ای که به‌طور کلی مطرح است جمع (یا تجزیه) دو تکانه زاویه‌ای  $\mathbf{J}_1$  و  $\mathbf{J}_2$  است.

اهمیت این پایه جدید، متشکل از ویژه‌بردارهای  $\mathbf{J}^2$  و  $J_z$ ، را به‌راحتی می‌شود فهمید. برای به‌دست آوردن حالت‌های مانای سیستم، یعنی، ویژه‌حالت‌های  $H$ ، آسانتر است که ماتریس معرف  $H$  در این پایه جدید را قطری کنیم. چون  $H$  با  $\mathbf{J}^2$  جابه‌جا می‌شود، این ماتریس را می‌توان به چند بلوک تقسیم کرد که تعداد آنها برابر با تعداد ویژه زیرفضاهای وابسته به مجموعه‌های مختلف ویژه‌مقدارهای  $\mathbf{J}^2$  و  $J_z$  است، (فصل ۲ بخش ۹-۳-D). ساختار این ماتریس به‌مراتب از ساختار ماتریس معرف  $H$  در پایه ویژه‌بردارهای مشترک  $\mathbf{J}_1^2$ ،  $\mathbf{J}_2^2$ ،  $\mathbf{J}_1^z$ ،  $\mathbf{J}_2^z$  ساده‌تر است، زیرا در حالت کلی هیچ‌یک از عملگرهای  $J_{1z}$  و  $J_{2z}$  با  $H$  جابه‌جا نمی‌شوند.

فعلاً مسئله قطری کردن  $H$  (چه به‌طور دقیق و چه به‌طور تقریبی) در پایه ویژه‌حالت‌های  $\mathbf{J}^2$  و  $J_z$  را کنار می‌گذاریم، و در عوض، توجه خود را به ساختن این پایه جدید از پایه متشکل از ویژه‌حالت‌های  $\mathbf{J}_1^2$ ،  $\mathbf{J}_2^2$ ،  $\mathbf{J}_1^z$ ،  $\mathbf{J}_2^z$  معطوف می‌کنیم. تعداد خاصی از کاربردهای فیزیکی (اتم‌های چندالکترونی، ساختار خطوط ریز و خیلی ریز، و غیره) را پس از مطالعه نظریه اختلال بررسی خواهیم کرد (مکمل‌های فصل ۱۰ و فصل ۱۲).

با بررسی مقدماتی از یک مورد ساده شروع می‌کنیم، که در آن، دو تکانه زاویه‌ای جزئی اسپین  $1/2$  با هم جمع می‌شوند (بخش ۱۰-۲). این کار به ما امکان خواهد داد، که قبل از بررسی جمع دو تکانه زاویه‌ای دلخواه، در بخش (۱۰-۳)، خود را با جنبه‌های مختلف مسئله آشنا سازیم.

## ۱۰-۲ جمع دو اسپین $1/2$ . روش مقدماتی

### ۱۰-۲-۱ بیان مسئله

سیستمی از دو ذره با اسپین  $1/2$  (مثلاً الکترون یا اتم نقره در حالت پایه) را در نظر می‌گیریم، و فقط به درجات آزادی اسپین آنها توجه می‌کنیم. فرض کنید که عملگرهای اسپین این دو ذره،  $S_1$  و  $S_2$  باشند.

### الف) فضای حالت

قبلاً فضای حالت چنین سیستمی را تعریف کرده‌ایم. به خاطر بیاورید که این فضا، یک فضای چهاربعدی است که از ضرب تانسوری فضاهای حالت دو ذره به دست می‌آید. یک پایه راست‌هنگار از این فضا را می‌شناسیم، که آن را با  $\{|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle\}$  نشان خواهیم داد، یعنی به‌طور صریح

$$\{|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle\} = \{|+, +\rangle, |+, -\rangle, |-, +\rangle, |-, -\rangle\} \quad (10-22)$$

این بردارها، ویژه‌بردارهای چهار مشاهده‌پذیر  $S_1^z$ ،  $S_2^z$ ،  $S_1^y$  و  $S_2^y$  هستند (که در واقع تعمیم عملگرهای تعریف شده در هر یک از فضاهای حالت به فضای حاصلضرب تانسوری‌اند).

$$S_1^z |\epsilon_1, \epsilon_2\rangle = S_2^z |\epsilon_1, \epsilon_2\rangle = \frac{\hbar}{2} \epsilon_1 \epsilon_2 |\epsilon_1, \epsilon_2\rangle \quad (10-23\text{-الف})$$

$$S_{1z} |\epsilon_1, \epsilon_2\rangle = \epsilon_1 \frac{\hbar}{2} |\epsilon_1, \epsilon_2\rangle \quad (10-23\text{-ب})$$

$$S_{2z} |\epsilon_1, \epsilon_2\rangle = \epsilon_2 \frac{\hbar}{2} |\epsilon_1, \epsilon_2\rangle \quad (10-23\text{-ج})$$

$S_1^z$ ،  $S_2^z$  و  $S_{1z}$  و  $S_{2z}$  تشکیل یک مجموعه کاملی از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاپذیر می‌دهند (دو مشاهده‌پذیر اول در واقع مضاربی از عملگر همانی هستند و حتی در صورت حذف آنها هم مجموعه عملگرها، کامل باقی می‌ماند).

ب) اسپین کل  $S$ . روابط جابه‌جایی

اسپین کل  $S$  سیستم را به صورت زیر تعریف می‌کنیم

$$S = S_1 + S_2 \quad (24-10)$$

با علم به اینکه  $S_1$  و  $S_2$  تکانه زاویه‌ای هستند، به آسانی می‌توان نشان داد که  $S$  نیز یک تکانه زاویه‌ای است. برای مثال، می‌توانیم جابه‌جاگر  $S_x$  و  $S_y$  را حساب کنیم

$$\begin{aligned} [S_x, S_y] &= [S_{1x} + S_{2x}, S_{1y} + S_{2y}] \\ &= [S_{1x}, S_{1y}] + [S_{2x}, S_{2y}] \\ &= i\hbar S_{1z} + i\hbar S_{2z} \\ &= i\hbar S_z \end{aligned} \quad (25-10)$$

عملگر  $S^2$  را می‌توان با مربع (اسکالر) کردن معادله (۲۴-۱۰) به دست آورد

$$S^2 = (S_1 + S_2)^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2S_1 \cdot S_2 \quad (26-10)$$

زیرا  $S_1$  و  $S_2$  جابه‌جا می‌شوند. ضرب اسکالر  $S_1 \cdot S_2$  را می‌توان برحسب عملگرهای  $S_{1z}, S_{1\pm}, S_{2z}, S_{2\pm}$  نوشت: به راحتی می‌توان نشان داد که

$$\begin{aligned} S_1 \cdot S_2 &= S_{1x}S_{2x} + S_{1y}S_{2y} + S_{1z}S_{2z} \\ &= \frac{1}{4}(S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+}) + S_{1z}S_{2z} \end{aligned} \quad (27-10)$$

توجه کنید که چون  $S_1$  و  $S_2$  هر یک با  $S_1^2$  و  $S_2^2$  جابه‌جا می‌شوند، سه مؤلفه  $S$  نیز چنین خواهند بود. بخصوص  $S^2$  و  $S_z$  با  $S_1^2$  و  $S_2^2$  جابه‌جا می‌شوند

$$[S_z, S_1^2] = [S_z, S_2^2] = 0 \quad (28-الف)$$

$$[S^2, S_1^2] = [S^2, S_2^2] = 0 \quad (28-ب)$$

به علاوه، بدیهی است که  $S_z$  با  $S_{1z}$  و  $S_{2z}$  جابه‌جا می‌شود

$$[S_z, S_{1z}] = [S_z, S_{2z}] = 0 \quad (29-10)$$

ولی  $S^2$  با هیچ‌کدام از عملگرهای  $S_{1z}$  و  $S_{2z}$  جابه‌جا نمی‌شود زیرا طبق (۱۰-۲۶) داریم

$$\begin{aligned} [S^2, S_{1z}] &= [S_1^2 + S_2^2 + 2S_1 \cdot S_2, S_{1z}] \\ &= 2[S_1 \cdot S_2, S_{1z}] \\ &= 2[S_{1x}S_{2x} + S_{1y}S_{2y}, S_{1z}] \\ &= 2i\hbar(-S_{1y}S_{2x} + S_{1x}S_{2y}) \end{aligned} \quad (30-10)$$

[این محاسبه نظیر محاسبه‌ای است که در (۱۷-۱۰) و (۱۸-۱۰) انجام شد]. البته، جابه‌جاگر  $S^2$  با  $S_{2z}$  مساوی و مختلف‌العلامه با جابه‌جاگر بالاست، به طوری که  $S_z = S_{1z} + S_{2z}$  با  $S^2$  جابه‌جا می‌شود.

### ج) تغییر پایه

پایه (۱۰-۲۲)، همان‌طور که دیدیم، از ویژه‌بردارهای مشترک مجموعه کاملی از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاپذیر زیر تشکیل شده است

$$\{S_1^z, S_2^z, S_{1z}, S_{2z}\} \quad (31-10)$$

هیچنین در بالا نشان دادیم که چهار مشاهده‌پذیر

$$S_1^z, S_2^z, S^2, S_z \quad (32-10)$$

جابه‌جا می‌شوند. در آنچه به دنبال می‌آید خواهیم دید که اینها نیز یک مجموعه کاملی از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاپذیر تشکیل می‌دهند.

از جمع دو اسپین  $S_1$  و  $S_2$  یک سیستم راست‌هنجار از ویژه‌بردارهای مشترک مجموعه (۱۰-۳۲) ساخته می‌شود. این سیستم با (۱۰-۲۲) متفاوت خواهد بود، زیرا  $S^2$  با  $S_{1z}$  و  $S_{2z}$  جابه‌جا نمی‌شود. با در نظر داشتن ضمنی ویژه‌مقدارهای  $S_1^z$  و  $S_2^z$  (که همان ویژه‌مقدارهای قبلی هستند)،

بردارهای این پایه جدید را به  $|S, M\rangle$  نمایش می‌دهیم. بنابراین، بردارهای  $|S, M\rangle$  در معادلات زیر صدق می‌کنند

$$S_x^2 |S, M\rangle = S_x^2 |S, M\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |S, M\rangle \quad (۱۰-۳۳الف)$$

$$S^2 |S, M\rangle = S(S+1) \hbar^2 |S, M\rangle \quad (۱۰-۳۳ب)$$

$$S_z |S, M\rangle = M \hbar |S, M\rangle \quad (۱۰-۳۳ج)$$

می‌دانیم که  $S$  یک تکانه زاویه‌ای است. در نتیجه،  $S$  باید یک عدد مثبت صحیح یا نیمه‌صحیح باشد، و  $M$  با جهشهای "یک-واحدی" بین  $-S$  و  $+S$  تغییر کند. بنابراین، مسئله این است که بین  $S$  و  $M$  واقعاً چه مقادیری می‌توانند داشته باشند، و بردارهای پایه  $|S, M\rangle$  را برحسب پایه‌های معلوم بیان کنیم.

در این بخش، مطالعه خود را به حل این مسئله با یک روش مقدماتی که شامل محاسبه و قطری کردن ماتریسهای  $4 \times 4$  معرف  $S_x^2$  و  $S_z$  در پایه  $\{|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle\}$  است، محدود خواهیم کرد. در بخش ۱۰-۳، از روش بهتر دیگری استفاده خواهیم کرد، و آن را به مورد دو تکانه زاویه‌ای دلخواه تعمیم خواهیم داد.

### ۱۰-۲-۲ ویژه‌مقدارهای $S_z$ و درجات واگنی آنها

بررسی مشاهده‌پذیرهای  $S_x^2$  و  $S_z^2$  آسان است: کلیه بردارهای فضای حالت، ویژه‌بردارهای آنها، با ویژه‌مقدار یکسان  $3\hbar^2/4$  هستند. در نتیجه، معادلات (۱۰-۳۳الف) خودبه‌خود برای تمام کتهای  $|S, M\rangle$  برقرارند.

قبلاً [در فرمولهای (۱۰-۲۸) و (۱۰-۲۹)] ملاحظه کردیم که  $S_z$  با چهار مشاهده‌پذیر با مجموعه کاملی از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاپذیر (۱۰-۳۱) جابه‌جا می‌شود. بنابراین باید انتظار داشته باشیم که بردارهای پایه  $\{|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle\}$  خودبه‌خود ویژه‌بردارهای  $S_z$  باشند. در واقع، با استفاده از (۱۰-۲۳ب) و (۱۰-۲۳ج) می‌توان نشان داد که

$$S_z |\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle = (S_{1z} + S_{2z}) |\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle = \frac{1}{4} (\varepsilon_1 + \varepsilon_2) \hbar |\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle \quad (۱۰-۳۴)$$

بنابراین  $|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle$  یک ویژه‌حالت  $S_z$  با ویژه‌مقدار

$$M = \frac{1}{4} (\varepsilon_1 + \varepsilon_2) \quad (۱۰-۳۵)$$

است. چون  $\varepsilon_1$  و  $\varepsilon_2$  هر کدام می‌توانند برابر با  $\pm 1$  باشند، می‌بینیم که  $M$  می‌تواند مقادیر  $1, 0, -1$  را اختیار کند.

مقادیر  $M = 1$  و  $M = -1$  واگن نیستند. به هر یک از آنها فقط یک ویژه‌بردار مربوط می‌شود:  $(+, +)$  برای اولی و  $(-, -)$  برای دومی. از طرف دیگر،  $M = 0$  دوبار واگن است: دو ویژه‌بردار متعامد  $(+, -)$  و  $(-, +)$  متناظر با آن هستند. هر ترکیب خطی از این دو بردار، یک ویژه‌حالت از  $S_z$ ، با ویژه‌مقدار صفر، است.

این نتایج در ماتریسی که معرف  $S_z$  در پایه  $\{|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle\}$  است به‌وضوح ظاهر می‌شوند. با انتخاب بردارهای پایه به ترتیبی که در (۱۰-۲۲) آمده است، این ماتریس را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$(S_z) = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (۱۰-۳۶)$$

### ۱۰-۲-۳ قطری کردن $S^2$

آنچه می‌ماند این است که ماتریس معرف  $S^2$  در پایه  $\{|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle\}$  را پیدا و سپس آن را قطری کنیم. از پیش می‌دانیم که این ماتریس قطری نیست، زیرا  $S^2$  با  $S_{1z}$  و  $S_{2z}$  جابه‌جا نمی‌شود.

#### الف) محاسبه ماتریس معرف $S^2$

می‌خواهیم  $S^2$  را به هر یک از این بردارهای پایه اعمال کنیم. برای انجام این کار از فرمولهای (۱۰-۲۶) و (۱۰-۲۷) استفاده می‌کنیم

$$S^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2S_{1z}S_{2z} + S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+} \quad (۱۰-۳۷)$$

چهار بردار  $|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle$ ، ویژه‌بردارهای  $S_1^2$ ،  $S_2^2$ ،  $S_{1z}$  و  $S_{2z}$  هستند [فرمولهای (۱۰-۲۳)]، و عمل عملگرهای  $S_{1\pm}$  و  $S_{2\pm}$  را می‌توان از فرمولهای (۹-۱۳) فصل ۹ به‌دست آورد. در این صورت داریم

$$\begin{aligned} S^2|+, +\rangle &= \left(\frac{3}{4}\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2\right)|+, +\rangle + \frac{1}{4}\hbar^2|+, +\rangle \\ &= 2\hbar^2|+, +\rangle \end{aligned} \quad (۱۰-۳۸\text{الف})$$

$$\begin{aligned} S^z |+, -\rangle &= \left( \frac{3}{4} \hbar^z + \frac{3}{4} \hbar^z \right) |+, -\rangle - \frac{1}{4} \hbar^z |+, -\rangle + \hbar^z |-, +\rangle \\ &= \hbar^z [|+, -\rangle + |-, +\rangle] \end{aligned} \quad (\text{ب } ۳۸-۱۰)$$

$$\begin{aligned} S^z |-, +\rangle &= \left( \frac{3}{4} \hbar^z + \frac{3}{4} \hbar^z \right) |-, +\rangle - \frac{1}{4} \hbar^z |-, +\rangle + \hbar^z |+, -\rangle \\ &= \hbar^z [|-, +\rangle + |+, -\rangle] \end{aligned} \quad (\text{ج } ۳۸-۱۰)$$

$$\begin{aligned} S^z |-, -\rangle &= \left( \frac{3}{4} \hbar^z + \frac{3}{4} \hbar^z \right) |-, -\rangle + \frac{1}{4} \hbar^z |-, -\rangle \\ &= 2\hbar^z |-, -\rangle \end{aligned} \quad (\text{د } ۳۸-۱۰)$$

بنابراین، ماتریس معرف  $S^z$  در پایه چهار بردار  $\{|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle\}$  که به ترتیب مذکور (۱۰-۲۲) مرتب شده‌اند، عبارت است از

$$(S^z) = \hbar^z \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \quad (۳۹-۱۰)$$

یادداشت:

صفرهایی که در این ماتریس ظاهر می‌شوند، قابل انتظار بودند.  $S_z$  با  $S^z$  جابه‌جا می‌شود، و بنابراین تنها عناصر ماتریسی آن که بین ویژه‌بردارهای  $S_z$  وابسته به یک ویژه‌مقدار هستند، غیرصفرند. طبق نتایج بخش ۱۰-۲-۲، تنها عناصر غیرقطری  $S^z$  که می‌توانند مخالف صفر باشند آنهایی هستند که  $|+, -\rangle$  را به  $|-, +\rangle$  مربوط می‌کنند. ■

(ب) ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای  $S^z$

ماتریس (۱۰-۳۹) را می‌توان به سه زیرماتریس قسمت کرد (به‌گونه‌ای که توسط خط چینها نشان داده شده است). دو تای آنها یک‌بعدی‌اند: بردارهای  $|+, +\rangle$  و  $|-, -\rangle$  که ویژه‌بردارهای  $S^z$  هستند، همان‌طوری که توسط روابط (۱۰-۳۸ الف) و (۱۰-۳۸ د) نیز نشان داده شده است، ویژه‌مقدارهای وابسته به آنها، هر دو برابر با  $2\hbar^z$  است.

اکنون باید زیرماتریس  $2 \times 2$  ی

$$(S^z)_0 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (40-10)$$

را که معرف  $S^z$  در داخل زیرفضای دوبعدی حاصل پدید آمده از  $|+, -\rangle$  و  $|-, +\rangle$ ، یعنی، ویژه‌زیرفضای  $S_z$  متناظر با  $M = 0$  قطری کنیم. ویژه‌مقدارهای  $\lambda \hbar^2$  ی ماتریس  $(40-10)$  را می‌توان با حل معادلهٔ مفسر

$$(1 - \lambda)^2 - 1 = 0 \quad (41-10)$$

به‌دست آورد. ریشه‌های این معادله عبارت‌اند از  $\lambda = 2$  و  $\lambda = 0$ . از اینها دو ویژه‌مقدار آخر  $S^z$ ، یعنی  $0$  و  $2\hbar^2$ ، حاصل می‌شوند. با یک محاسبهٔ مقدماتی، ویژه‌بردارهای مربوط به‌دست می‌آیند

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[|+, -\rangle + |-, +\rangle] \quad \text{برای ویژه‌مقدار } 2\hbar^2 \text{ داریم} \quad (10-42\text{الف})$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[|+, -\rangle - |-, +\rangle] \quad \text{برای ویژه‌مقدار صفر داریم} \quad (10-42\text{ب})$$

(البته، این بردارها فقط با تقریب یک ضریب فاز جابه‌جایی تعریف می‌شوند، ضرایب  $1/\sqrt{2}$  بهنجارش آنها را تضمین می‌کنند).

بنابراین، عملگر  $S^z$  دارای دو ویژه‌مقدار متمایز است:  $0$  و  $2\hbar^2$ . اولی ناواگن و مربوط به بردار  $(10-42\text{ب})$  است. دومی سه‌بار واگن است، و بردارهای  $|+, +\rangle$ ،  $|-, -\rangle$  و  $(10-42\text{الف})$  تشکیل یک پایهٔ راست‌هنجار در ویژه‌زیرفضای وابسته به آن می‌دهند.

### ۱۰-۲-۴ نتایج: سه‌تایی و یکتایی

به‌این ترتیب، ویژه‌مقدارهای  $S^z$  و  $S_x$ ، و همچنین سیستمی از ویژه‌بردارهای مشترک بین این دو مشاهده‌پذیر را به‌دست آوردیم. این نتایج را با بیان آنها برحسب نمادگذاری معادلات  $(10-33)$  خلاصه خواهیم کرد.

عددکوانتومی  $S$  از معادلهٔ  $(10-33\text{ب})$  دو مقدار می‌تواند اختیار کند:  $0$  و  $1$ . مقدار اول وابسته به یک تک‌بردار،  $(10-33\text{ب})$  است، که ویژه‌بردار  $S_z$  با ویژه‌مقدار صفر نیز هست، زیرا این بردار



ترکیب خطی‌ای از  $|+, -\rangle$  و  $|-, +\rangle$  است: از این رو، آن را به صورت  $|^0, ^0\rangle$  نشان خواهیم داد

$$|^0, ^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+, -\rangle - |-, +\rangle] \quad (۴۳-۱۰)$$

به مقدار  $S = 1$ ، سه بردار که اختلافشان در مقادیر  $M$  آنهاست، وابسته‌اند

$$\begin{cases} |1, 1\rangle = |+, +\rangle \\ |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+, -\rangle + |-, +\rangle] \\ |1, -1\rangle = |-, -\rangle \end{cases} \quad (۴۴-۱۰)$$

به‌سادگی می‌توان نشان داد که چهار بردار  $|S, M\rangle$  که توسط  $(۴۳-۱۰)$  و  $(۴۴-۱۰)$  داده شده‌اند، تشکیل یک پایهٔ راست‌هنگار می‌دهند. مشخص کردن  $S$  و  $M$  کافی است تا یک بردار از این پایه را به‌طور منحصر به‌فرد تعریف کند. از این مطلب می‌توان نشان داد که  $S^z$  و  $S^2$  یک مجموعهٔ کاملی از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاپذیر تشکیل می‌دهند (که می‌تواند شامل  $S^z$  و  $S^2$  نیز باشد، هر چند که در اینجا ضرورتی ندارد).

بنابراین، وقتی دو اسپین  $1/2$ ،  $(s_1 = s_2 = 1/2)$ ، با هم جمع شوند، عدد  $S$ ، که ویژه‌مقدارهای  $S(S+1)\hbar^2$  مشاهده‌پذیر  $S^2$  را مشخص می‌کند، می‌تواند مساوی ۱ یا مساوی صفر باشد. به هر یک از این دو مقدار  $S$ ، تعداد  $(2S+1)$  بردار متعامد (سه تا برای  $S=1$  و یکی برای  $S=0$ ) مربوط به  $(2S+1)$  مقدار  $M$  سازگار با  $S$ ، وابسته است.

یادداشتها:

۱. مجموعهٔ  $(۴۴-۱۰)$  از سه بردار  $|1, M\rangle |1, ^0, -1\rangle$ ، آنچه را که اصطلاحاً یک

سه‌تایی نامیده می‌شود، تشکیل می‌دهد؛ بردار  $|^0, ^0\rangle$  یک حالت یکتایی نامیده می‌شود.

۲. حالت‌های سه‌تایی نسبت به تعویض دو اسپین متقارن‌اند، در حالی‌که حالت یکتایی پادمقارن

است. این یعنی که اگر هر بردار  $|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle$  توسط بردار  $|\epsilon_2, \epsilon_1\rangle$  جایگزین کنیم، روابط  $(۴۴-۱۰)$

ناوردا باقی می‌مانند، حال آنکه  $(۴۳-۱۰)$  تغییر علامت می‌دهد. اهمیت این خصوصیت را در

فصل ۱۴ به‌هنگام جمع اسپین‌های دو ذرهٔ همانند، ملاحظه خواهیم کرد. به‌علاوه، این خصوصیت

ما را قادر به یافتن ترکیب خطی مناسب از  $|+, -\rangle$  و  $|-, +\rangle$ ، (مسئلاً متقارن) می‌نماید، که باید

وابستهٔ به  $|+, +\rangle$  و  $|-, -\rangle$  باشد تا سه‌تایی را کامل کند، از طرف دیگر، حالت یکتایی، ترکیب

خطی پادمقارن از  $|+, -\rangle$  و  $|-, +\rangle$  است، که بر حالت قبلی متعامد است. ■

## ۱-۳-۱۰ جمع دو تکانه زاویه‌ای دلبخواه.

## روش عمومی

## ۱-۳-۱۰ مروری بر نظریه عمومی تکانه زاویه‌ای

یک سیستم دلبخواه، با فضای حالت  $\mathcal{E}$ ، و یک تکانه زاویه‌ای  $\mathbf{J}$  نسبت به این سیستم را در نظر بگیرید ( $\mathbf{J}$  می‌تواند یک تکانه زاویه‌ای جزیی و یا تکانه زاویه‌ای کل سیستم باشد). در فصل ۶، (بخش ۳-۳-۶)، نشان دادیم که همیشه می‌توانیم یک پایه متعارف  $\{|k, j, m\rangle\}$  متشکل از ویژه‌بردارهای مشترک  $\mathbf{J}^2$  و  $J_z$  بسازیم

$$\mathbf{J}^2 |k, j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |k, j, m\rangle \quad (۱۰-۴۵\text{الف})$$

$$J_z |k, j, m\rangle = m\hbar |k, j, m\rangle \quad (۱۰-۴۵\text{ب})$$

به طوری که عمل عملگرهای  $J_+$  و  $J_-$  از روابط زیر تبعیت کند

$$J_{\pm} |k, j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |k, j, m \pm 1\rangle \quad (۱۰-۴۶)$$

فضای برداری را که توسط مجموعه بردارهای پایه متعارف و متناظر با مقادیر ثابت  $k$  و  $j$  پدید می‌آید، به  $\mathcal{E}(k, j)$  نمایش می‌دهیم.  $(2j+1)$  تا از این بردارها وجود دارند، و بنابر (۱۰-۴۵) و (۱۰-۴۶) می‌توان آنها را توسط  $\mathbf{J}^2$ ،  $J_z$ ،  $J_+$  و  $J_-$  به یکدیگر تبدیل کرد. فضای حالت را می‌توان به صورت حاصل جمع مستقیم زیرفضاهای متعامد  $\mathcal{E}(k, j)$ ، که دارای خصوصیات زیر هستند، در نظر گرفت

$$۱. \mathcal{E}(k, j), (2j+1)\text{-بعدی است،}$$

۲.  $\mathcal{E}(k, j)$  تحت عمل  $\mathbf{J}^2$ ،  $J_z$ ، و  $J_{\pm}$ ، و به طور کلی‌تر، تحت عمل هر تابع  $F(\mathbf{J})$ ، کلاً ناورداست. به عبارت دیگر، این عملگرها فقط در داخل هر یک از زیرفضاهای  $\mathcal{E}(k, j)$  دارای عناصر ماتریسی غیرصفر هستند.

۳. در داخل یک زیرفضای  $\mathcal{E}(k, j)$ ، عناصر ماتریسی هر تابع  $F(\mathbf{J})$  از تکانه زاویه‌ای  $\mathbf{J}$ ، مستقل از  $k$  است.

یادداشت:

همان‌طور که در بخش ۳-۳-۶ الف از فصل ۶ اشاره کردیم، می‌توانیم با انتخاب سیستم ویژه‌بردارهای مشترک بین  $\mathbf{J}^2$  و  $J_z$  و یک یا چند مشاهده‌پذیر که با سه مؤلفه  $\mathbf{J}$  جابه‌جا می‌شوند و با  $\mathbf{J}^2$  و  $J_z$  یک مجموعه

کامل از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاپذیر تشکیل می‌دهند، به‌عنوان پایه متعارف، به شاخص  $k$  یک معنای واقعاً فیزیکی بدهیم. به‌عنوان مثال اگر

$$[A, \mathbf{J}] = 0 \quad (۴۷-۱۰)$$

و اگر مجموعه  $\{A, \mathbf{J}^2, J_z\}$  یک مجموعه کاملی از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاپذیر باشد، انتظار داریم بردارهای  $|k, j, m\rangle$  همان ویژه‌بردارهای  $A$  باشند

$$A|k, j, m\rangle = a_{k,j}|k, j, m\rangle \quad (۴۸-۱۰)$$

در این حالت، روابط  $(۴۵-۱۰)$ ،  $(۴۶-۱۰)$ ، و  $(۴۸-۱۰)$  پایه متعارف  $\{|k, j, m\rangle\}$  را تعیین می‌کنند. هر یک از  $\mathcal{E}(k, j)$ ها یک ویژه‌زیرفضای  $A$  است، و شاخص  $k$  ویژه‌مقدارهای مختلف  $a_{k,j}$  وابسته به هر مقدار  $j$  را مشخص می‌کند. ■

### ۱۰-۳-۲ بیان مسئله

#### الف) فضای حالت

یک سیستم فیزیکی متشکل از اتحاد دو زیر سیستم (مانند یک سیستم دو ذره‌ای) را در نظر بگیرید. برای مشخص کردن کمیت‌های مربوط به این دو زیرسیستم از شاخصهای ۱ و ۲ استفاده خواهیم کرد.

فرض می‌کنیم که، در فضای حالت  $\mathcal{E}_1$  متعلق به زیرسیستم (۱)، یک پایه متعارف  $\{|k_1, j_1, m_1\rangle\}$  متشکل از ویژه‌بردارهای مشترک بین  $\mathbf{J}_1^2$  و  $J_{1z}$  را می‌شناسیم، که در آن عملگر تکانه زاویه‌ای زیرسیستم (۱) است

$$J_{1y}^2 |k_1, j_1, m_1\rangle = j_1(j_1 + 1)\hbar^2 |k_1, j_1, m_1\rangle \quad (الف) ۴۹-۱۰)$$

$$J_{1z} |k_1, j_1, m_1\rangle = m_1 \hbar |k_1, j_1, m_1\rangle \quad (ب) ۴۹-۱۰)$$

$$J_{1\pm} |k_1, j_1, m_1\rangle = \hbar \sqrt{j_1(j_1 + 1) - m_1(m_1 \pm 1)} |k_1, j_1, m_1 \pm 1\rangle \quad (ج) ۴۹-۱۰)$$

همچنین، فضای حالت  $\mathcal{E}_2$  متعلق به زیرسیستم (۲)، توسط پایه متعارف  $\{|k_2, j_2, m_2\rangle\}$  به‌وجود می‌آید

$$J_y^\dagger |k_r, j_r, m_r\rangle = j_r(j_r + 1)\hbar^2 |k_r, j_r, m_r\rangle \quad (الف-۱۰-۵۰)$$

$$J_{rz} |k_r, j_r, m_r\rangle = m_r \hbar |k_r, j_r, m_r\rangle \quad (ب-۱۰-۵۰)$$

$$J_{r\pm} |k_r, j_r, m_r\rangle = \hbar \sqrt{j_r(j_r + 1) - m_r(m_r \pm 1)} |k_r, j_r, m_r \pm 1\rangle \quad (ج-۱۰-۵۰)$$

فضای حالت سیستم کل، حاصلضرب تانسوری  $\mathcal{E}_1$  و  $\mathcal{E}_2$  است

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2 \quad (۵۱-۱۰)$$

یک پایه از سیستم کل را، که از حاصلضرب تانسوری پایه‌های انتخاب شده در  $\mathcal{E}_1$  و  $\mathcal{E}_2$  تشکیل می‌شود، می‌شناسیم. بردارهای این پایه را به  $|k_1, k_2; j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$  نمایش می‌دهیم

$$|k_1, k_2; j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = |k_1, j_1, m_1\rangle \otimes |k_2, j_2, m_2\rangle \quad (۵۲-۱۰)$$

فضاهای  $\mathcal{E}_1$  و  $\mathcal{E}_2$  را می‌توان به‌عنوان حاصل‌جمعهای مستقیم زیرفضاهای  $\mathcal{E}_1(k_1, j_1)$  و  $\mathcal{E}_2(k_2, j_2)$ ، که دارای خصوصیات مذکور در بخش ۱-۳-۱ هستند، در نظر گرفت

$$\mathcal{E}_1 = \sum_{\oplus} \mathcal{E}_1(k_1, j_1) \quad (الف-۱۰-۵۳)$$

$$\mathcal{E}_2 = \sum_{\oplus} \mathcal{E}_2(k_2, j_2) \quad (ب-۱۰-۵۳)$$

در نتیجه،  $\mathcal{E}$  مجموع مستقیم زیرفضاهای  $\mathcal{E}(k_1, k_2; j_1, j_2)$  است، که از حاصلضرب تانسوری یک فضای  $\mathcal{E}_1(k_1, j_1)$  و یک فضای  $\mathcal{E}_2(k_2, j_2)$  به‌دست می‌آید

$$\mathcal{E} = \sum_{\oplus} \mathcal{E}(k_1, k_2; j_1, j_2) \quad (۵۴-۱۰)$$

که در آن

$$\mathcal{E}(k_1, k_2; j_1, j_2) = \mathcal{E}_1(k_1, j_1) \otimes \mathcal{E}_2(k_2, j_2) \quad (۵۵-۱۰)$$

تعداد ابعاد زیرفضای  $\mathcal{E}(k_1, k_2; j_1, j_2)$  برابر با  $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$  است. این زیرفضا کلاً تحت عمل هر تابعی از  $J_1$  و  $J_2$  ناورداست (در اینجا  $J_1$  و  $J_2$  تعمیم عملگرهای تکانه زاویه‌ای، در  $\mathcal{E}$  هستند، که در اصل به‌ترتیب در  $\mathcal{E}_1$  و  $\mathcal{E}_2$  تعریف شدند).

ب) تکانه زاویه‌ای کل. روابط جابه‌جایی

تکانه زاویه‌ای کل سیستم مورد نظر به صورت زیر تعریف می‌شود

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2 \quad (۵۶-۱۰)$$

که در آن  $\mathbf{J}_1$  و  $\mathbf{J}_2$ ، که تعمیم عملگرهایی هستند که در فضاهای متفاوت  $\mathcal{E}_1$  و  $\mathcal{E}_2$  عمل می‌کنند، با یکدیگر جابه‌جا می‌شوند. البته، مؤلفه‌های  $\mathbf{J}_1$ ، از یک طرف، و مؤلفه‌های  $\mathbf{J}_2$ ، از طرف دیگر، در روابط جابه‌جایی که مشخصه تکانه‌های زاویه‌ای هستند، صدق می‌کنند. به راحتی می‌توان ثابت کرد که مؤلفه‌های  $\mathbf{J}$  نیز در چنین روابطی صدق می‌کنند [این محاسبه مثل همان محاسبه (۴۸-۱۰) است].

چون  $\mathbf{J}_1$  و  $\mathbf{J}_2$  هر یک با  $\mathbf{J}_1^2$  و  $\mathbf{J}_2^2$  جابه‌جا می‌شوند،  $\mathbf{J}$  نیز با آنها جابه‌جا می‌شود. مخصوصاً،  $\mathbf{J}^2$  و  $J_z$  با  $\mathbf{J}_1^2$  و  $\mathbf{J}_2^2$  جابه‌جا می‌شوند

$$[J_z, \mathbf{J}_1^2] = [J_z, \mathbf{J}_2^2] = 0 \quad (۱۰۷-۵۷ الف)$$

$$[\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_1^2] = [\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_2^2] = 0 \quad (۱۰۷-۵۷ ب)$$

علاوه بر این، مسلماً  $J_z$  با  $J_{2z}$  و  $J_z$  جابه‌جا می‌شوند

$$[J_{1z}, J_z] = [J_{2z}, J_z] = 0 \quad (۱۰۷-۵۸)$$

اما با  $\mathbf{J}^2$  جابه‌جا نمی‌شوند زیرا این عملگر را می‌توان به صورت زیر برحسب  $\mathbf{J}_1$  و  $\mathbf{J}_2$  نوشت

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{J}_1^2 + \mathbf{J}_2^2 + 2\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2 \quad (۱۰۷-۵۹)$$

و، مانند (۱۰۷-۵۳)،  $J_{1z}$  و  $J_{2z}$  با  $\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2$  جابه‌جا نمی‌شوند. همچنین می‌توانیم عبارت متناظر  $\mathbf{J}^2$  را به شکل زیر در آوریم

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{J}_1^2 + \mathbf{J}_2^2 + 2J_{1z}J_{2z} + J_{1+}J_{2-} + J_{1-}J_{2+} \quad (۱۰۷-۶۰)$$

ج) تغییر پایه‌ای که باید انجام شود

بردار  $\{m_1, m_2; j_1, j_2; k_1, k_2\}$  از پایه  $(1^0-52)$ ، به‌طور همزمان ویژه‌حالت مشاهده‌پذیرهای

$$J_1^z, J_2^z, J_{1z}, J_{2z} \quad (61-1^0)$$

با ویژه‌مقدارهای  $m_1 \hbar, m_2 \hbar, j_1(j_1 + 1)\hbar^2, j_2(j_2 + 1)\hbar^2$  است. پایه  $(1^0-52)$  برای بررسی هر یک از تکانه‌های زاویه‌ای  $J_1$  و  $J_2$  دو زیرسیستم، کاملاً مناسب است.

بنابر  $(1^0-57)$ ، مشاهده‌پذیرهای

$$J_1^z, J_2^z, J_z \quad (62-1^0)$$

نیز جابه‌جا می‌شوند. می‌خواهیم یک سیستم راست‌هنگار از ویژه‌بردارهای مشترک این مشاهده‌پذیرها بسازیم، این پایه جدید برای مطالعه تکانه زاویه‌ای کل سیستم کاملاً مناسب است. توجه کنید که این پایه با پایه قبلی متفاوت است، زیرا  $J^z$  با  $J_{1z}$  و  $J_{2z}$  جابه‌جا نمی‌شود (بخش  $1^0-3-2$  بالا).

یادداشت:

برای اینکه به شاخصهای  $k_1$  و  $k_2$  یک مفهوم فیزیکی بدهیم، فرض می‌کنیم (تذکر بخش  $1^0-3-2$  ج-۱) که در  $\mathcal{E}_1$  مجموعه کاملی از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاپذیر  $\{A_1, J_1^z, J_{1z}\}$ ، که در آن  $A_1$  با سه مؤلفه  $J_1$  جابه‌جا می‌شود، و در  $\mathcal{E}_2$  مجموعه کاملی از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاپذیر،  $\{A_2, J_2^z, J_{2z}\}$ ، که در آن  $A_2$  با سه مؤلفه  $J_2$  جابه‌جا می‌شود، را می‌شناسیم. می‌توانیم برای پایه متعارف  $\{k_1, j_1, m_1\}$  سیستم راست‌هنگار ویژه‌بردارهای مشترک بین  $A_1$ ،  $J_1^z$  و  $J_{1z}$ ، و برای  $\{k_2, j_2, m_2\}$ ، سیستم راست‌هنگار ویژه‌بردارهای مشترک بین  $A_2$ ،  $J_2^z$  و  $J_{2z}$  را انتخاب کنیم. در این صورت، مجموعه

$$\{A_1, A_2; J_1^z, J_2^z; J_{1z}, J_{2z}\} \quad (63-1^0)$$

تشکیل یک مجموعه کامل از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاپذیر در  $\mathcal{E}$  را می‌دهد، که ویژه‌بردارهای آنها همان کتهای  $(1^0-52)$  هستند. چون مشاهده‌پذیر  $A_1$  به‌طور جداگانه با مؤلفه‌های  $J_1$  و  $J_2$  جابه‌جا می‌شود، با  $J$  نیز جابه‌جا خواهد شد، مخصوصاً با  $J^z$  و  $J_z$  جابه‌جا می‌شود. البته، همین مطلب در مورد  $A_2$  نیز صادق است. در نتیجه، مشاهده‌پذیرهای

$$A_1, A_2, J_1^z, J_2^z, J^z, J_z \quad (64-1^0)$$

با یکدیگر جابه‌جا می‌شوند. خواهیم دید که اینها در واقع تشکیل یک مجموعه کامل از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاپذیر می‌دهند؛ پایه جدیدی را که می‌خواهیم پیدا کنیم، سیستم راست‌هنگار از ویژه‌بردارهای مشترک این مجموعه کامل از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاپذیر است.

زیرفضای  $\mathcal{E}(k_1, k_2; j_1, j_2)$  متعلق به  $\mathcal{E}$  که در  $(10-55)$  تعریف شده است، تحت عمل هر عملگری که تابعی از  $J_1$  و  $J_2$  باشد کلاً ناورداست، و بنابراین تحت عمل هر تابعی از تکانه زاویه‌ای کل  $J$  نیز کلاً ناوردا خواهد بود. نتیجه اینکه، تنها عناصری از ماتریسهای معرف مشاهده‌پذیرهای  $J^1$  و  $J^2$ ، که می‌خواهیم آنها را قطری کنیم، مخالف صفرند که بین بردارهای متعلق به یک زیرفضای  $\mathcal{E}(k_1, k_2; j_1, j_2)$  قرار داشته باشند. ماتریسهای (معمولاً نامتناهی) معرف  $J^1$  و  $J^2$  در پایه  $(10-52)$  "به‌طور قطعی" اند، یعنی، می‌توان آنها را به یک رشته زیرماتریسها تفکیک کرد. که هر یک از آنها به یک زیرفضای خاص  $\mathcal{E}(k_1, k_2; j_1, j_2)$  متناظر است. بنابراین، مسئله به یک تغییر پایه در داخل هر یک از زیرفضاهای  $\mathcal{E}(k_1, k_2; j_1, j_2)$ ، که دارای تعداد متناهی  $(1+2j_2)(1+2j_1)$  بعد هستند، تقلیل می‌یابد.

به‌علاوه، عناصر ماتریسی هر تابعی از  $J_1$  و  $J_2$  در پایه  $(10-52)$ ، مستقل از  $k_1$  و  $k_2$  هستند. از این رو این مطلب در مورد تابعی از  $J^1$  و  $J^2$  نیز درست است. در نتیجه، مسئله قطری کردن  $J^1$  و  $J^2$  در داخل تمام زیرفضاهای  $\mathcal{E}(k_1, k_2; j_1, j_2)$  که مربوط به مقادیر مشابه  $j_1$  و  $j_2$  هستند، یکسان است. به همین دلیل است که معمولاً از جمع تکانه‌های زاویه‌ای  $j_1$  و  $j_2$  صحبت می‌شود بدون اینکه سایر اعداد کوانتومی را مشخص کنند. برای ساده کردن نمادگذاری، از این به بعد شاخصهای  $k_1$  و  $k_2$  را حذف خواهیم کرد. زیرفضای  $\mathcal{E}(k_1, k_2; j_1, j_2)$  را با  $\mathcal{E}(j_1, j_2)$ ، بردارهای پایه  $(10-52)$  متعلق به این زیرفضا را با  $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$  نشان خواهیم داد

$$\mathcal{E}(j_1, j_2) \equiv \mathcal{E}(k_1, k_2; j_1, j_2) \quad (10-65 \text{ الف})$$

$$|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \equiv |k_1, k_2; j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \quad (10-65 \text{ ب})$$

چون  $J$  یک تکانه زاویه‌ای و  $\mathcal{E}(j_1, j_2)$  کلاً تحت عمل هر تابعی از  $J$  ناورداست، نتایج فصل ۶ که در بالا (بخش ۱۰-۳-۱) آورده شد، قابل اعمال هستند. در نتیجه،  $\mathcal{E}(j_1, j_2)$  یک مجموع مستقیم از زیرفضاهای متعامد  $\mathcal{E}(k, J)$  است، که هر یک از آنها کلاً تحت عمل  $J^1$ ،  $J^2$ ،  $J_+$  و  $J_-$  ناورداست.

$$\mathcal{E}(j_1, j_2) = \sum_{\oplus} \mathcal{E}(k, J) \quad (10-66)$$

بنابراین، در نهایت با دو مسئله زیر روبه‌رو هستیم:

۱. اگر  $j_1$  و  $j_2$  داده شده باشند، مقادیر  $J$  که در  $(10-66)$  ظاهر می‌شود چیست، و چند زیرفضای مجزای  $\mathcal{E}(k, J)$  به هر یک از آنها وابسته است؟

۲. چگونه می‌توان ویژه‌بردارهای  $J^2$  و  $J_z$  متعلق به  $\mathcal{E}(j_1, j_2)$  را در پایه  $\{|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\}$  بسط داد؟

بخش ۱-۳-۳ جواب سؤال اول، و بخش ۱-۳-۴ جواب سؤال دوم را می‌دهد.

یادداشتها:

۱.  $J_1$  و  $J_2$  را به‌عنوان تکانه‌های زاویه‌ای دو زیرفضای مجزا معرفی کردیم. در واقع، از ۱-۲-۱ می‌دانیم که چگونه می‌توان تکانه‌های زاویه‌ای مداری و اسپین یک ذره را با هم جمع کرد. تمام بحثها و نتایج این بخش در این مورد قابل اعمال هستند، به این ترتیب که باید  $\mathcal{E}_1$  و  $\mathcal{E}_2$  را با  $\mathcal{E}_s$  جایگزین کنیم.

۲. برای جمع کردن چند تکانه زاویه‌ای، ابتدا دو تکانه زاویه‌ای اول را با هم جمع می‌کنیم، سپس تکانه زاویه‌ای حاصل را با تکانه سوم جمع می‌بندیم و همین‌طور ادامه می‌دهیم تا آخرین تکانه زاویه‌ای جمع شده باشد.

### ۱-۳-۳ ویژه‌مقدارهای $J^2$ و $J_z$

الف) مورد خاص از دو اسپین ۱/۲

قبل از هر چیز، بار دیگر مسئله ساده‌ای را که در بخش ۱-۲-۲ بررسی کردیم، در نظر می‌گیریم. در این مورد، فضاهای  $\mathcal{E}_1$  و  $\mathcal{E}_2$ ، هر کدام شامل یک زیرفضای منفرد ناورد، و فضای حاصلضرب تانسوری  $\mathcal{E}$ ، شامل یک زیرفضای منفرد  $\mathcal{E}(j_1, j_2)$  است که برای آن  $j_1 = j_2 = 1/2$  است.

نتایج مذکور در بخش ۱-۳-۱، یافتن مقادیر عدد کوانتومی  $S$  وابسته به اسپین کل را ساده می‌کند. فضای  $\mathcal{E}(1/2, 1/2) = \mathcal{E}$  باید یک مجموع مستقیم از زیرفضاهای  $(2S + 1)$  بعدی  $\mathcal{E}(k, S)$  باشد. هر یک از این زیرفضاها شامل یک و تنها یک ویژه‌بردار  $S_z$  مربوط به هر یک از مقادیر  $M$  است به طوری که  $|M| \leq S$  است. حال، می‌دانیم (بخش ۱-۲-۲) که تنها مقادیری که  $M$  اختیار می‌کند ۱، -۱، و ۰ است، دو مقدار اول، ناواکن، و مقدار سوم، دوبار واکن است. از این مطلب، می‌توان نتایج زیر را مستقیماً استنتاج کرد:

۱. مقادیر بزرگتر از ۱ برای  $S$  غیرممکن‌اند. مثلاً، برای اینکه  $S = 2$  ممکن باشد می‌بایست لااقل یک ویژه‌بردار  $S_z$  با ویژه‌مقدار  $2\hbar$  وجود داشته باشد.

۲. مورد  $S = 1$  تنها یک بار اتفاق می‌افتد (چون  $M = 1$  وجود دارد):  $M = 1$  ناواکن است.

۳. این مطلب برای  $S = 0$  نیز درست است. زیرفضایی که توسط  $S = 1$  مشخص می‌شود



شامل فقط یک بردار است که برای آن  $M = 0$  است، و این مقدار  $M$  در فضای  $\mathcal{E}(1/2, 1/2)$  دو بار واگن است.

بنابراین، فضای چهاربعدی  $\mathcal{E}(1/2, 1/2)$  را می‌توان به یک زیرفضای وابسته به  $S = 1$  (که سه‌بعدی است) و یک زیرفضای وابسته به  $S = 0$  (که یک‌بعدی است) تقسیم کرد. با استدلالی کاملاً مشابه با استدلال بالا، مقادیر ممکن  $J$  را در حالت کلی که در آن  $j_1$  و  $j_2$  دلبخواه هستند، تعیین خواهیم کرد.

ب) ویژه‌مقدارهای  $J_z$  و درجه واگنی آنها

بنابر نتایج بخش ۱۰-۳-۲ ج، یک زیرفضای خوش‌تعریف  $\mathcal{E}(j_1, j_2)$ ،  $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$  بعدی در نظر می‌گیریم. فرض می‌کنیم که  $j_1$  و  $j_2$  طوری شماره‌گذاری شده‌اند که

$$j_1 \geq j_2 \quad (67-10)$$

بردارهای  $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$  نیز ویژه‌حالت‌های  $J_z$  اند

$$\begin{aligned} J_z |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle &= (J_{1z} + J_{2z}) |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \\ &= (m_1 + m_2) \hbar |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \end{aligned} \quad (68-10)$$

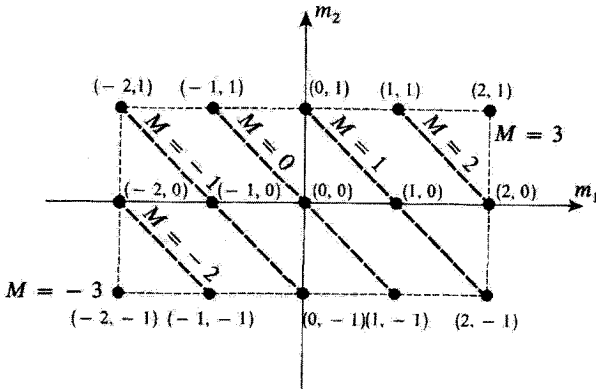
و ویژه‌مقدارهای  $M\hbar$  متناظر طوری هستند که

$$M = m_1 + m_2 \quad (69-10)$$

است. در نتیجه،  $M$  مقادیر زیر را می‌گیرد:

$$j_1 + j_2, \quad j_1 + j_2 - 1, \quad j_1 + j_2 - 2, \dots, -(j_1 + j_2) \quad (70-10)$$

برای یافتن درجه واگنی  $g_{j_1, j_2}(M)$  این مقادیر، می‌توانیم از روش هندسی زیر استفاده کنیم. در یک نمودار دو‌بعدی، به هر بردار  $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$  نقطه‌ای که عرض آن  $m_1$  و طول آن  $m_2$  باشد نسبت می‌دهیم. تمام این نقاط در داخل، یا بر روی اضلاع مستطیلی به رئوس  $(j_1, j_2)$ ،  $(j_1, -j_2)$ ،  $(-j_1, -j_2)$ ، و  $(-j_1, j_2)$  قرار دارند. شکل ۱۰-۱، تعداد ۱۵ نقطه وابسته به بردارهای پایه را، در موردی که در آن  $j_1 = 2$  و  $j_2 = 1$  است، نشان می‌دهد (مقادیر  $m_1$  و



شکل ۱۰-۱ جفت‌مقادیر ممکن  $(m_1, m_2)$  برای کنه‌ای  $(j_1, j_2; m_1, m_2)$  موردی را که در آن  $j_1 = 2$  و  $j_2 = 1$  است انتخاب کرده‌ایم. نقاط وابسته به یک مقدار معین از  $M = m_1 + m_2$  روی یک خط راست با شیب  $-1$  (خط-چینها) قرار دارند.

$m_2$  در کنار هر نقطه نشان داده شده‌اند. تمام نقاطی که بر روی یک خط چین (به شیب  $-1$ ) قرار دارند، با یک مقدار از  $M = m_1 + m_2$  متناظرند. بنابراین، تعداد این نقاط برابر با واگنی  $g_{j_1, j_2}(M)$  این مقدار از  $M$  است.

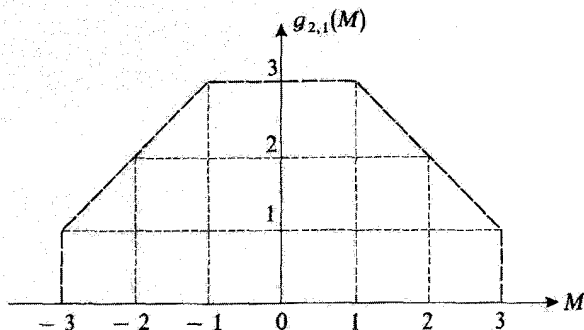
حال، مقادیر مختلف  $M$  را به ترتیب نزولی در نظر بگیرید، و خط تعریف شده توسط هر یک را تعقیب کنید (شکل ۱۰-۱).  $M = j_1 + j_2$  واگن نیست، زیرا خط مشخص‌کننده آن، فقط از رأس بالایی سمت راست مستطیل، که مختصات آن  $(j_1, j_2)$  است، می‌گذرد

$$g_{j_1, j_2}(j_1 + j_2) = 1 \quad (71-10)$$

$M = j_1 + j_2 - 1$  دوبار واگن است، زیرا خط متناظر شامل نقاط  $(j_1, j_2 - 1)$  و  $(j_1 - 1, j_2)$  است

$$g_{j_1, j_2}(j_1 + j_2 - 1) = 2 \quad (72-10)$$

بنابراین وقتی  $M$  به اندازه یک واحد کاهش پیدا کند، درجه واگنی به اندازه یک واحد افزایش می‌یابد، تا وقتی که به رأس پایینی سمت راست مستطیل  $(j_1, m_2 = -j_2)$ ، یعنی به مقدار  $M = j_1 - j_2$  برسیم. به این ترتیب، تعداد نقاط روی خط به یک ماکزیموم می‌رسد که برابر است



شکل ۱-۲ مقدار درجه واگنی  $g_{j_1, j_2}(M)$  به صورت تابعی از  $M$  مانند شکل ۱-۱، موردی را که در آن  $j_1 = 2$  و  $j_2 = 1$  است نشان داده‌ایم. درجه واگنی  $g_{j_1, j_2}(M)$ ، به‌سادگی، با شمردن نقاط روی خط‌چین متناظر با شکل ۱-۱ به دست می‌آید.

با

$$g_{j_1, j_2}(j_1 - j_2) = 2j_2 + 1 \quad (۷۳-۱۰)$$

وقتی  $M$  به کمتر از  $j_1 - j_2$  می‌افتد، ابتدا  $g_{j_1, j_2}(M)$  ثابت می‌ماند و مادامی که خط وابسته به  $M$  تمام عرض مستطیل را قطع می‌کند، یعنی تا هنگامی که این خط از رأس بالایی سمت چپ مستطیل ( $m_1 = -j_1, m_2 = j_2$ ) عبور نکرده، یعنی برابر با مقدار ماکزیموم آن است

$$g_{j_1, j_2}(M) = 2j_2 + 1 \quad \text{به‌ازای} \quad -(j_1 - j_2) \leq M \leq j_1 - j_2 \quad (۷۴-۱۰)$$

بالاخره، برای  $M$  کوچکتر از  $-(j_1 - j_2)$ ، خط مربوط، دیگر ضلع افقی بالایی مستطیل را قطع نمی‌کند، و هر بار که  $M$  به اندازه یک واحد کاهش یابد،  $g_{j_1, j_2}(M)$  یک واحد کاهش می‌یابد، تا اینکه برای  $M = -(j_1 + j_2)$  (رأس پایینی سمت چپ مستطیل)، درجه واگنی بار دیگر به ۱ می‌رسد. در نتیجه

$$g_{j_1, j_2}(-M) = g_{j_1, j_2}(M) \quad (۷۵-۱۰)$$

این نتایج، برای  $j_1 = 2$  و  $j_2 = 1$  در شکل ۱-۲، که  $g_{2,1}(M)$  را به صورت تابعی از  $M$  نشان می‌دهد، خلاصه شده است.

ج) ویژه‌مقدارهای  $J^2$ 

ابتدا توجه کنید که در  $(۷-۱۰)$ ، در صورتی که  $j_1$  و  $j_2$  هر دو اعداد صحیح یا هر دو نیمه‌صحیح باشند، تمام مقادیر  $M$  اعداد صحیح خواهند بود و اگر یکی از  $j_1$  و  $j_2$  عدد صحیح و دیگری نیمه‌صحیح باشد، مقادیر  $M$  نیمه‌صحیح خواهند بود. در نتیجه، کلیه مقادیر مربوطه  $J$  نیز در مورد اول اعدادی صحیح، و در مورد دوم اعدادی نیمه‌صحیح خواهند بود.

چون بیشترین مقدار ممکن  $M$ ، برابر  $j_1 + j_2$  است، هیچ‌یک از  $J$ ‌های بزرگتر از  $j_1 + j_2$  در  $\mathcal{E}(j_1, j_2)$ ، و لذا در مجموع مستقیم  $(۱۰-۶۶)$ ، ظاهر نخواهد شد. به  $J = j_1 + j_2$  یک زیرفضای ناوردا (زیرا  $M = j_1 + j_2$  وجود دارد) و فقط یک زیرفضا (زیرا  $M = j_1 + j_2$  واگن نیست) وابسته است. در این زیرفضای  $\mathcal{E}(J = j_1 + j_2)$ ، تنها فقط یک بردار وجود دارد که مربوط به  $M = j_1 + j_2 - 1$  است؛ حال، این مقدار  $M$  در  $\mathcal{E}(j_1, j_2)$ ، دوبار واگن است؛ بنابراین،  $J = j_1 + j_2 - 1$  نیز رخ می‌دهد، و به آن یک زیرفضای ناوردا منفرد  $\mathcal{E}(J = j_1 + j_2 - 1)$  متناظر می‌شود.

به‌طور کلی‌تر، تعداد زیرفضاهای  $\mathcal{E}(k, J)$  متعلق به  $\mathcal{E}(j_1, j_2)$  را که به یک مقدار معین  $J$  وابسته‌اند، را با  $p_{j_1, j_2}(J)$  نشان خواهیم داد. یعنی، تعداد مقادیر مختلف  $k$  به‌ازاء این مقدار  $J$ ،  $j_1$  و  $j_2$  در آغاز کار مشخص شده‌اند  $p_{j_1, j_2}(J)$  و  $g_{j_1, j_2}(M)$  رابطه ساده‌ای با هم دارند. یک مقدار خاص  $M$  را در نظر بگیرید. به این مقدار تنها فقط یک بردار در هر زیرفضای  $\mathcal{E}(k, J)$  متناظر می‌شود به‌طوری که  $J \geq |M|$ . بنابراین، درجهٔ واگنی  $g_{j_1, j_2}(M)$  آن را در  $\mathcal{E}(j_1, j_2)$  می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$g_{j_1, j_2}(M) = p_{j_1, j_2}(J = |M|) + p_{j_1, j_2}(J = |M| + 1) \\ + p_{j_1, j_2}(J = |M| + 2) + \dots \quad (۷۶-۱۰)$$

بالعکس، می‌توان  $p_{j_1, j_2}(J)$  را برحسب  $g_{j_1, j_2}(M)$  به‌دست آورد

$$p_{j_1, j_2}(J) = g_{j_1, j_2}(M = J) - g_{j_1, j_2}(M = J + 1) \\ = g_{j_1, j_2}(M = -J) - g_{j_1, j_2}(M = -J - 1) \quad (۷۷-۱۰)$$

به‌این ترتیب، نتایج بخش  $۱۰-۳-۳$  به‌سادگی ما را قادر می‌سازند که مقادیر عدد کوانتومی  $J$  را که واقعاً در  $\mathcal{E}(j_1, j_2)$  اتفاق می‌افتند و تعداد زیرفضاهای ناوردا  $\mathcal{E}(k, J)$  وابسته به

آنها را تعیین کنیم. قبل از هر چیز، مسلماً داریم

$$p_{j_1, j_2}(J) = 0 \quad \text{به‌ازای} \quad J > j_1 + j_2 \quad (۷۸-۱۰)$$

زیرا به‌ازاء  $|M| > j_1 + j_2$  مقدار  $g_{j_1, j_2}(M)$  صفر است. به‌علاوه، بنابر (۷۱-۱۰) و (۷۲-۱۰) داریم

$$p_{j_1, j_2}(J = j_1 + j_2) = g_{j_1, j_2}(M = j_1 + j_2) = 1 \quad (۷۹-۱۰ الف)$$

$$\begin{aligned} p_{j_1, j_2}(J = j_1 + j_2 - 1) \\ = g_{j_1, j_2}(M = j_1 + j_2 - 1) - g_{j_1, j_2}(M = j_1 + j_2) = 1 \end{aligned} \quad (۷۹-۱۰ ب)$$

به‌این ترتیب، با روش تکرار، تمام مقادیر  $p_{j_1, j_2}(J)$  را به‌دست می‌آوریم

$$p_{j_1, j_2}(J = j_1 + j_2 - 2) = 1, \dots, \quad (۸۰-۱۰ الف)$$

$$\dots, p_{j_1, j_2}(J = j_1 - j_2) = 1 \quad (۸۰-۱۰ ب)$$

و بالاخره، طبق (۷۴-۱۰)

$$p_{j_1, j_2}(J) = 0 \quad \text{به‌ازای} \quad J < j_1 - j_2 \quad (۸۱-۱۰)$$

بنابراین، برای  $j_1$  و  $j_2$  معین، یعنی، در داخل یک فضای معین  $\mathcal{E}(j_1, j_2)$ ، ویژه‌مقدارهای  $J$  طوری هستند که<sup>۱</sup>

$$J = j_1 + j_2, \quad j_1 + j_2 - 1, \quad j_1 + j_2 - 2, \dots, |j_1 - j_2| \quad (۸۲-۱۰)$$

به هر یک از این مقادیر یک فضای ناوردای متفرد  $\mathcal{E}(J)$  وابسته است، به‌طوری که شاخص  $k$  که در (۶۶-۱۰) ظاهر می‌شود در واقع غیر لازم است. مخصوصاً، این بدان معنی است که اگر به  $J$  یک مقدار از مجموعه (۸۲-۱۰)، و به  $M$  مقداری سازگار با آن را، نسبت بدهیم، تنها فقط

۱. تاکنون، فرض کرده‌ایم  $j_2 \geq j_1$  باشد، اما به‌سادگی می‌توان این بحث را به مورد خلاف آن یعنی  $j_1 < j_2$  نیز تعمیم داد؛ آنچه لازم است انجام دهیم این است که جای شاخص ۱ و ۲ را عوض کنیم.

یک بردار در  $\mathcal{E}(j_1, j_2)$  با آن متناظر است: مشخص کردن  $J$  برای تعیین زیرفضای  $\mathcal{E}(J)$  کافی است، سپس با مشخص شدن  $M$  تنها فقط یک بردار در این زیرفضا تعریف می‌شود. به عبارت دیگر،  $J^z$  و  $J^x$  تشکیل یک مجموعه کامل از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاپذیر در  $\mathcal{E}(j_1, j_2)$  می‌دهند.

یادداشت:

می‌توان نشان داد که تعداد جفتهای  $(J, M)$  که در  $\mathcal{E}(j_1, j_2)$  یافت می‌شوند در واقع با تعداد ابعاد  $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$  این فضا برابر است. این تعداد (مثلاً اگر  $j_1 \geq j_2$  باشد) برابر است با

$$\sum_{J=j_1-j_2}^{j_1+j_2} (2J+1) \quad (۸۳-۱۰)$$

با قرار دادن

$$J = j_1 - j_2 + i \quad (۸۴-۱۰)$$

به راحتی می‌توان مجموع  $(۸۳-۱۰)$  را محاسبه کرد

$$\begin{aligned} \sum_{J=j_1-j_2}^{j_1+j_2} (2J+1) &= \sum_{i=0}^{2j_2} [2(j_1 - j_2 + i) + 1] \\ &= [2(j_1 - j_2) + 1](2j_2 + 1) + 2 \frac{2j_2(2j_2 + 1)}{2} \\ &= (2j_2 + 1)(2j_1 + 1) \end{aligned} \quad (۸۵-۱۰)$$

### ۱۰-۳-۴ ویژه‌بردارهای مشترک $J^z$ و $J^x$

ویژه‌بردارهای مشترک  $J^z$  و  $J^x$  متعلق به فضای  $\mathcal{E}(j_1, j_2)$  را با  $|J, M\rangle$  نمایش خواهیم داد. برای دقت بیشتر، باید مقادیر  $j_1$  و  $j_2$  در این نمادگذاری را یادآور شویم، اما آنها را صریحاً نخواهیم نوشت، زیرا این مقادیر با مقادیر  $j_1$  و  $j_2$  در بردارهای  $۱۰-۶۵$  ب که  $|J, M\rangle$  ترکیبهای خطی آنها هستند، یکسان است. البته، شاخصهای  $J$  و  $M$  معرف ویژه‌مقدارهای  $J^z$  و  $J^x$  هستند

$$J^z |J, M\rangle = J(J+1)\hbar^2 |J, M\rangle \quad (۱۰۶-الف)$$

$$J^x |J, M\rangle = M\hbar |J, M\rangle \quad (۱۰۶-ب)$$

و بردارهای  $|J, M\rangle$ ، مانند تمام بردارهای فضای  $\mathcal{E}(j_1, j_2)$ ، ویژه بردارهای  $J^2$  و  $J_z$  هستند. و ویژه مقدارهای متناظر با آنها به ترتیب عبارت‌اند از  $j_1(j_1 + 1)\hbar^2$  و  $j_2(j_2 + 1)\hbar^2$ .

الف) مورد خاص از دو اسپین  $1/2$

ابتدا، نشان خواهیم داد که چگونه کاربرد نتایج کلی مربوط به تکانه‌های زاویه‌ای، ما را به رابطه متناظر با بردارهای  $|S, M\rangle$ ، که در بخش  $10-2-3$  شرح آن گذشت، هدایت می‌کند. ضرورتی نخواهد داشت که ماتریس نماینده  $S^2$  را قطری کنیم. سپس با تعمیم این روش، بردارهای  $|J, M\rangle$  را برای مورد  $j_1$  و  $j_2$  دلخواه، به دست خواهیم آورد. (بخش  $10-3-4$ ج).

۱. زیرفضای  $\mathcal{E}(S = 1)$

کت  $|+, +\rangle$ ، در فضای حالت  $\mathcal{E}(1/2, 1/2) = \mathcal{E}$ ، تنها ویژه بردار  $S_z$  وابسته به  $M = 1$  است. این کت به خاطر جابه‌جایی پذیر بودن، و ناواکن بودن مقدار  $M = 1$ ، باید یک ویژه بردار  $S^2$  هم باشد (بخش  $9-3-D$  از فصل  $11$ ). بنا به استدلال بخش  $10-3-3$  الف، مقدار متناظر با  $S$  باید برابر  $1$  باشد. بنابراین، فاز بردار  $|S = 1, M = 1\rangle$  را می‌توانیم طوری انتخاب کنیم که

$$|1, 1\rangle = |+, +\rangle \quad (87-10)$$

سپس، به سادگی می‌توانیم سایر حالت‌های سه تایی را پیدا کنیم، زیرا از نظریه عمومی تکانه زاویه‌ای می‌دانیم که

$$\begin{aligned} S_-|1, 1\rangle &= \hbar\sqrt{1(1+1) - 1(1-1)}|1, 0\rangle \\ &= \hbar\sqrt{2}|1, 0\rangle \end{aligned} \quad (88-10)$$

در نتیجه

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{2}}S_-|+, +\rangle \quad (89-10)$$

برای محاسبه صریح  $|1, 0\rangle$  در پایه  $\{|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle\}$ ، کافی است به یاد بیاورید که تعریف  $(10-24)$  از اسپین کل  $S$  ایجاب می‌کند که

$$S_- = S_{1-} + S_{2-} \quad (90-10)$$

باشد. به این ترتیب داریم

$$\begin{aligned} |1, 0\rangle &= \frac{1}{\hbar\sqrt{2}}(S_{1-} + S_{2-})|+, +\rangle \\ &= \frac{1}{\hbar\sqrt{2}}[\hbar|-, +\rangle + \hbar|+, -\rangle] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|-, +\rangle + |+, -\rangle] \quad (91-10) \end{aligned}$$

دست آخر، می‌توانیم  $S_-$  را به  $|1, 0\rangle$ ، یعنی  $(S_{1-} + S_{2-})$  را به رابطه (91-10)، اعمال کنیم. از این عمل نتیجه می‌شود

$$\begin{aligned} |1, -1\rangle &= \frac{1}{\hbar\sqrt{2}}S_-|1, 0\rangle \\ &= \frac{1}{\hbar\sqrt{2}}(S_{1-} + S_{2-})\frac{1}{\sqrt{2}}[|-, +\rangle + |+, -\rangle] \\ &= \frac{1}{2\hbar}[\hbar|-, -\rangle + \hbar|-, -\rangle] \\ &= |-, -\rangle \quad (92-10) \end{aligned}$$

البته، این نتیجه آخر را می‌توانستیم مستقیماً، با استفاده از استدلال مشابهی که درباره  $|+, +\rangle$  انجام دادیم، نیز به دست بیاوریم. اما، روش محاسبه اخیر قدری نسبت به این روش (مستقیم) برتری دارد: این روش به ما امکان می‌دهد که طبق قراردادهای بیان شده در بخش ۳-۳ الف از فصل ۶، ضرایب فاز  $|1, 0\rangle$  و  $|1, -1\rangle$  را نسبت به ضریب فازی که در (87-10) برای  $|1, 1\rangle$  انتخاب کردیم، تعیین کنیم.

۲. حالت  $|S = 0, M = 0\rangle$

تنها بردار  $|S = 0, M = 0\rangle$ ، متعلق به زیرفضای  $\mathcal{E}(S = 0)$ ، تحت این شرط که باید بر سه بردار  $|1, M\rangle$  ای فوق متعامد باشد، با تقریب یک ضریب ثابت به دست می‌آید.

چون این بردار بر  $|+, +\rangle = |1, 1\rangle$  و  $|-, -\rangle = |1, -1\rangle$  متعامد است،  $|0, 0\rangle$  باید یک ترکیب خطی از  $|+, -\rangle$  و  $|-, +\rangle$  باشد

$$|0, 0\rangle = \alpha|+, -\rangle + \beta|-, +\rangle \quad (93-10)$$



که اگر

$$\langle 0, 0 | 0, 0 \rangle = |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (94-10)$$

باشد، بهنجار خواهد بود.

اکنون می‌خواهیم که حاصلضرب اسکالر آن با  $|1, 0\rangle$  (۹۱-۱۰) صفر باشد

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha + \beta) = 0 \quad (95-10)$$

به این صورت، ضرایب  $\alpha$  و  $\beta$  قرینه یکدیگر خواهند بود. این امر، با توجه به (۹۴-۱۰)، با تقریب یک ضریب فاز، ضرایب را مشخص می‌کند

$$\alpha = -\beta = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\chi} \quad (96-10)$$

که  $\chi$  یک عدد حقیقی است. اگر  $\chi$  را مساوی صفر بگیریم، نتیجه می‌شود

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+, -\rangle - |-, +\rangle] \quad (97-10)$$

بنابراین، چهار بردار  $|S, M\rangle$  را بدون اینکه مجبور به نوشتن صریح ماتریس معرف  $S^z$  در پایه  $\{|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle\}$  باشیم، محاسبه کرده‌ایم.

ب) حالت عمومی ( $j_1$  و  $j_2$  دلبخواه)

در بخش ۱۰-۳-۳ نشان دادیم که تجزیه  $\mathcal{E}(j_1, j_2)$  به مجموع مستقیم زیرفضاهای ناورای  $\mathcal{E}(J)$  به صورت زیر است

$$\mathcal{E}(j_1, j_2) = \mathcal{E}(j_1 + j_2) \oplus \mathcal{E}(j_1 + j_2 - 1) \oplus \dots \oplus \mathcal{E}(|j_1 - j_2|) \quad (98-10)$$

اکنون چگونگی تعیین بردارهای  $|J, M\rangle$  که این زیرفضاها را پدید می‌آورند، ملاحظه خواهیم کرد.

۱. زیرفضای  $\mathcal{E}(J = j_1 + j_2)$

در  $\mathcal{E}(j_1, j_2)$ ، کت  $|j_1, j_2; m_1 = j_1, m_2 = j_2\rangle$  تنها ویژه‌بردار  $J_z$  وابسته به

$M = j_1 + j_2$  است. چون  $J_z$  و  $J^2$  جابه‌جا می‌شوند، و مقدار  $M = j_1 + j_2$  واکن نیست،  $(j_1, j_2; m_1 = j_1, m_2 = j_2)$  باید یک ویژه‌بردار  $J^2$  نیز باشد. بر طبق (۹۸-۱۰)، مقدار متناظر با  $J$  فقط می‌تواند  $j_1 + j_2$  باشد. فاز بردار

$$|J = j_1 + j_2, M = j_1 + j_2\rangle$$

را می‌توان طوری انتخاب کرد که دانسته باشیم

$$|j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = |j_1, j_2; j_1, j_2\rangle \quad (۹۹-۱۰)$$

با اعمال مکرر عملگر  $J_-$  بر این عبارت، می‌توان دسته بردارهای  $|J, M\rangle$  را که برای آنها  $J = j_1 + j_2$  است، تکمیل کرد. بنابراین، مطابق با فرمولهای عمومی (۹۴-۱۰) از فصل ۶ داریم

$$J_- |j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = \hbar \sqrt{2(j_1 + j_2)} |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle \quad (۱۰۰-۱۰)$$

بنابراین، می‌توانیم با اثر عملگر  $J_- = J_{1-} + J_{2-}$  بر بردار  $|j_1, j_2; j_1, j_2\rangle$  بردار متناظر با  $J = j_1 + j_2$  و  $M = j_1 + j_2 - 1$  را محاسبه کنیم

$$\begin{aligned} |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle &= \frac{1}{\hbar \sqrt{2(j_1 + j_2)}} J_- |j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle \\ &= \frac{1}{\hbar \sqrt{2(j_1 + j_2)}} (J_{1-} + J_{2-}) |j_1, j_2; j_1, j_2\rangle \\ &= \frac{1}{\hbar \sqrt{2(j_1 + j_2)}} [\hbar \sqrt{2j_1} |j_1, j_2; j_1 - 1, j_2\rangle \\ &\quad + \hbar \sqrt{2j_2} |j_1, j_2; j_1, j_2 - 1\rangle] \quad (۱۰۱-۱۰) \end{aligned}$$

یعنی

$$\begin{aligned} |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle &= \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1, j_2; j_1 - 1, j_2\rangle \\ &\quad + \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1, j_2; j_1, j_2 - 1\rangle \quad (۱۰۲-۱۰) \end{aligned}$$

در واقع، ملاحظه می‌کنیم که به این طریق، یک ترکیب خطی از دو بردار پایه که منتسب به  $M = j_1 + j_2 - 1$  هستند به دست می‌آوریم؛ جالب توجه اینکه این ترکیب، مستقیماً بهنجار است.

اکنون این روش را تکرار می‌کنیم: با اعمال  $J_-$  بر دو طرف  $(10^2-10)$ ، (برای سمت راست، این عملگر را به صورت  $J_{1-} + J_{2-}$  می‌نویسیم)،  $(2 - j_1 - j_2, j_1 + j_2 + j_1)$  را می‌سازیم، و به همین ترتیب این عمل را ادامه می‌دهیم تا  $(-(j_1 + j_2), -(j_1 + j_2))$ ، که برابر با  $(-j_1, -j_2)$  است، به دست بیاید.

بنابراین روش محاسبه تعداد  $[2(j_1 + j_2) + 1]$  بردار اول پایه  $\{|J, M\rangle\}$  را که متناظر با  $J = j_1 + j_2$  و  $-(j_1 + j_2), \dots, j_1 + j_2 - 1, \dots, j_1 + j_2 - 1, \dots, j_1 + j_2 - 1, \dots, j_1 + j_2 - 1$  هستند و زیرفضای  $\mathcal{E}(J = j_1 + j_2)$  از  $\mathcal{E}(j_1, j_2)$  را پدید می‌آورند، پیدا کردیم.

## ۲. سایر زیرفضاهای $\mathcal{E}(J)$

حال، فضای  $\mathcal{S}(j_1 + j_2)$ ، مکمل  $\mathcal{E}(j_1 + j_2)$  در  $\mathcal{E}(j_1, j_2)$ ، را در نظر بگیرید. بنابر  $(10^1-98)$ ، می‌توان  $\mathcal{S}(j_1 + j_2)$  را به صورت زیر تفکیک کرد

$$\mathcal{S}(j_1 + j_2) = \mathcal{E}(j_1 + j_2 - 1) \oplus \mathcal{E}(j_1 + j_2 - 2) \oplus \dots \oplus \mathcal{E}(|j_1 - j_2|) \quad (10^3-10)$$

به این ترتیب می‌توانیم همان استدلالی را که در بخش  $10^3-3-10^4$  اعمال کردیم، به کار ببریم. در  $\mathcal{S}(j_1 + j_2)$ ، درجه واگنی  $g'_{j_1, j_2}(M)$  یک مقدار معین  $M$ ، به اندازه یک واحد از  $g_{j_1, j_2}(M)$  کوچکتر است، زیرا  $\mathcal{E}(j_1 + j_2)$  دارای تنها فقط یک بردار وابسته به این مقدار  $M$  است

$$g'_{j_1, j_2}(M) = g_{j_1, j_2}(M) - 1 \quad (10^4-10)$$

مخصوصاً، این بدان معنی است که،  $M = j_1 + j_2$  دیگر در  $\mathcal{S}(j_1 + j_2)$  وجود ندارد، و مقدار ماکزیموم جدید  $M = j_1 + j_2 - 1$  واگن نیست. از اینجا ملاحظه می‌کنیم که مانند بخش  $10^4-3-10^4$ ، بردار مربوط باید متناسب با  $(1 - j_1 - j_2, M = j_1 + j_2 - 1, |J = j_1 + j_2 - 1|)$  باشد. یافتن بسط این بردار در پایه  $\{j_1, j_2; m_1, m_2\}$  کار آسانی است، زیرا، با این مقدار  $M$  مطمئناً داریم

$$\begin{aligned} |j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle &= \alpha |j_1, j_2; j_1, j_2 - 1\rangle \\ &+ \beta |j_1, j_2; j_1 - 1, j_2\rangle \end{aligned} \quad (10^5-10)$$

که برای اطمینان از بهنجارش باید داشته باشیم

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (106-10)$$

این بردار همچنین باید بر  $(1 - j_1 + j_2, j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1)$  که متعلق به  $\mathcal{E}(j_1 + j_2)$  است و از رابطه  $(102-10)$  به دست می‌آید، عمود باشد. بنابراین، ضرایب  $\alpha$  و  $\beta$  باید در رابطه زیر صدق کنند

$$\alpha \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} + \beta \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} = 0 \quad (107-10)$$

روابط  $(106-10)$  و  $(107-10)$ ، ضرایب  $\alpha$  و  $\beta$  را با تقریب یک ضریب فاز تعیین می‌کنند.  $\alpha$  و  $\beta$  را حقیقی، و مثلاً  $\alpha$  را مثبت اختیار خواهیم کرد. با این قراردادها داریم

$$\begin{aligned} |j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle &= \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1, j_2; j_1, j_2 - 1\rangle \\ &\quad - \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1, j_2; j_1 - 1, j_2\rangle \end{aligned} \quad (108-10)$$

این بردار، اولین بردار یک دسته جدید است، که با  $J = j_1 + j_2 - 1$  مشخص می‌شود. نظیر بخش  $10-3-4$  ب-1، سایر بردارها را می‌توانیم با اعمال  $J_-$ ، به تعداد دفعات لازم، به دست بیاوریم. بنابراین، تعداد  $[2(j_1 + j_2 - 1) + 1]$  بردار  $|J, M\rangle$  متناظر با

$$J = j_1 + j_2 - 1 \text{ و } M = j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2, \dots, -(j_1 + j_2 - 1)$$

را که زیرفضای  $\mathcal{E}(J = j_1 + j_2 - 1)$  را پدید می‌آورند، به دست می‌آوریم.

حال، فضای  $\mathcal{S}(j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1)$ ، اضافی از مجموع مستقیم  $\mathcal{E}(j_1 + j_2) \oplus \mathcal{E}(j_1 + j_2 - 1)$  در  $\mathcal{E}(j_1, j_2)$ ، را در نظر می‌گیریم<sup>۱</sup>

$$\mathcal{S}(j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1) = \mathcal{E}(j_1 + j_2 - 2) \oplus \dots \oplus \mathcal{E}(|j_1 - j_2|) \quad (109-10)$$

۱. مسلماً، تنها وقتی  $\mathcal{S}(j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1)$  وجود دارد که  $2 - j_1 + j_2$  از  $|j_1 - j_2|$  کوچکتر نباشد.

در  $\mathcal{S}(j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1)$  هم واگنی هر مقدار از  $M$  نسبت به واگنی در  $\mathcal{S}(j_1 + j_2)$ ، به اندازه یک واحد کاهش می‌یابد. مخصوصاً مقدار ماکزیموم اکنون برابر  $M = j_1 + j_2 - 2$  است، و واگن نیست. بنابراین، بردار متناظر با  $\mathcal{S}(j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1)$ ، باید کافی است توجه کنیم که این بردار ترکیب خطی‌ای از سه بردار\* است. ضرایب این ترکیب خطی با این شرط سه‌گانه که بهنجار و بر  $(j_1 + j_2 - 2, j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1)$  و  $(j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2, j_1 + j_2 - 1)$  متعامد باشند، با تقریب یک ضریب فاز، تعیین می‌شوند. بالاخره، با استفاده از  $J$ ، سایر بردارهای این دسته سوم به دست می‌آید، و به این ترتیب،  $\mathcal{E}(j_1 + j_2 - 2)$  تعریف می‌شود.

این روش را می‌توان بدون هیچ اشکالی، تا در برگرفتن تمام مقادیر  $M$  بزرگتر یا مساوی  $|j_1 - j_2|$ ، [و در نتیجه، بر طبق (۱۰-۷۵)]، تمام مقادیر کوچکتر یا مساوی  $|j_1 - j_2|$  نیز ادامه داد. به این ترتیب، تمام بردارهای  $(J, M)$  مطلوب را می‌دانیم. این روش را در مکمل ۱ از فصل ۱۰ با دو مثال، روشن خواهیم ساخت.

### ج) ضرایب کلبش گوردن

در هر فضای  $\mathcal{E}(j_1, j_2)$ ، ویژه بردارهای  $J^2$  و  $J_z$ ، ترکیبهای خطی از بردارهای پایه  $\{|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\}$  اولیه‌اند

$$|J, M\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M \rangle \quad (10-11)$$

ضرایب  $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M \rangle$  این بسط را، ضرایب کلبش گوردن می‌نامند.

#### یادداشت:

برای دقت بیشتر، بردارهای  $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$  و  $|J, M\rangle$  را به ترتیب به صورت  $|k_1, k_2; j_1, j_2; J, M\rangle$  و  $|k_1, k_2; j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$  خواهیم نوشت [به این ترتیب، مقادیر  $k_1$  و  $k_2$ ، نظیر مقادیر  $j_1$  و  $j_2$ ، در دو طرف روابط (۱۰-۱۱) مشابه خواهند بود]. اما،  $k_1$  و  $k_2$  را در نمادهایی که معرف ضرایب کلبش گوردن هستند، نخواهیم نوشت، زیرا می‌دانیم که این ضرایب مستقل از  $k_1$  و  $k_2$  هستند (۱۰-۳-۲-ج).

برای ضرایب کلبش گوردن نمی‌شود یک عبارت عمومی به دست آورد، اما روش ارائه شده در

\*  $(j_1, j_2; j_1, j_2 - 1, j_2 - 1), (j_1, j_2; j_1 - 1, j_2 - 1), (j_1, j_2; j_1, j_2 - 2)$

بخش  $(10-3-4)$  محاسبه آنها را با روش تکرار برای هر مقدار  $j_1$  و  $j_2$ ، ممکن می‌سازد. برای کاربردهای عملی، جدولهای عددی ضرایب کلبش گوردن وجود دارند.

در واقع، برای تعیین منحصر به فرد ضرایب کلبش گوردن، ناگزیر از انتخاب تعداد معینی قراردادهای فاز هستیم. [وقتی روابط  $(10-99)$  و  $(10-108)$  را نوشتیم، این واقعیت را متذکر شدیم. ضرایب کلبش گوردن را همواره حقیقی انتخاب می‌کنیم. در این صورت انتخاب علامت در مورد بعضی از آنها صورت می‌گیرد (بدیهی است که علامتهای نسبی ضرایب موجود در بسط یک بردار  $|J, M\rangle$  مشخص‌اند، فقط علامت کلی این بسط را می‌توان به دلخواه تعیین کرد).

نتایج بخش  $10-3-4$  ب مؤید این هستند که تنها اگر

$$M = m_1 + m_2 \quad (10-111 \text{ الف})$$

$$|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2 \quad (10-111 \text{ ب})$$

باشد،  $(j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M)$  مخالف صفر است، که  $J$  از همان نوع (عدد صحیح یا نیمه صحیح)  $j_1 + j_2$  و  $|j_1 - j_2|$  است. شرط  $(10-111 \text{ ب})$ ، اغلب، "قاعده مثلثی" نامیده می‌شود: باید بتوان با سه پاره‌خط به طولهای  $j_1$ ،  $j_2$ ، و  $J$ ، یک مثلث تشکیل داد.

چون بردارهای  $|J, M\rangle$  همچنین یک پایه راست‌هنجار از فضای  $\mathcal{E}(j_1, j_2)$  تشکیل می‌دهند، عبارتهای عکس  $(10-111)$  را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | = \sum_{J=j_1-j_2}^{j_1+j_2} \sum_{M=-J}^J |J, M\rangle \langle J, M | j_1, j_2; m_1, m_2 \rangle \quad (10-112)$$

چون تمام ضرایب کلبش گوردن را حقیقی انتخاب کرده‌ایم، حاصلضربهای اسکالر موجود در  $(10-112)$  طوری هستند که

$$\langle J, M | j_1, j_2; m_1, m_2 \rangle = \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M \rangle \quad (10-113)$$

به این ترتیب، ضرایب کلبش گوردن ما را قادر به بیان بردارهای پایه قدیم  $\{|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\}$  برحسب بردارهای پایه جدید  $\{|J, M\rangle\}$  می‌کنند.

ضرایب کلبش گوردن دارای خصوصیات جالبی هستند، که برخی از آنها را در مکمل ۲ از فصل ۱۰ مطالعه خواهیم کرد.

مراجع برای مطالعه بیشتر

Messiah (1.17), chap. XIII, §V; Rose (2.19), chap. III. Edmonds (2.21), chaps. 3 and 6.

Relation with group theory: Meijer and Bauer (2.18), chap. 5, §5 and App. III of that chapter; Bacry (10.31), chap. 6; Wigner (2.23), chaps. 14 and 15.

Vectorial spherical harmonics: Edmonds (2.21), §5-10; Jackson (7.5), chap. 16; Berestetskii et al. (2.8), §§6 and 7; Akhiezer and Berestetskii (2.14), §4.

۱. مثالهایی از جمع تکانه‌های زاویه‌ای

۱. نتایج فصل ۱۰ را با ساده‌ترین مواردی که در این فصل دقیقاً بررسی نشدند، تشریح می‌کند: دو تکانه زاویه‌ای ۱، و یک تکانه زاویه‌ای صحیح  $l$  با یک اسپین  $1/2$ . به‌عنوان یک تمرین که روشهای جمع تکانه‌های زاویه‌ای را نشان می‌دهد توصیه می‌شود.

۲. ضرایب کلبش گوردن

۲ و ۳. مکملهای تکنیکی، به منظور اثبات بعضی نتایج مفید ریاضی؛ می‌توانند به‌عنوان مرجع مورد استفاده قرار گیرند.

۳. جمع هماهنگهای کروی

۲. مطالعه ضرایب کلبش گوردن، که اغلب در مسائل فیزیکی شامل تکانه زاویه‌ای و ناوردایی دورانی، ظاهر می‌شوند.

۳. اثبات یک عبارت مربوط به حاصلضرب هماهنگهای کروی؛ که برای برخی از مکملهای بعدی و تمرینات مفید است.

۴. عملگرهای برداری:

۴ و ۵. معرفی مفاهیم فیزیکی (مشاهده‌پذیرهای برداری، گشتاورهای چندقطبی) که در زمینه‌های بیشمار نقش مهمی ایفا می‌کنند.

قضیه ویگنر-اکارت

۵. گشتاورهای چندقطبی الکتریکی

۴. مطالعه عملگرهای برداری؛ اثبات قضیه ویگنر-اکارت که قواعد تناسب بین عناصر ماتریسی این عملگرها را برقرار می‌کند. نسبتاً جنبه نظری دارد ولی به‌خاطر کاربردهای بیشمار آن، توصیه می‌شود. در یک دوره فیزیک اتمی می‌تواند مفید باشد. (مدل برداری، محاسبه ضرایب لاندو و غیره).

۵. تعریف و خواص گشتاورهای چندقطبی الکتریکی یک سیستم کلاسیک یا کوانتومی؛ مطالعه قواعد گرینش آنها (این گشتاورهای چندقطبی غالباً در فیزیک اتمی و فیزیک هسته‌ای مورد استفاده قرار می‌گیرند). بحثی نسبتاً مشکل.



۶. تحول دو تکانه زاویه‌ای  $J_1$  و  $J_2$  جفت شده توسط یک برهم‌کنش  $aJ_1 \cdot J_2$

۶. می‌توان آن را به‌عنوان یک تمرین حل شده در نظر گرفت که مسئله‌ای را که برای مدل برداری اتم اساسی است، بررسی می‌کند: تحول زمانی دو تکانه زاویه‌ای  $J_1$  و  $J_2$  که توسط یک برهم‌کنش  $W = aJ_1 \cdot J_2$  جفت شده‌اند. این دیدگاه دینامیکی، نتایج فصل ۱۰ مربوط به ویژه‌حالت‌های  $W$  را کامل می‌کند. نسبتاً ساده.

۷. تمرینات ۷ تا ۱۰ از بقیه مشکل‌ترند. تمرینات ۷، ۸، ۹، تعمیم مکالمهای ۴ و ۵ از فصل ۱۰ هستند (مفهوم یک مؤلفه متعارف و مفهوم عملگر تانسوری ساده‌نشده، قضیه ویگنر-اکارت). تمرین ۱۰ پیوند دادن سه تکانه زاویه‌ای به روشهای مختلف را بررسی می‌کند.

# مکمل ۱

## مثالهایی از جمع تکانه‌های زاویه‌ای

۱. جمع  $1$  و  $1$   $j_1 = 1$  و  $j_2 = 1$

الف) زیرفضای  $\mathcal{E}(J = 2)$

ب) زیرفضای  $\mathcal{E}(J = 1)$

ج) بردار  $(J = 0, M = 0)$

۲. جمع یک تکانه زاویه‌ای مداری صحیح  $l$  و یک اسپین  $1/2$

الف) زیرفضای  $\mathcal{E}(J = l + 1/2)$

ب) زیرفضای  $\mathcal{E}(J = l - 1/2)$

برای روشن شدن روش عمومی جمع تکانه‌های زاویه‌ای که در فصل ۱۰ تشریح شد، در اینجا آن را در مورد دو مثال به‌کار می‌بریم.

۱. جمع  $1$  و  $1$   $j_1 = 1$  و  $j_2 = 1$

ابتدا موردی را که در آن  $1 = j_1 = j_2 = 1$  است در نظر بگیرید. این مورد، مثلاً یک سیستم دو ذره‌ای است که در آن تکانه‌های زاویه‌ای مداری هر دو برابر با  $1$  هستند. در این صورت، چون هر یک از دو ذره در یک حالت  $p$  قرار دارند، آن را "آرایش  $p^2$ " می‌نامیم.

فضای  $\mathcal{E}(1, 1)$  مورد نظر ما دارای  $3 \times 3 = 9$  بعد است. فرض می‌کنیم پایه متشکل از ویژه‌حالت‌های  $J_1^2, J_2^2, J_1 J_2$  و  $J_{1z}$  را بدانیم

$$\{|1, 1; m_1, m_2\rangle\}, \quad m_1, m_2 = 1, 0, -1 \quad (1)$$

می‌خواهیم پایه  $\{|J, M\rangle\}$  متشکل از ویژه‌بردارهای مشترک  $J_1^2, J_2^2, J_1 J_2$  و  $J_z$  را تعیین کنیم، که در آن  $J$  تکانه زاویه‌ای کل است.

بنابر بخش ۱-۳-۳ از فصل ۱۰، مقادیر ممکن عدد کوانتومی  $J$  عبارت‌اند از

$$J = 2, 1, 0 \quad (2)$$

از این رو، باید سه دسته بردار  $|J, M\rangle$  بسازیم، که به ترتیب شامل، پنج، سه و یک بردار از پایه جدید باشند.

الف) زیرفضای  $\mathcal{E}(J=2)$

کت  $|J=2, M=2\rangle$  را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$|2, 2\rangle = |1, 1; 1, 1\rangle \quad (3)$$

با اعمال  $J_-$  بر آن، بردار  $|J=2, M=1\rangle$  را به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} |2, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}\hbar} J_- |2, 2\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}\hbar} (J_{1-} + J_{2-}) |1, 1; 1, 1\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}\hbar} [\hbar\sqrt{2} |1, 1; 0, 1\rangle + \hbar\sqrt{2} |1, 1; 1, 0\rangle] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|1, 1; 1, 0\rangle + |1, 1; 0, 1\rangle] \end{aligned} \quad (4)$$

مجدداً از  $J_-$  برای محاسبه  $|J=2, M=0\rangle$  استفاده می‌کنیم. پس از یک محاسبه ساده، داریم

$$|2, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} [|1, 1; 1, -1\rangle + 2|1, 1; 0, 0\rangle + |1, 1; -1, 1\rangle] \quad (5)$$

سپس

$$|2, -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}} [|1, 1; 0, -1\rangle + |1, 1; -1, 0\rangle] \quad (6)$$

و بالاخره

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

ب) زیرفضای  $\mathcal{E}(J=1)$

اکنون به زیرفضای  $\mathcal{E}(J=1)$  می‌پردازیم. بردار  $|J=1, M=1\rangle$  باید ترکیب خطی‌ای از کتهای پایه  $|1, 1; 0, 1\rangle$  و  $|1, 1; 1, 0\rangle$  باشد (فقط آنهایی که  $M=1$  دارند)

$$|1, 1\rangle = \alpha|1, 1; 1, 0\rangle + \beta|1, 1; 0, 1\rangle \quad (8)$$

که

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (9)$$

لازمه متعامد بودن این بردار با  $|2, 1\rangle$  این است که [به فرمول (۴) رجوع کنید].

$$\alpha + \beta = 0 \quad (10)$$

$\alpha$  و  $\beta$  را حقیقی اختیار می‌کنیم، و بنا به قرارداد  $\alpha$  را مثبت می‌گیریم. تحت این شرایط

$$|1, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|1, 1; 1, 0\rangle - |1, 1; 0, 1\rangle] \quad (11)$$

با اعمال  $J_-$  ما بار دیگر  $|1, 0\rangle$  و  $|1, -1\rangle$  را به دست می‌آوریم. با استفاده از همان روش بالا، به سادگی خواهیم داشت

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|1, 1; 1, -1\rangle - |1, 1; -1, 1\rangle] \quad (12)$$

$$|1, -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|1, 1; 0, -1\rangle - |1, 1; -1, 0\rangle] \quad (13)$$

جالب توجه اینکه بسط (۱۲) شامل بردار  $|1, 1; 0, 0\rangle$  نیست، هر چند که این بردار متناظر با  $M=0$  نیز می‌باشد. برحسب اتفاق، ضرایب کلبش گوردن متناظر صفرند

$$\langle 1, 1; 0, 0 | 1, 0 \rangle = 0 \quad (14)$$

۱. به طور کلی، مؤلفه کت  $|J, J\rangle$  روی کت  $\langle j_1, m_1 = J - j_2, m_2 = j_1, m_2 \rangle$  همواره حقیقی و مثبت انتخاب می‌شود (مکمل ۲ از فصل ۱۰، بخش ۱۰-۲-۲).

ج) بردار  $(J = 0, M = 0)$

آنچه باقی می‌ماند، محاسبه آخرین بردار از پایه  $\{|J, M\rangle\}$ ، متناظر با  $J = M = 0$  است. این بردار، ترکیب خطی‌ای از سه کت پایه می‌باشد که برای آنها  $M = 0$  است.

$$|0, 0\rangle = a|1, 1; 1, -1\rangle + b|1, 1; 0, 0\rangle + c|1, 1; -1, 1\rangle \quad (15)$$

که

$$|a|^2 + |b|^2 + |c|^2 = 1 \quad (16)$$

این بردار باید بر  $|2, 0\rangle$  [فرمول (51)] و  $|1, 0\rangle$  [فرمول (12)]، نیز عمود باشد. از این مطلب دو شرط زیر حاصل می‌شوند

$$a + 2b + c = 0 \quad (الف 17)$$

$$a - c = 0 \quad (ب 17)$$

این روابط دلالت بر این دارند که

$$a = -b = c \quad (18)$$

بار دیگر،  $a$ ،  $b$ ، و  $c$  را حقیقی اختیار می‌کنیم و  $a$  را مثبت می‌گیریم (زیرنویس صفحه ۱۵۸). سپس با استفاده از (16) و (18) داریم

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}[|1, 1; 1, -1\rangle - |1, 1; 0, 0\rangle + |1, 1; -1, 1\rangle] \quad (19)$$

با این کار، ساختن پایه  $\{|J, M\rangle\}$  برای مورد  $j_1 = j_2 = 1$  کامل می‌شود.

یادداشت:

اگر مسئله فیزیکی مورد مطالعه، مربوط به یک آرایش  $p^2$  از یک سیستم دو ذره‌ای باشد، تابع موجها(ی) معرف حالت‌های پایه اولیه به شکل زیر خواهند بود

$$\langle r_1, r_2 | 1, 1; m_1, m_2 \rangle = R_{k_1, 1}(r_1) R_{k_2, 1}(r_2) Y_1^{m_1}(\theta_1, \varphi_1) Y_1^{m_2}(\theta_2, \varphi_2) \quad (20)$$

که  $\mathbf{r}_1(r_1, \theta_1, \varphi_1)$  و  $\mathbf{r}_2(r_2, \theta_2, \varphi_2)$  مکانهای دو ذره را نشان می‌دهند. از آنجا که توابع شعاعی مستقل از اعداد کوانتومی  $m_1$  و  $m_2$  هستند، ترکیبهای خطی‌ای که توابع وابسته به کتهای  $(J, M)$  را می‌دهند، فقط توابعی از وابستگی زاویه‌ای خواهند بود. به‌عنوان مثال، در نمایش  $\{|\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\rangle\}$ ، معادله (۱۹) را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \circ, \circ \rangle = R_{k_1, 1}(r_1) R_{k_2, 1}(r_2) \frac{1}{\sqrt{3}} [Y_1^1(\theta_1, \varphi_1) Y_1^{-1}(\theta_2, \varphi_2) - Y_1^0(\theta_1, \varphi_1) Y_1^0(\theta_2, \varphi_2) + Y_1^{-1}(\theta_1, \varphi_1) Y_1^1(\theta_2, \varphi_2)] \quad (21)$$

۲. جمع یک تکانه زاویه‌ای مداری صحیح  $l$  و یک اسپین  $1/2$   
 اکنون، جمع یک تکانه زاویه‌ای مداری (عدد صحیح  $l = j_1$ ) و یک اسپین  $1/2$  ( $j_2 = 1/2$ ) را در نظر بگیرید. به این مسئله، در مواردی که بخواهیم، مثلاً تکانه زاویه‌ای کل ذره‌ای با اسپین  $1/2$ ، نظیر یک الکترون، را مطالعه کنیم، برخورد می‌کنیم.  
 فضای  $\mathcal{E}(l, 1/2)$  مورد نظر ما در اینجا دارای  $2(2l+1)$  بعد است. از قبل، یک پایه از این فضا را می‌شناسیم<sup>۱</sup>

$$\{|l, 1/2; m, \varepsilon\rangle\} \text{ با } m = l, l-1, \dots, -l \text{ و } \varepsilon = \pm \quad (22)$$

که متشکل از ویژه‌حالت‌های مشاهده‌پذیرهای  $\mathbf{L}^2, \mathbf{L}_z, \mathbf{S}^2, \mathbf{S}_z$  است، که  $\mathbf{L}$  و  $\mathbf{S}$  تکانه‌های زاویه‌ای مداری و اسپین مورد مطالعه‌اند. می‌خواهیم ویژه‌بردارهای  $(J, M)$  متعلق به  $\mathbf{J}^2$  و  $\mathbf{J}_z$  را بسازیم، که  $\mathbf{J}$  تکانه زاویه‌ای کل سیستم است

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (23)$$

ابتدا، توجه کنید که اگر  $l$  برابر صفر باشد، حل مسئله واضح است. در این مورد به‌سادگی می‌توان نشان داد که بردارهای  $(\varepsilon, 1/2; \circ, \circ)$ ، ویژه‌بردارهای  $\mathbf{J}^2$  و  $\mathbf{J}_z$  با ویژه‌مقدارهایی نظیر  $J = 1/2$  و  $M = \varepsilon/2$  نیز هستند. اما، اگر  $l$  صفر نباشد، دو مقدار ممکن برای  $J$  وجود دارد

$$J = l + \frac{1}{2} \quad \text{و} \quad l - \frac{1}{2} \quad (24)$$

۱. اگر بخواهیم دقیقاً مطابق قرارداد فصل ۱۰ عمل کنیم، باید در کتهای پایه به‌جای  $\mathcal{E}$ ، مقدار  $\pm 1/2$  بنویسیم. اما در فصلهای ۴ و ۹ توافق کردیم که ویژه‌بردارهای  $S_z$  را در فضای حالت اسپین با  $(+)$  و  $(-)$  نشان دهیم.

الف) زیرفضای  $\mathcal{E}(J = l + 1/2)$

تعداد  $(2l + 2)$  بردار  $|J, M\rangle$  که پدیدآورنده زیرفضای  $\mathcal{E}(J = l + 1/2)$  هستند، با استفاده از روش کلی فصل ۱۰ به دست می‌آیند. قبل از هر چیز داریم

$$\left| l + \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2} \right\rangle = \left| l, \frac{1}{2}; l, + \right\rangle \quad (25)$$

با اعمال  $J_-$ ، حالت  $|l + 1/2, l - 1/2\rangle$  به دست می‌آید

$$\begin{aligned} \left| l + \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{1}{\hbar\sqrt{2l+1}} J_- \left| l + \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2} \right\rangle \\ &= \frac{1}{\hbar\sqrt{2l+1}} (L_- + S_-) \left| l, \frac{1}{2}; l, + \right\rangle \\ &= \frac{1}{\hbar\sqrt{2l+1}} \left[ \hbar\sqrt{2l} \left| l, \frac{1}{2}; l-1, + \right\rangle + \hbar \left| l, \frac{1}{2}; l, - \right\rangle \right] \\ &= \sqrt{\frac{2l}{2l+1}} \left| l, \frac{1}{2}; l-1, + \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \left| l, \frac{1}{2}; l, - \right\rangle \quad (26) \end{aligned}$$

مجدداً  $J_-$  را اعمال می‌کنیم. با یک محاسبه مشابه خواهیم داشت

$$\begin{aligned} \left| l + \frac{1}{2}, l - \frac{3}{2} \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \left[ \sqrt{2l-1} \left| l, \frac{1}{2}; l-2, + \right\rangle \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{2} \left| l, \frac{1}{2}; l-1, - \right\rangle \right] \quad (27) \end{aligned}$$

عمومی‌تر اینکه، بردار  $|l + 1/2, M\rangle$  ترکیب خطی‌ای از تنها دو بردار پایه وابسته به  $M$ :  $|l, 1/2; M - 1/2, -\rangle$  و  $|l, 1/2; M + 1/2, -\rangle$  خواهد بود (البته،  $M$  عدد نیمه صحیح است). با مقایسه (۲۵)، (۲۶)، و (۲۷) می‌توانیم حدس بزنیم که این ترکیب خطی باید به صورت

۱. برای پیدا کردن ضرایب عددی که در معادلات بعد ظاهر می‌شوند، می‌توان به آسانی از رابطه زیر استفاده کرد

$$j(j+1) - m(m-1) = (j+m)(j-m+1)$$

زیر باشد

$$\begin{aligned} \left| l + \frac{1}{2}, M \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} & \left[ \sqrt{l + M + \frac{1}{2}} \left| l, \frac{1}{2}; M - \frac{1}{2}, + \right\rangle \right. \\ & \left. + \sqrt{l - M + \frac{1}{2}} \left| l, \frac{1}{2}; M + \frac{1}{2}, - \right\rangle \right] \end{aligned} \quad (28)$$

با

$$M = l + \frac{1}{2}, \quad l - \frac{1}{2}, \quad l - \frac{3}{2}, \dots, -l + \frac{1}{2}, - \left( l + \frac{1}{2} \right) \quad (29)$$

با استدلال به روش بازگشتی، می‌توان نشان داد که رابطه (۲۸) درست است، زیرا از اعمال  $J_-$  به دو طرف آن داریم

$$\begin{aligned} \left| l + \frac{1}{2}, M - 1 \right\rangle &= \frac{1}{\hbar \sqrt{\left( l + M + \frac{1}{2} \right) \left( l - M + \frac{3}{2} \right)}} J_- \left| l + \frac{1}{2}, M \right\rangle \\ &= \frac{1}{\hbar \sqrt{\left( l + M + \frac{1}{2} \right) \left( l - M + \frac{3}{2} \right)}} \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \times \\ &\times \left[ \sqrt{l + M + \frac{1}{2}} \hbar \sqrt{\left( l + M - \frac{1}{2} \right) \left( l - M + \frac{3}{2} \right)} \left| l, \frac{1}{2}; M - \frac{3}{2}, + \right\rangle \right. \\ &+ \sqrt{l + M + \frac{1}{2}} \hbar \left| l, \frac{1}{2}; M - \frac{1}{2}, - \right\rangle \\ &+ \left. \left[ \sqrt{l - M + \frac{1}{2}} \hbar \sqrt{\left( l + M + \frac{1}{2} \right) \left( l - M + \frac{1}{2} \right)} \left| l, \frac{1}{2}; M - \frac{1}{2}, - \right\rangle \right] \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \left[ \sqrt{l + M - \frac{1}{2}} \left| l, \frac{1}{2}; M - \frac{3}{2}, + \right\rangle \right. \\ &+ \left. \sqrt{l - M + \frac{3}{2}} \left| l, \frac{1}{2}; M - \frac{1}{2}, - \right\rangle \right] \end{aligned} \quad (30)$$



که در واقع همان رابطه (۲۸) است که در آن  $M$  به  $M - 1$  تبدیل شده است.

ب) زیرفضای  $\mathcal{E}(J = l - 1/2)$

اکنون سعی می‌کنیم رابطه‌ای برای  $2l$  بردار  $|J, M\rangle$  متناظر با  $J = l - 1/2$  پیدا کنیم. بردار متناظر با مقدار ماکزیموم  $M$ ، یعنی  $l - 1/2$ ، ترکیب خطی بهنجاری از  $|l, 1/2; l - 1, +\rangle$  و  $|l, 1/2; l, -\rangle$  است، و باید بر  $|l + 1/2, l - 1/2\rangle$  عمود باشد [فرمول (۲۶)]. با انتخاب یک عدد حقیقی و مثبت برای ضریب  $|l, 1/2; l, -\rangle$  (زیرنویس صفحه ۱۵۸)، به سادگی داریم

$$\left|l - \frac{1}{2}, l - \frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \left[ \sqrt{2l} \left|l, \frac{1}{2}; l, -\right\rangle - \left|l, \frac{1}{2}; l - 1, +\right\rangle \right] \quad (31)$$

عملگر  $J_-$  امکان می‌دهد تا متوالیاً تمام بردارهای دیگر این دسته را که با  $J = l - 1/2$  مشخص می‌شوند، به دست بیاوریم. چون به ازاء یک مقدار معین  $M$ ، فقط دو بردار پایه وجود دارد، و چون  $|l - 1/2, M\rangle$  بر  $|l + 1/2, M\rangle$  عمود است، با توجه به رابطه (۲۸) انتظار می‌رود که

$$\left|l - \frac{1}{2}, M\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \left[ \sqrt{l+M+\frac{1}{2}} \left|l, \frac{1}{2}; M+\frac{1}{2}, -\right\rangle - \sqrt{l-M+\frac{1}{2}} \left|l, \frac{1}{2}; M-\frac{1}{2}, +\right\rangle \right] \quad (32)$$

به ازاء

$$M = l - \frac{1}{2}, l - \frac{3}{2}, \dots, -l + \frac{3}{2}, -\left(l - \frac{1}{2}\right) \quad (33)$$

با استدلالی مشابه استدلال بخش ۲-الف، این فرمول را نیز می‌توان به روش بازگشتی اثبات کرد. یادداشتها:

۱. حالت‌های  $|l, 1/2; m, \varepsilon\rangle$  از یک ذره با اسپین  $1/2$  را می‌توان با اسپینورهای دو مؤلفه‌ای

زیر، نمایش داد

$$[\psi_{l, \frac{1}{2}; m, +}](\mathbf{r}) = R_{k,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (34\text{الف})$$

$$[\psi_{l, \frac{1}{2}; m, -}](\mathbf{r}) = R_{k,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (34\text{ب})$$

در این صورت، محاسبات قبلی نشان می‌دهند که اسپینورهای متناظر با حالت‌های  $|J, M\rangle$  را می‌توانیم به صورت زیر بنویسیم

$$[\psi_{l+\frac{1}{2}, M}](\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} R_{k,l}(r) \begin{pmatrix} \sqrt{l+M+\frac{1}{2}} Y_l^{M-1/2}(\theta, \varphi) \\ \sqrt{l-M+\frac{1}{2}} Y_l^{M+1/2}(\theta, \varphi) \end{pmatrix} \quad (\text{الف } 35)$$

$$[\psi_{l-\frac{1}{2}, M}](\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} R_{k,l}(r) \begin{pmatrix} -\sqrt{l-M+\frac{1}{2}} Y_l^{M-1/2}(\theta, \varphi) \\ \sqrt{l+M+\frac{1}{2}} Y_l^{M+1/2}(\theta, \varphi) \end{pmatrix} \quad (\text{ب } 35)$$

۲. در مورد خاص  $l=1$ ، از فرمول‌های (۲۵)، (۲۸)، (۳۱)، و (۳۲) داریم

$$\begin{aligned} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle &= \left| 1, \frac{1}{2}; 1, + \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} \left| 1, \frac{1}{2}; 0, + \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} \left| 1, \frac{1}{2}; 1, - \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left| 1, \frac{1}{2}; -1, + \right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} \left| 1, \frac{1}{2}; 0, - \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle &= \left| 1, \frac{1}{2}; -1, - \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{الف } 36)$$

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} \left| 1, \frac{1}{2}; 1, - \right\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} \left| 1, \frac{1}{2}; 0, + \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left| 1, \frac{1}{2}; 0, - \right\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} \left| 1, \frac{1}{2}; -1, + \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{ب } 36)$$

مراجع برای مطالعه بیشتر

Addition of an angular momentum  $l$  and an angular momentum  $S = 1$ : see "vectorial spherical harmonics" in the references of chapter X.

## مکمل ۲

### ضرایب کلبش گوردن

۱. خواص عمومی ضرایب کلبش گوردن

الف) قواعد گزینش

ب) روابط تعامد

ج) روابط بازگشتی

۲. قراردادهای فاز. حقیقی بودن ضرایب کلبش گوردن

الف) ضرایب  $(J, J | j_1, j_2; m_1, m_2)$ ؛ فاز برای کت  $(J, J)$

ب) سایر ضرایب کلبش گوردن

۳. چند رابطه مفید

الف) علامتهای بعضی از ضرایب

ب) تغییر در ترتیب  $j_1$  و  $j_2$

ج) تغییر علامت  $M, m_1$  و  $m_2$

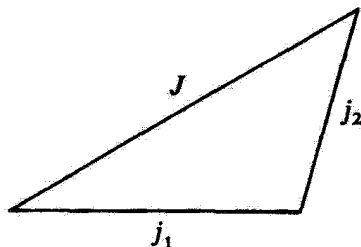
د) ضرایب  $(j, j; m, -m | 0, 0)$

ضرایب کلبش گوردن در فصل ۱۰ معرفی شدند [رابطه (۱۰-۱۱)]: این ضرایب عبارت‌اند از ضرایب  $(J, M | j_1, j_2; m_1, m_2)$  که در بسط کت  $(J, M)$  بر پایه  $\{|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\}$  ظاهر می‌شوند

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

در این مکمل، بعضی از خواص ضرایب کلبش گوردن را که در فصل ۱۰ ذکر کردیم، به دست خواهیم آورد.

توجه کنید که، برای تعریف کامل  $(j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M)$ ، معادله (۱) به تنهایی کافی نیست. بردار بهنجار  $(J, M)$ ، فقط با تقریب یک ضریب فاز، توسط ویژه‌مقدارهای مربوط  $J(J+1)\hbar^2$  و  $M\hbar$  مشخص می‌شود، و یک قرارداد فاز باید پذیرفته شود، تا تعریف کامل گردد. در فصل ۱۰، از عمل عملگرهای  $J_+$  و  $J_-$  استفاده کردیم تا فاز نسبی تعداد  $(2J+1)$  کت  $(J, M)$  وابسته به یک مقدار  $J$  را مشخص کنیم. در این مکمل، این انتخاب فاز را با پذیرفتن یک قرارداد برای



شکل ۱ قاعدهٔ گزینش مثلثی: ضریب  $(j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M)$  فقط وقتی می‌تواند مخالف صفر باشد که بتوان با سه پاره‌خط به طولهای  $j_1$ ،  $j_2$  و  $J$  یک مثلث تشکیل داد.

فاز کتهای  $(J, J)$ ، کامل خواهیم کرد. به این ترتیب می‌توان نشان داد که تمام ضرایب کلبش گوردن حقیقی‌اند.

با این همه، قبل از بحث در بارهٔ مسئلهٔ انتخاب فاز برای  $(j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M)$ ، که در بخش ۲ خواهد آمد، ابتدا در بخش ۱، بعضی از مفیدترین ویژگیهای این ضرایب را که مستقل از این قرارداد فاز هستند، مطالعه خواهیم کرد. و بالاخره، در بخش ۳ روابط متعددی را که در سایر مکملها مورد استفاده قرار خواهند گرفت، ارائه می‌کنیم.

## ۱. خواص عمومی ضرایب کلبش گوردن

### الف) قواعد گزینش

دو قاعدهٔ گزینش مهم، که مستقیماً از نتایج فصل ۱<sup>۰</sup> مربوط به جمع تکرانه‌های زاویه‌ای ناشی می‌شوند، قبلاً در این فصل داده شده‌اند [روابط (۱۰-۱۱ الف) و (۱۰-۱۱ ب)]. در اینجا فقط آنها را دوباره بیان می‌کنیم، اگر دو شرط

$$M = m_1 + m_2 \quad (۲)$$

$$|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2 \quad (۳ الف)$$

توأمأً برقرار نباشند، ضریب کلبش گوردن  $(j_1, j_2; m_1, m_2 | J < M)$  الزاماً صفر خواهد بود. نامساوی (۳ الف)، اغلب "قاعدهٔ گزینش مثلثی" نامیده می‌شود، زیرا به معنای این است که با سه پاره‌خط به طولهای  $j_1$ ،  $j_2$  و  $J$  می‌توان یک مثلث تشکیل داد (شکل ۱). بنابراین، این سه

عدد در اینجا نقشهای متقارنی ایفا می‌کنند، و (۳الف) را می‌توان به صورت زیر، نیز نوشت

$$|J - j_1| \leq j_2 \leq J + j_1 \quad (3\text{ب})$$

یا

$$|J - j_2| \leq j_1 \leq J + j_2 \quad (3\text{ج})$$

به علاوه، خواص عمومی تکانه زاویه‌ای ایجاب می‌کند که کت  $(J, M)$ ، و در نتیجه، ضریب  $(J, M; m_1, m_2; j_1, j_2)$ ، تنها وقتی وجود داشته باشد که  $M$  یکی از مقادیر

$$M = J, J - 1, J - 2, \dots, -J \quad (4\text{الف})$$

را بپذیرد. به طور مشابه لازم است که

$$m_1 = j_1, j_1 - 1, \dots, -j_1 \quad (4\text{ب})$$

$$m_2 = j_2, j_2 - 1, \dots, -j_2 \quad (4\text{ج})$$

در غیر این صورت، ضرایب کلبش گوردن تعریف شده نیستند. ولی در ادامه مطلب، بهتر است فرض کنیم که این ضرایب برای تمام مقادیر  $m_1, m_2$  و  $M$ ، وجود دارند. اما اگر حداقل یکی از شرایط (۴) برقرار نباشد تمام ضرایب صفر خواهند بود. بنابراین، این روابط نقش قواعد گزینش جدیدی را برای ضرایب کلبش گوردن ایفا می‌کنند.

ب) روابط تعامد

با قرار دادن رابطه بستاری<sup>۱</sup>

$$\sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2; m_1, m_2| = 1 \quad (5)$$

در رابطه تعامد برای کتهای  $(J, M)$

$$\langle J, M | J', M' \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \quad (6)$$

۱. این رابطه بستاری برای یک زیرفضای معین  $\mathcal{E}(k_1, k_2; j_1, j_2)$  معتبر است (فصل ۱۰، بخش ۱۰-۳-۲).

خواهیم داشت

$$\sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \langle J, M | j_1, j_2; m_1, m_2 \rangle \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J', M' \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \quad (\text{الف})$$

بعداً خواهیم دید، [رابطه (۱۸ ب)]، ضرایب کلبش گوردن حقیقی‌اند، و در نتیجه می‌توان رابطه فوق را به صورت زیر نوشت

$$\sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M \rangle \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J', M' \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \quad (\text{ب})$$

به این ترتیب، این "رابطه تعامد" برای ضرایب کلبش گوردن به دست می‌آید. علاوه بر این، توجه داریم که، در واقع عمل جمع بر روی یک شاخص انجام می‌شود؛ برای اینکه ضرایب سمت چپ معادله بالا مخالف صفر باشند، باید بین  $m_1$  و  $m_2$  رابطه (۲) برقرار باشد. همین‌طور، رابطه بستاری

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{M=-J}^J |J, M\rangle \langle J, M| = 1 \quad (\text{۸})$$

را در رابطه تعامد از کتهای  $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$  قرار می‌دهیم، نتیجه می‌شود

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{M=-J}^J \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M \rangle \langle J, M | j_1, j_2; m'_1, m'_2 \rangle = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} \quad (\text{الف})$$

یعنی، با توجه به (۱۸ ب)

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{M=-J}^J \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M \rangle \langle j_1, j_2; m'_1, m'_2 | J, M \rangle = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} \quad (\text{ب})$$

بار دیگر، عمل جمع فقط روی یک شاخص انجام می‌شود؛ چون  $M = m_1 + m_2$  است، جمع‌بندی بر روی  $M$ ، به یک تک جمله خلاصه می‌شود.

ج) روابط بازگشتی

در این بخش، از این واقعیت که کتهای  $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$  یک پایهٔ متعارف را تشکیل می‌دهند، استفاده خواهیم کرد. بنابراین

$$J_{1\pm}|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = \hbar\sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1 \pm 1)}|j_1, j_2; m_1 \pm 1, m_2\rangle$$

$$J_{2\pm}|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = \hbar\sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2 \pm 1)}|j_1, j_2; m_1, m_2 \pm 1\rangle \quad (10)$$

همچنین، کتهای  $|J, M\rangle$  در روابط زیر صدق می‌کنند

$$J_{\pm}|J, M\rangle = \hbar\sqrt{J(J+1) - M(M \pm 1)}|J, M \pm 1\rangle \quad (11)$$

از این رو، عملگر  $J_-$  را بر رابطهٔ (۱) اعمال می‌کنیم. چون  $J_- = J_{1-} + J_{2-}$  است، (اگر  $M > -J$  باشد)، داریم

$$\sqrt{J(J+1) - M(M-1)}|J, M-1\rangle =$$

$$\sum_{m'_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m'_2=-j_2}^{j_2} \langle j_1, j_2; m'_1, m'_2 | J, M \rangle$$

$$\times [\sqrt{j_1(j_1+1) - m'_1(m'_1-1)}|j_1, j_2; m'_1-1, m'_2\rangle$$

$$+ \sqrt{j_2(j_2+1) - m'_2(m'_2-1)}|j_1, j_2; m'_1, m'_2-1\rangle] \quad (12)$$

با ضرب کردن این رابطه در "برای"  $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 |$  خواهیم داشت

$$\sqrt{J(J+1) - M(M-1)}\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M-1 \rangle$$

$$= \sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1+1)}\langle j_1, j_2; m_1+1, m_2 | J, M \rangle$$

$$+ \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2+1)}\langle j_1, j_2; m_1, m_2+1 | J, M \rangle \quad (13)$$

اگر مقدار  $M$  مساوی با  $-J$  باشد، داریم  $\langle J, -J | J, -J \rangle = 1$  و اگر قرارداد بخش ۱ ب را، که بنا بر آن برای  $|M| > J$  مقدار  $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M \rangle$  صفر است، مورد استفاده قرار دهیم رابطهٔ (۱۳) برقرار می‌ماند.

به همین ترتیب، اثر عملگر  $J_+ = J_{1+} + J_{2+}$  بر رابطه (۱) منجر به رابطه زیر می شود

$$\begin{aligned} & \sqrt{J(J+1) - M(M+1)} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M+1 \rangle \\ &= \sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1-1)} \langle j_1, j_2; m_1-1, m_2 | J, M \rangle \\ &+ \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2-1)} \langle j_1, j_2; m_1, m_2-1 | J, M \rangle \quad (14) \end{aligned}$$

(اگر  $M = J$  باشد، طرف چپ این رابطه صفر است)؛ (۱۳) و (۱۴) روابط بازگشتی برای ضرایب کلبش گوردن هستند.

## ۲. قراردادهای فاز. حقیقی بودن ضرایب کلبش گوردن

همان طور که دیدیم، روابط (۱۲) فازهای نسبی کتهای  $|J, M\rangle$  متناظر با یک مقدار  $J$  را تعیین می کنند. برای کامل کردن تعریف ضرایب کلبش گوردن موجود در (۱)، باید فاز کتهای گوناگون  $|J, J\rangle$  را انتخاب کنیم. برای این کار، ابتدا چند ویژگی از ضرایب  $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, J \rangle$  را مطالعه می کنیم.

### الف) ضرایب $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, J \rangle$ ؛ فاز برای کت $|J, J\rangle$

در ضریب  $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, J \rangle$ ، ماکزیموم مقدار  $m_1$  عبارت است از  $j_1 = m_1$ . بنابراین، طبق قاعده گزینش (۲)،  $m_2$  مساوی است با  $J - j_1$  [که بنابر (۳) قدرمطلق آن خیلی کمتر از  $j_2$  است]. هر بار که  $m_1$  از مقدار ماکزیمومش، یعنی  $j_1$ ، به اندازه یک واحد کاهش می یابد،  $m_2$  افزایش پیدا می کند تا اینکه به مقدار ماکزیموم خود، یعنی  $j_2 = m_2$  برسد [در این صورت،  $m_1$  برابر با  $J - j_2$  است، که طبق (۳) قدرمطلق آن خیلی کمتر از  $j_1$  است]. بنابراین، از دیدگاه نظری، تعداد  $(j_1 + j_2 - J + 1)$  ضریب کلبش گوردن غیر صفر  $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, J \rangle$  می تواند وجود داشته باشد. می خواهیم نشان دهیم که، در واقع هیچ کدام از آنها هرگز صفر نخواهد بود.

اگر در (۱۴)، قرار بدهیم  $M = J$ ، داریم

$$\langle j_1, j_2; m_1-1, m_2 | J, J \rangle = -\sqrt{\frac{j_2(j_2+1) - m_2(m_2-1)}{j_1(j_1+1) - m_1(m_1-1)}} \langle j_1, j_2; m_1, m_2-1 | J, J \rangle \quad (15)$$

رادیکال طرف راست رابطه فوق، مادامی که ضرایب کلبش گوردن موجود در این رابطه در قواعد (۴) و (۴) صدق کنند، هرگز نه صفر خواهد شد و نه نامتناهی. بنابراین، رابطه (۱۵) نشان می دهد که اگر  $\langle j_1, j_2; j_1, J - j_1 | J, J \rangle$  مساوی صفر باشد،  $\langle j_1, j_2; j_1-1, J - j_1 + 1 | J, J \rangle$  نیز صفر خواهد بود،



همچنین تمام ضرایب بعدی به صورت  $\langle j_1, j_2; m_1, J - m_1 | J, J \rangle$  می‌باشند. اما، این امر غیرممکن است، زیرا کت  $\langle J, J \rangle$  که پنج‌جاری است، نمی‌تواند صفر باشد. از این رو، تمام ضرایب  $\langle j_1, j_2; m_1, J - m_1 | J, J \rangle$  (به‌ازاء  $j_1 \geq m_1 \geq J - j_2$ ) مخالف صفرند.

مخصوصاً، ضریب  $\langle j_1, j_2; j_1, J - j_1 | J, J \rangle$ ، که در آن مقدار ماکزیموم خود را دارد، صفر نیست. برای تعیین فاز کت  $\langle J, J \rangle$ ، لازم است که این ضریب در شرط زیر صدق کند.

$$(16) \quad \langle j_1, j_2; j_1, J - j_1 | J, J \rangle \quad \text{حقیقی و مثبت}$$

در این صورت، رابطه (۱۵)، با روش بازگشتی، می‌رساند که کلیه ضرایب

$$\langle j_1, j_2; m_1, J - m_1 | J, J \rangle$$

حقیقی هستند [علامتشان  $(-1)^{j_1 - m_1}$  است].

یادداشت:

قرارداد فاز انتخابی برای کت  $\langle J, J \rangle$  به دو تکانه زاویه‌ای  $J_1$  و  $J_2$  نقشهای نامتقارن می‌بخشد. در واقع، این بستگی به ترتیب قرار گرفتن اعداد کوانتومی  $j_1$  و  $j_2$  در ضرایب کلبش گوردن دارد: اگر جای  $j_1$  و  $j_2$  عوض شود، فاز کت  $\langle J, J \rangle$  توسط شرط زیر تعیین می‌گردد

$$(17) \quad \langle j_2, j_1; j_2, J - j_2 | J, J \rangle \quad \text{حقیقی و مثبت}$$

که الزاماً، با فرض پیشین، (۱۶) معادل است [ (۱۶) و (۱۷) ممکن است برای کت  $\langle J, J \rangle$  فازهای متفاوتی تعریف کنند]. در بخش ۳ به این نکته خواهیم گشت. ■

ب) سایر ضرایب کلبش گوردن

از رابطه (۱۳) می‌توان، تمام ضرایب  $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, J - 1 \rangle$  و بعد تمام ضرایب  $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, J - 2 \rangle$ ، و غیره، را برحسب  $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, J \rangle$  بیان کرد. این رابطه، که در آن هیچ عدد موهومی دخالت ندارد، ایجاب می‌کند که کلیه ضرایب کلبش گوردن حقیقی باشند

$$(18 \text{ الف}) \quad \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M \rangle^* = \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M \rangle$$

که می‌توان آن را به صورت زیر نیز نوشت

$$\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M \rangle = \langle J, M | j_1, j_2; m_1, m_2 \rangle \quad (۱۸ ب)$$

اما، علامتهای  $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M \rangle$  به ازاء  $M \neq J$ ، از قاعده ساده‌ای تبعیت نمی‌کنند.

### ۳. چند رابطه مفید

در این بخش، به ارائه چند رابطه مفید، که روابط داده شده در بخش ۱ را تکمیل می‌کنند، می‌پردازیم. اثبات این روابط را، با بررسی علامتهای تعدادی از ضرایب کلبش گوردن، آغاز می‌کنیم.

الف) علامتهای بعضی از ضرایب

$$۱. \text{ ضرایب } \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1 + j_2, M \rangle$$

قرارداد (۱۶) ایجاب می‌کند که ضریب  $\langle j_1, j_2; j_1, j_2 | j_1 + j_2, j_1 + j_2 \rangle$  حقیقی و مثبت، و به علاوه برابر با ۱ باشد (فصل ۱۰، بخش ۱۰-۳-۴-ب-۱). با قرار دادن  $M = J = j_1 + j_2$  در (۱۳)، ملاحظه می‌کنیم که ضرایب  $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1 \rangle$  مثبت‌اند. سپس با روش بازگشتی، به سادگی ثابت می‌شود که

$$\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1 + j_2, M \rangle \geq 0 \quad (۱۹)$$

۲. ضرایبی که در آنها مقدار ماکزیموم خود را دارد

ضریب  $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M \rangle$  را در نظر بگیرید. از جنبه نظری، مقدار ماکزیموم  $m_1$  مساوی است با  $j_1 = m_1$ . اما، در این صورت داریم  $m_2 = M - j_1$ ، که بنا بر (۴ج)، تنها هنگامی ممکن است که  $M - j_1 \geq -j_2$  باشد، یعنی

$$M \geq j_1 - j_2 \quad (۲۰)$$

اگر، از طرف دیگر

$$M \leq j_1 - j_2 \quad (۲۱)$$

باشد، مقدار ماکزیموم  $m_1$ ، مربوط به مقدار مینیموم  $m_2 = -j_2$  خواهد بود، و بنابراین برابر است با  $m_1 = M + j_2$ .

حال نشان می‌دهیم که کلیه ضرایب کلبش گوردن که برای آنها مقدار ماکزیموم خود را دارد، غیرصفر و مثبت‌اند. برای این کار، در (۱۳)، قرار می‌دهیم  $m_1 = j_1$ ، داریم

$$\sqrt{J(J+1) - M(M-1)} \langle j_1, j_2; j_1, m_2 | J, M-1 \rangle$$

$$= \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2+1)} \langle j_1, j_2; j_1, m_2+1 | J, M \rangle \quad (22)$$

با استفاده از این رابطه، استدلالی به روش بازگشتی با شروع از (۱۶) نشان می‌دهد که همه ضرایب  $\langle j_1, j_2; j_1, m_2 | J, M-1 \rangle$  مثبت‌اند [و اگر  $M$  در رابطه (۲۰) صدق کند، غیر صفر است]. همین طور با قرار دادن  $m_2 = -j_2$  در رابطه (۱۴)، می‌توانیم ثابت کنیم که همه ضرایب  $\langle j_1, j_2; j_1, m_2 | J, M \rangle$  مثبت‌اند [اگر  $M$  در (۲۱) صدق کند].

۳. ضرایب  $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, J \rangle$  و  $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, -J \rangle$

در بخش ۲ الف دیدیم که علامت  $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, J \rangle$  برابر با  $(-1)^{j_1 - m_1}$  است. به‌ویژه علامت  $\langle j_1, j_2; j_1 - j_2, j_2 | J, J \rangle$  برابر با  $(-1)^{j_1 + j_2 - 1}$  است.

$$\langle j_1, j_2; j_1 - j_2, j_2 | J, J \rangle = (-1)^{j_1 + j_2 - J} \quad (23)$$

برای تعیین علامت  $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, -J \rangle$ ، می‌توانیم در (۱۳)، قرار دهیم  $M = -J$  که در این صورت طرف چپ این معادله صفر می‌شود. بنابراین، ملاحظه می‌کنیم که هر گاه  $m_1$  (یا  $m_2$ ) به اندازه  $\pm 1$  تغییر کند، علامت  $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, -J \rangle$  تغییر می‌کند. چون بنابر قسمت ۲ مقدار  $\langle j_1, j_2; j_2 - J, j_2 | J, -J \rangle$  مثبت است، نتیجه می‌شود که علامت  $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, -J \rangle$  برابر با  $(-1)^{m_2 + j_2}$  است، و بخصوص علامت  $\langle j_1, j_2; j_1 - j_2, -J + j_1 | J, -J \rangle$  می‌شود

$$\langle j_1, j_2; j_1 - j_2, -J + j_1 | J, -J \rangle = (-1)^{j_1 + j_2 - J} \quad (24)$$

ب) تغییر در ترتیب  $j_1$  و  $j_2$

طبق قراردادهای انتخابی، فاز برای کت  $|J, J\rangle$  به ترتیب قرار گرفتن دو تکانه زاویه‌ای  $j_1$  و  $j_2$  در ضرایب کلبش گوردن، بستگی دارد (یادداشت بخش ۲ الف). اگر این ترتیب به صورت  $j_1$  و  $j_2$  باشد، مؤلفه  $\langle J, J |$  در امتداد  $\langle j_1, j_2; j_1, j_2 | J, J \rangle$  مثبت است، و می‌رساند که علامت این مؤلفه در امتداد  $\langle j_1, j_2; j_2 - j_2, j_2 | J, J \rangle$  همان طوری که در (۲۳) مشخص شده، عبارت است از  $(-1)^{j_1 + j_2 - J}$ . از طرف دیگر، اگر ترتیب  $j_2$  و  $j_1$  را انتخاب کنیم، رابطه (۱۷) نشان می‌دهد که مؤلفه اخیر مثبت است. بنابراین، اگر جای  $j_1$  و  $j_2$  را عوض کنیم، کت  $|J, J\rangle$  در  $(-1)^{j_1 + j_2 - J}$  ضرب می‌شود. همین مطلب در مورد کتهای  $|J, M\rangle$  هم، که از اثر  $J_-$  بر  $|J, J\rangle$ ، به طریقی‌ای که در آن ترتیب  $j_1$  و  $j_2$  نقشی ندارد، به دست می‌آیند، درست است. بالاخره، تعویض  $j_1$  و  $j_2$  منجر به رابطه زیر می‌شود

$$\langle j_2, j_1; m_2, m_1 | J, M \rangle = (-1)^{j_1 + j_2 - J} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M \rangle \quad (25)$$

ج) تغییر علامت  $M$ ،  $m_1$  و  $m_2$

در فصل ۱<sup>o</sup> و در این مکمل، تمام کتهای  $|J, M\rangle$  (و بنابراین، ضرایب کلیش گوردن) را از کتهای  $|J, J\rangle$  با اثر عملگر  $J_-$  ساختیم. می‌توانیم عکس این عمل را انجام دهیم و با به کار بردن عملگر  $J_+$  از کتهای  $|J, -J\rangle$  شروع کنیم. روش استدلال، درست مانند مورد قبل است، و ضرایب بسط کتهای  $|J, -M\rangle$  برحسب کتهای  $|j_1, j_2; -m_1, -m_2\rangle$  همان ضرایب بسط کتهای  $|J, M\rangle$  برحسب  $(j_1, j_2; m_1, m_2)$  خواهند بود. تنها اختلافاتی که ممکن است بروز کنند مربوط به قراردادهای فاز برای کتهای  $|J, M\rangle$  هستند، زیرا در این صورت مانسته (۱۶) ایجاب می‌کند که  $(j_1, j_2; -j_1, -j_2 - J + j_1 |J, -J\rangle$  حقیقی و مثبت باشد. حال، طبق (۲۴)، علامت این ضریب، در واقع عبارت است از  $(-1)^{j_1 + j_2 - J}$ . در نتیجه

$$(j_1, j_2; -m_1, -m_2 |J, -M) = (-1)^{j_1 + j_2 - J} (j_1, j_2; m_1, m_2 |J, M) \quad (26)$$

به‌ویژه، اگر قرار دهیم  $m_1 = m_2 = 0$ ، ملاحظه می‌کنیم که هنگامی که  $j_1 + j_2 - J$  عدد فردی باشد ضریب  $(j_1, j_2; 0, 0 |J, 0)$  صفر است.

د) ضرایب  $\langle j, j; m, -m | 0, 0 \rangle$

بنابر (الف)، فقط به شرط برابر بودن  $j_1$  و  $j_2$ ، مقدار  $J$  می‌تواند صفر باشد. بنابراین، مقادیر  $j_1 = j_2 = j$ ،  $m_1 = m$  و  $m_2 = -m - 1$  را در (۱۳) قرار می‌دهیم. نتیجه خواهد شد

$$\langle j, j; m + 1, -(m + 1) | 0, 0 \rangle = -\langle j, j; m, -m | 0, 0 \rangle \quad (27)$$

لذا، تمام ضرایب  $\langle j, j; m, -m | 0, 0 \rangle$  از نظر قدرمطلق مساوی هستند. هر بار که  $m$  به اندازه یک واحد تغییر کند، علامتهای این ضرایب تغییر خواهد کرد، و چون  $\langle j, j; j, -j | 0, 0 \rangle$  مثبت است، این علامت از  $(-1)^{j-m}$  به دست می‌آید. با در نظر گرفتن رابطه تعامد (ب۷)، که نشان می‌دهد

$$\sum_{m=-j}^j \langle j, j; m, -m | 0, 0 \rangle^2 = 1 \quad (28)$$

داریم

$$\langle j, j; m, -m | 0, 0 \rangle = \frac{(-1)^{j-m}}{\sqrt{2j+1}} \quad (29)$$

مراجع برای مطالعه بیشتر

Messiah (1.17), app. C; Rose (2.19), chap. III and app. I; Edmonds (2.21), chap. 3; Sobel'man (11.12), chap. 4, §13.

Tables of Clebsch-Gordan coefficients: Condon and Shortley (11.13), chap. III, §14; Bacry (10.34), app. C.

Tables of  $3j$  and  $6j$  coefficients: Edmonds (2.21), Table 2; Rotenberg et al. (10.48).

## جمع هماهنگهای کروی

۱. توابع  $\phi_J^M(\Omega_1; \Omega_2)$

۲. توابع  $F_l^m(\Omega)$

۳. بسط حاصلضرب هماهنگهای کروی: انتگرال حاصلضرب سه هماهنگ کروی

در این مکمل، از خواص ضرایب کلیش گوردن، برای اثبات روابطی که بعداً مورد استفاده قرار خواهند گرفت، به ویژه در مکملهای ۵، از فصل ۱۰ و مکمل ۱ از فصل ۱۳: روابط جمع هماهنگهای کروی، استفاده می‌کنیم. با در نظر داشتن این هدف، مطالعه خود را با معرفی و بررسی  $\phi_J^M(\Omega_1, \Omega_2)$  که توابعی از دو مجموعه  $\Omega_1$  و  $\Omega_2$  از زوایای قطبی هستند، شروع خواهیم کرد.

۱. توابع  $\phi_J^M(\Omega_1; \Omega_2)$

دو ذره (۱) و (۲)، با فضاهای حالت  $\mathcal{E}_1^1$  و  $\mathcal{E}_2^2$  و تکانه زاویه‌ای مداری  $\mathbf{L}_1$  و  $\mathbf{L}_2$  را در نظر بگیرید. برای فضای  $\mathcal{E}_1^1$  یک پایه متعارف انتخاب می‌کنیم، که از کتهای  $\{|\varphi_{k_1, l_1, m_1}\rangle\}$ ، که تابع موجهای آنها عبارت‌اند از

$$\varphi_{k_1, l_1, m_1}(\mathbf{r}_1) = R_{k_1, l_1}(r_1) Y_{l_1}^{m_1}(\Omega_1) \quad (1)$$

تشکیل شده باشد  $\Omega_1$  نماینده مجموعه زوایای قطبی  $\{\theta_1, \varphi_1\}$  ذره اول است. همچنین، برای  $\mathcal{E}_2^2$  پایه متعارف  $\{|\varphi_{k_2, l_2, m_2}\rangle\}$  را انتخاب می‌کنیم. در آنچه که می‌آید، حالت‌های دو ذره را محدود به زیرفضاهای  $\mathcal{E}(k_1, l_1)$  و  $\mathcal{E}(k_2, l_2)$  خواهیم کرد، به طوری که  $k_1, l_1, k_2, l_2$  ثابت‌اند و توابع شعاعی  $R_{k_1, l_1}(r_1)$  و  $R_{k_2, l_2}(r_2)$  هیچ نقشی ندارند.

تکانه زاویه‌ای سیستم کل (۱) + (۲) دو ذره برابر است با

$$\mathbf{J} = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2 \quad (2)$$

بنابر نتایج فصل ۱۰، می‌توانیم پایه  $\mathcal{E}(k_1, l_1) \otimes \mathcal{E}(k_2, l_2)$  از ویژه بردارهای  $|\phi_J^M\rangle$  مشترک بین

$J^z$  [ویژه مقدار  $J(J+1)\hbar^2$ ] و  $J_z$  [ویژه مقدار  $M\hbar$ ]، را بسازیم. این بردارها به صورت زیرند

$$|\phi_J^M\rangle = \sum_{m_1=-l_1}^{l_1} \sum_{m_2=-l_2}^{l_2} \langle l_1, l_2; m_1, m_2 | J, M \rangle |\varphi_{k_1, l_1, m_1}(1)\rangle \otimes |\varphi_{k_2, l_2, m_2}(2)\rangle \quad (\text{الف ۳})$$

تغییر وارون پایه با رابطه زیر داده می شود

$$|\varphi_{k_1, l_1, m_1}(1)\rangle \otimes |\varphi_{k_2, l_2, m_2}(2)\rangle = \sum_{J=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} \sum_{M=-J}^J \langle l_1, l_2; m_1, m_2 | J, M \rangle |\phi_J^M\rangle \quad (\text{ب ۳})$$

رابطه (الف ۳) نشان می دهد که وابستگی زاویه ای حالت های  $|\phi_J^M\rangle$  توسط توابع زیر بیان می شود

$$\phi_J^M(\Omega_1; \Omega_2) = \sum_{m_1} \sum_{m_2} \langle l_1, l_2; m_1, m_2 | J, M \rangle Y_{l_1}^{m_1}(\Omega_1) Y_{l_2}^{m_2}(\Omega_2) \quad (\text{الف ۴})$$

همین طور، رابطه (ب ۳) می رساند که

$$Y_{l_1}^{m_1}(\Omega_1) Y_{l_2}^{m_2}(\Omega_2) = \sum_{J=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} \sum_{M=-J}^J \langle l_1, l_2; m_1, m_2 | J, M \rangle \phi_J^M(\Omega_1; \Omega_2) \quad (\text{ب ۴})$$

به مشاهده پذیرهای  $L_{1z}$  و  $L_{2z}$ ، برای تابع موجها، عملگرهای دیفرانسیلی ای که بر متغیرهای  $\Omega_1 = \{\theta_1, \varphi_1\}$  و  $\Omega_2 = \{\theta_2, \varphi_2\}$  اثر می کنند، مربوط می شوند؛ بخصوص

$$L_{1z} \Rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi_1} \quad (\text{الف ۵})$$

$$L_{2z} \Rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi_2} \quad (\text{ب ۵})$$

چون کت  $|\phi_J^M\rangle$  یک ویژه بردار  $J_z = L_{1z} + L_{2z}$  است، می توان نوشت

$$\frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial \varphi_1} + \frac{\partial}{\partial \varphi_2} \right) \phi_J^M(\theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2) = M\hbar \phi_J^M(\theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2) \quad (۶)$$

به طور مشابه، داریم

$$J_{\pm}|\phi_J^M\rangle = \hbar\sqrt{J(J+1) - M(M\pm 1)}|\phi_J^{M\pm 1}\rangle \quad (7)$$

که، با در نظر گرفتن فرمولهای (D-۶) از فصل ۶

$$\begin{aligned} & \left\{ e^{\pm i\varphi_1} \left[ \pm \frac{\partial}{\partial\theta_1} + i \cot \theta_1 \frac{\partial}{\partial\varphi_1} \right] \right. \\ & \left. + e^{\pm i\varphi_2} \left[ \pm \frac{\partial}{\partial\theta_2} + i \cot \theta_2 \frac{\partial}{\partial\varphi_2} \right] \right\} \phi_J^M(\theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2) \\ & = \sqrt{J(J+1) - M(M\pm 1)} \Phi_J^{M\pm 1}(\theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2) \quad (8) \end{aligned}$$

## ۲. توابع $F_l^m(\Omega)$

حال، تابع  $F_l^m$  را که به صورت زیر تعریف می شود معرفی می کنیم

$$F_l^m(\theta, \varphi) \equiv F_l^m(\Omega) = \phi_{J=l}^{M=m}(\Omega_1 = \Omega; \Omega_2 = \Omega) \quad (9)$$

$F_l^m$  تابعی از یک جفت زاویه قطبی  $\Omega = \{\theta, \varphi\}$  است، و لذا می تواند مشخص کننده وابستگی زاویه ای یک تابع موج مربوط به یک تک ذره با فضای حالت  $\mathcal{E}_r$  و تکانه زاویه ای  $\mathbf{L}$  باشد. در حقیقت، خواهیم دید که  $F_l^m$ ، تابع جدیدی نیست، بلکه فقط متناسب با هماهنگ کروی  $Y_l^m$  است.

برای اثبات این مطلب، نشان می دهیم که  $F_l^m$  یک ویژه تابع  $L_z$  و  $L^2$  با ویژه مقدرهای  $l(l+1)\hbar^2$  و  $m\hbar$  است. بنابراین، عمل  $L_z$  بر روی  $F_l^m$  را حساب می کنیم. بنابر (۹۱)،  $F_l^m$  از طریق  $\Omega_1 = \{\theta_1, \varphi_1\}$  و  $\Omega_2 = \{\theta_2, \varphi_2\}$ ، که هر دو را مساوی  $\Omega$  می گیریم، به  $\theta$  و  $\varphi$  بستگی دارد. اگر قضیه مشتق گیری تابع از تابع را به کار ببریم، داریم

$$\begin{aligned} L_z F_l^m(\theta, \varphi) &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial\varphi} F_l^m(\theta, \varphi) \\ &= \frac{\hbar}{i} \left\{ \left[ \frac{\partial}{\partial\varphi_1} + \frac{\partial}{\partial\varphi_2} \right] \Phi_{J=l}^{M=m}(\Omega_1; \Omega_2) \right\}_{\Omega_1=\Omega_2=\Omega} \quad (10) \end{aligned}$$

در این صورت از رابطه (۶) خواهیم داشت

$$L_z F_l^m(\theta, \varphi) = m\hbar F_l^m(\theta, \varphi) \quad (11)$$



که قسمتی از نتیجه‌ای را که به دنبال آن هستیم اثبات می‌کند. برای محاسبه عمل  $L^2$  بر روی  $F_l^m$ ، از این واقعیت که

$$L^2 = \frac{1}{4}(L_+L_- + L_-L_+) + L_z^2 \quad (12)$$

است، استفاده می‌کنیم. حال، با استفاده از استدلالی مشابه آنچه برای نوشتن (۱۰) و (۱۱) به کار بردیم، رابطه (۸) به رابطه زیر منجر می‌شود

$$L_{\pm} F_l^m(\theta, \varphi) = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} F_l^{m \pm 1}(\theta, \varphi) \quad (13)$$

در این صورت از رابطه (۱۲) نتیجه می‌شود

$$\begin{aligned} L^2 F_l^m(\theta, \varphi) &= \frac{\hbar^2}{4} \{ [l(l+1) - m(m-1)] \\ &\quad + [l(l+1) - m(m+1)] + 2m^2 \} F_l^m(\theta, \varphi) \\ &= l(l+1)\hbar^2 F_l^m(\theta, \varphi) \end{aligned} \quad (14)$$

بنابراین،  $F_l^m$ ، که بنابر (۱۱) ویژه تابع  $L_z$  با ویژه مقدار  $m\hbar$  است، ویژه تابع  $L^2$  با ویژه مقدار  $l(l+1)\hbar^2$  نیز خواهد بود. چون  $L_z$  و  $L^2$  در فضای توابعی که فقط به  $\theta$  و  $\varphi$  بستگی دارند، تشکیل یک مجموعه کاملی از مشاهده پذیرهای جابه‌جاپذیر می‌دهند،  $F_l^m$  الزاماً متناسب با هماهنگ کروی  $Y_l^m$  است. از رابطه (۱۳) به‌سادگی می‌توان نشان داد که ضریب تناسب به  $m$  بستگی ندارد، و داریم

$$F_l^m(\theta, \varphi) = \lambda(l) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (15)$$

اکنون باید این ضریب تناسب  $\lambda(l)$  را حساب کنیم. برای این کار، یک جهت خاص را در فضا انتخاب می‌کنیم، جهت  $Oz$  ( $\theta = 0$  و  $\varphi$  نامعین). در این جهت، تمام هماهنگهای کروی  $Y_l^m$ ، بجز آنهایی که مربوط به  $m = 0$  هستند صفرند [چون  $Y_l^m$  متناسب با  $e^{im\varphi}$  است، برای اینکه مقدار  $Y_l^m$  در جهت  $Oz$  منحصر به فرد باشد، این توابع لازم است که صفر باشند، برای پی بردن به این نکته، در فرمولهای (۶۶)، (۶۷)، و (۹۶) مکمل ۱ از فصل ۶، مقدار  $\theta$  را مساوی صفر قرار دهید]. وقتی  $m = 0$  باشد، هماهنگ کروی  $Y_l^m(\theta = 0, \varphi)$  از رابطه زیر به دست می‌آید

[مکمل ۱ از فصل ۶، روابط (۵۷) و (۶۰)]

$$Y_l^\circ(\theta = \circ, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \quad (16)$$

با قراردادن این روابط در (۴الف) و (۹)، داریم

$$F_l^{m=\circ}(\theta = \circ, \varphi) = \langle l_1, l_2; \circ, \circ | l, \circ \rangle \frac{\sqrt{(2l_1+1)(2l_2+1)}}{4\pi} \quad (17)$$

به علاوه، بنا بر (۱۵) و (۱۶)

$$F_l^{m=\circ}(\theta = \circ, \varphi) = \lambda(l) \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \quad (18)$$

در نتیجه

$$\lambda(l) = \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l+1)}} \langle l_1, l_2; \circ, \circ | l, \circ \rangle \quad (19)$$

۳. بسط حاصلضرب هماهنگهای کروی؛

انتگرال حاصلضرب سه هماهنگ کروی

یا در نظر گرفتن (۹)، (۱۵) و (۱۹)، از روابط (۴الف) و (۴ب) نتیجه می شود که

$$Y_l^m(\Omega) = \left[ \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l+1)}} \langle l_1, l_2; \circ, \circ | l, \circ \rangle \right]^{-1} \\ \times \sum_{m_1} \sum_{m_2} \langle l_1, l_2; m_1, m_2 | l, m \rangle Y_{l_1}^{m_1}(\Omega) Y_{l_2}^{m_2}(\Omega) \quad (20)$$

و

$$Y_{l_1}^{m_1}(\Omega) Y_{l_2}^{m_2}(\Omega) = \sum_{l=|l_1-l_2|}^{l_1+l_2} \sum_{m=-l}^l \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l+1)}} \langle l_1, l_2; \circ, \circ | l, \circ \rangle \\ \times \langle l_1, l_2; m_1, m_2 | l, m \rangle Y_l^m(\Omega) \quad (21)$$

رابطهٔ اخیر (که در واقع، جمع‌بندی بر روی  $m$  در آن غیر ضروری است، زیرا تنها جملات غیر صفر الزاماً در رابطه  $m = m_1 + m_2$  صدق می‌کنند)، رابطهٔ جمع هماهنگ کروی<sup>۱</sup> نامیده می‌شود. طبق فرمول (۲۶) از مکمل ۲ از فصل ۱۰، ضریب کلیش گوردن  $\langle l_1, l_2; 0, 0 | l, 0 \rangle$  فقط هنگامی که  $l_1 + l_2 - l$  یک عدد زوج باشد، مخالف صفر است. بنابراین، حاصلضرب  $Y_{l_1}^{m_1}(\Omega) Y_{l_2}^{m_2}(\Omega)$  را می‌توان فقط بر حسب هماهنگهای کروی از مرتبه‌های

$$l = l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 2, l_1 + l_2 - 4, \dots, |l_1 - l_2| \quad (22)$$

بسط داد. بنابراین، در رابطه (۲۱)، پاریتتهٔ  $(-1)^l$  تمام جملات بسط در سمت راست برابر است با  $(-1)^{l_1+l_2}$ ، پاریتتهٔ حاصلضربی که سمت چپ را تشکیل می‌دهد. می‌توانیم از رابطهٔ جمع هماهنگ کروی برای محاسبهٔ انتگرال زیر استفاده کنیم

$$I = \int Y_{l_1}^{m_1}(\Omega) Y_{l_2}^{m_2}(\Omega) Y_{l_r}^{m_r}(\Omega) d\Omega \quad (23)$$

با قرار دادن (۲۱) در (۲۳)، عبارتی از نوع زیر به دست می‌آید

$$K(l, m; l_r, m_r) = \int Y_l^m(\Omega) Y_{l_r}^{m_r}(\Omega) d\Omega \quad (24)$$

که، با در نظر گرفتن روابط همیوگی مختلط و روابط تعامد هماهنگهای کروی [مکمل ۱ از فصل ۶، روابط (۵۵) و (۴۵)]، برابرند با

$$K(l, m; l_r, m_r) = (-1)^m \delta_{ll_r} \delta_{m, -m_r} \quad (25)$$

بنابراین، مقدار  $I$  برابر است با

$$\int Y_{l_1}^{m_1}(\Omega) Y_{l_2}^{m_2}(\Omega) Y_{l_r}^{m_r}(\Omega) d\Omega = (-1)^{m_r} \sqrt{\frac{(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)}{4\pi(2l_r + 1)}} \\ \times \langle l_1, l_2; 0, 0 | l_r, 0 \rangle \langle l_1, l_2; m_1, m_2 | l_r, -m_r \rangle \quad (26)$$

در نتیجه، این انتگرال تنها به شرطی مخالف صفرند که

۱. در مورد خاص  $l_1 = 1, m_2 = 0$ ، فرمول (۳۵) از مکمل ۱ از فصل ۶ را می‌دهد.

۱. اگر  $m_1 + m_2 + m_3 = 0$  باشد، همان طور که مستقیماً نیز می‌توانستیم پیش‌بینی کنیم، زیرا انتگرال روی  $\varphi$  در رابطه (۲۳) عبارت است از

$$\int_0^{2\pi} d\varphi e^{i(m_1+m_2+m_3)\varphi} = \delta_{0, m_1+m_2+m_3}$$

۲. اگر با سه پاره‌خط به طولهای  $l_1, l_2$  و  $l_3$  بتوان یک مثلث درست کرد.

۳. اگر  $l_1 + l_2 - l_3$  زوج باشد (که برای غیرصفر بودن  $(0, 0 | l_3, 0, 0 | l_2, l_1)$  ضروری است)، یعنی، حاصلضرب سه هماهنگ کروی  $Y_{l_1}^{m_1}, Y_{l_2}^{m_2}$  و  $Y_{l_3}^{m_3}$  یک تابع زوج باشد (واضح است که این شرط لازم است، برای اینکه انتگرال آن روی تمام جهات فضا مخالف صفر باشند).

رابطه (۲۶)، برای مورد خاص هماهنگهای کروی، قضیهٔ عمومی‌تری را بیان می‌کند، که قضیهٔ ویگنر-اکارت نامیده می‌شود.

## مکمل ۴

### عملگرهای برداری: قضیهٔ ویگنر-اکارت

۱. تعریف عملگرهای برداری: مثالها
۲. قضیهٔ ویگنر-اکارت برای عملگرهای برداری
  - الف) عناصر ماتریسی غیرصفر  $V$  در یک پایهٔ متعارف
  - ب) تناسب بین عناصر ماتریسی  $J$  و  $V$  در داخل یک زیرفضای  $\mathcal{E}(k, j)$
  - ج) محاسبهٔ ضریب تناسب؛ قضیهٔ تصویر
۳. کاربرد: محاسبهٔ ضریب  $g_j$  لانه برای یک تراز اتمی
  - الف) واگنی دورانی؛ چندتابیها
  - ب) از بین بردن واگنی توسط یک میدان مغناطیسی؛ نمودار انرژی

در مکمل ۲ از فصل ۶ (بخش ۵ب)، مفهوم عملگر اسکالر را تعریف کردیم که: عملگری است مانند  $A$  که با تکانهٔ زاویه‌ای  $J$  سیستم مورد مطالعه جابه‌جاپذیر است. سپس یک خصوصیت مهم این عملگر را ارائه کردیم (بخش ۶-ج-۲ همان مکمل): در یک پایهٔ متعارف،  $\{|k, j, m\rangle\}$ . عناصر ماتریسی غیرصفر  $\langle k, j, m | A | k', j', m' \rangle$  یک عملگر اسکالر باید شرایط  $j = j'$  و  $m = m'$  را برقرار سازند؛ به علاوه، این عناصر به  $m$  بستگی ندارند،<sup>۱</sup> و لذا می‌توانیم بنویسیم

$$\langle k, j, m | A | k', j', m' \rangle = a_j(k, k') \delta_{jj'} \delta_{mm'} \quad (۱)$$

بخصوص، اگر مفاد  $k$  و  $j$  مشخص باشند، که به معنای "محدود" انگاشتن  $A$  (مکمل B<sub>II</sub>، بخش ۳) به زیرفضای  $\mathcal{E}(k, j)$  می‌حاصل از  $(2j+1)$  کت  $|k, j, m\rangle$  با  $|k, j, m\rangle$  یا  $(j, \dots, -j+1, -j, m = -j)$  است، یک ماتریس  $(2j+1) \times (2j+1)$  بسیار ساده به دست می‌آوریم: این ماتریس، قطری است و تمام عناصر قطر اصلی آن برابرند.

حال، یک عملگر اسکالر دیگر  $B$  را در نظر بگیریم. ماتریس متناظر با این عملگر در زیرفضای  $\mathcal{E}(k, j)$  همان ویژگی را دارد: با ماتریس یکه متناسب است. از این رو، ماتریس متناظر با  $B$  را می‌توان به سادگی از ماتریس وابسته به  $A$ ، با ضرب کردن تمام عناصر (قطری) آن در یک مقدار ثابت، به دست آورد. بنابراین، می‌بینیم که محدودیت‌های دو عملگر اسکالر  $A$  و  $B$  به یک زیرفضای

۱. اثبات این خصوصیات در مکمل ۲ از فصل ۶ آمده است، بعداً در این مکمل (۳الف)، هنگامی که عناصر ماتریسی یک هامیلتونی اسکالر را مورد مطالعه قرار می‌دهیم، به این نکته باز خواهیم گشت.

$\mathcal{E}(k, j)$ ، همواره متناسب‌اند. اگر تصویرگر بر زیرفضای  $\mathcal{E}(k, j)$  را به  $P(k, j)$  نمایش دهیم، می‌توانیم این نتیجه را به صورت زیر بنویسیم<sup>۱</sup>

$$P(k, j)BP(k, j) = \lambda(k, j)P(k, j)AP(k, j) \quad (۲)$$

هدف این مکمل آن است که نوع دیگری عملگر را که دارای خواصی مشابه عملگر یاد شده در بالاست، بررسی کنیم: عملگر برداری. خواهیم دید که اگر  $\mathbf{V}$  و  $\mathbf{V}'$  برداری باشند، عناصر ماتریسی آنها نیز از قواعد گزینشی، که ارائه خواهیم کرد، تبعیت می‌کنند. به علاوه، نشان خواهیم داد که محدودیت‌های  $\mathbf{V}$  و  $\mathbf{V}'$  در  $\mathcal{E}(k, j)$ ، همواره متناسب‌اند

$$P(k, j)\mathbf{V}'P(k, j) = \mu(k, j)P(k, j)\mathbf{V}P(k, j) \quad (۳)$$

این نتایج، قضیهٔ ویگنر-اکارت برای عملگرهای برداری را تشکیل می‌دهد.

یادداشت:

در واقع قضیهٔ ویگنر-اکارت خیلی عمومی‌تر است. به عنوان مثال، از این قضیه می‌توان قواعد گزینشی را برای عناصر ماتریس  $\mathbf{V}$  بین دو کت متعلق به دو زیرفضای متفاوت  $\mathcal{E}(k, j)$  و  $\mathcal{E}(k', j')$  به دست آورد، یا این عناصر را به عناصر متناظر  $\mathbf{V}'$  مربوط کرد. همچنین می‌توان قضیهٔ ویگنر-اکارت را در مورد تمامی یک ردهٔ از عملگرها، که عملگرهای اسکالر و برداری صرفاً موارد خاصی از آنها هستند، به کار برد، یعنی، عملگرهای تانسوری ساده‌نشده (تمرین ۸ از مکمل ۷ از فصل ۱۰)، که در اینجا آنها را بررسی نخواهیم کرد. ■

### ۱. تعریف عملگرهای برداری: مثالها

در بخش ۵ ج از مکمل ۲ از فصل ۶، نشان دادیم که مشاهده‌پذیر  $\mathbf{V}$  در صورتی یک بردار است که سه مؤلفهٔ  $V_x$ ،  $V_y$  و  $V_z$  آن در یک دستگاه راست‌هنگار  $Oxyz$ ، در روابط جابه‌جایی

$$[J_x, V_x] = 0 \quad (۴الف)$$

$$[J_x, V_y] = i\hbar V_z \quad (۴ب)$$

$$[J_x, V_z] = -i\hbar V_y \quad (۴ج)$$

۱. برای دو عملگر مفروض  $A$  و  $B$ ، ضریب تناسب معمولاً وابسته به زیرفضای انتخابی  $\mathcal{E}(k, j)$  است؛ به این دلیل است که می‌نویسیم  $\lambda(k, j)$ .

و همچنین در روابطی که از جایگشت دوره‌ای شاخصهای  $x, y, z$  به دست می‌آیند، صدق کنند. برای روشن شدن مفهوم این مطلب، چند مثال از عملگرهای برداری ارائه می‌دهیم:

۱. تکانهٔ زاویه‌ای  $J$ ، خود یک بردار است؛ با قرار دادن  $J$  به جای  $V$  در فرمولهای (۴)، روابطی به دست می‌آوریم که معرف یک تکانهٔ زاویه‌ای هستند (فصل ۶).

۲. برای یک ذرهٔ بدون اسپین که فضای حالت آن  $\mathcal{E}_r$  است، داریم  $J = L$ . در این صورت می‌توان به سادگی نشان داد که  $R$  و  $P$  عملگرهای برداری هستند. به عنوان مثال، داریم

$$\begin{aligned} [L_x, X] &= [YP_z - ZP_y, X] = 0 \\ [L_x, Y] &= [-ZP_y, Y] = i\hbar Z \\ [L_x, Z] &= [YP_z, Z] = -i\hbar Y \end{aligned} \quad (5)$$

۳. برای ذره‌ای با اسپین  $S$ ، که فضای حالت آن  $\mathcal{E}_r \otimes \mathcal{E}_s$  است،  $J = L + S$  با رابطهٔ  $J = L + S$  داده می‌شود. در این مورد، عملگرهای  $L, S, R, P$  و همه بردار هستند. اگر این حقیقت را، که عملگرهای اسپینی (که تنها در  $\mathcal{E}_s$  عمل می‌کنند) با عملگرهای مداری (که فقط در  $\mathcal{E}_r$  عمل می‌کنند) جابه‌جا می‌شوند، در نظر داشته باشیم، اثبات این خصوصیات بلافاصله از (۱) و (۲) نتیجه می‌شود. از طرف دیگر، عملگرهایی از نوع  $L \cdot S, L^2, S^2$ ، و غیره، بردار نیستند، بلکه اسکالرند [یادداشت (۱) از مکمل ۲ فصل ۶، بخش ۵ج]. با این همه، عملگرهای برداری را می‌توانیم از آنهایی که ذکر کردیم بسازیم:  $R \times S, (L \cdot S)P$  و غیره.

۴. سیستم (۲) + (۱) را، که از تلفیق دو سیستم: (۱) با فضای حالت  $\mathcal{E}_1$ ، و (۲) با فضای حالت  $\mathcal{E}_2$ ، تشکیل شده است، در نظر بگیرید. اگر  $V(1)$  عملگری باشد که تنها در  $\mathcal{E}_1$  عمل کند، و اگر این عملگر یک بردار باشد [یعنی، در رابطه‌های جابه‌جایی (۴) با تکانهٔ زاویه‌ای  $J$  سیستم اول صدق کند]، در این صورت، تعمیم  $V(1)$  به  $\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$  نیز یک بردار خواهد بود. به عنوان مثال، برای یک سیستم متشکل از دو الکترون، عملگرهای  $L_1, R_1, S_2$  و غیره بردارند.

## ۲. قضیهٔ ویگنر-اکارت برای عملگرهای برداری

الف) عناصر ماتریسی غیرصفر  $V$  در یک پایهٔ متعارف

عملگرهای  $V_+, V_-, J_+, J_-$  را که به صورت زیر تعریف می‌شوند معرفی می‌کنیم

$$\begin{aligned} V_{\pm} &= V_x \pm iV_y \\ J_{\pm} &= J_x \pm iJ_y \end{aligned} \quad (6)$$

با استفاده از روابط (۴)، به سادگی می‌توان نشان داد که

$$[J_x, V_{\pm}] = \mp \hbar V_z \quad (الف ۷)$$

$$[J_y, V_{\pm}] = -i\hbar V_z \quad (ب ۷)$$

$$[J_z, V_{\pm}] = \pm \hbar V_{\pm} \quad (ج ۷)$$

که از آنها می‌توان روابط جابه‌جایی  $J_+$  و  $V_{\pm}$  را استنتاج کرد

$$[J_+, V_+] = 0 \quad (الف ۸)$$

$$[J_+, V_-] = 2\hbar V_z \quad (ب ۸)$$

$$[J_-, V_+] = -2\hbar V_z \quad (ج ۸)$$

$$[J_-, V_-] = 0 \quad (د ۸)$$

حال عناصر ماتریسی  $V$  را در یک پایه متعارف در نظر بگیرید. خواهیم دید که از بردار بودن  $V$  نتیجه می‌شود که تعداد زیادی از عناصر صفرند. قبل از هر چیز، نشان خواهیم داد که هرگاه  $m$  مخالف  $m'$  باشد، عناصر ماتریسی  $\langle k, j, m | V_z | k', j', m' \rangle$  الزاماً صفر خواهند بود. کافی است توجه کنیم که  $V_z$  و  $J_z$  جابه‌جا می‌شوند [که، پس از جایگشت دوره‌ای شاخصهای  $x, y, z$ ، از رابطه (الف ۴) نتیجه می‌شود]. بنابراین، عناصر ماتریسی  $V_z$  بین دو بردار  $|k, j, m\rangle$  متناظر با به ویژه مقادیرهای متفاوت  $m\hbar$  متعلق به  $J_z$  صفر خواهند بود (بخش ۹-۳-D).

برای عناصر ماتریسی  $\langle k, j, m | V_{\pm} | k', j', m' \rangle$  عملگر  $V_{\pm}$  نشان خواهیم داد که فقط برای  $m - m' = \pm 1$  این عناصر مخالف صفرند. معادله (ج ۷) نشان می‌دهد که

$$J_z V_{\pm} = V_{\pm} J_z \pm \hbar V_{\pm} \quad (۹)$$

با اعمال طرفین این رابطه برکت  $|k', j', m'\rangle$ ، نتیجه می‌شود

$$\begin{aligned} J_z (V_{\pm} |k', j', m'\rangle) &= V_{\pm} J_z |k', j', m'\rangle \pm \hbar V_{\pm} |k', j', m'\rangle \\ &= (m' \pm 1) \hbar V_{\pm} |k', j', m'\rangle \end{aligned} \quad (۱۰)$$



این رابطه نشان می‌دهد که  $V_{\pm}|k', j', m'\rangle$  یک ویژه‌بردار  $J_z$  با ویژه‌مقدار  $\hbar(m' \pm 1)$  است.<sup>۱</sup> چون دو بردار خاص عملگر هرمیتی  $J_z$  وابسته به مقادیر خاص متفاوت متعامدند، نتیجه می‌شود که اگر  $m \neq m' \pm 1$  باشد حاصلضرب اسکالر  $\langle k, j, m | V_{\pm} | k', j', m' \rangle$  صفر است. به‌طور خلاصه، قواعد گزینش به‌دست آمده برای عناصر ماتریسی  $V$  عبارت‌اند از

$$V_z \implies \Delta m = m - m' = 0 \quad (الف ۱۱)$$

$$V_+ \implies \Delta m = m - m' = +1 \quad (ب ۱۱)$$

$$V_- \implies \Delta m = m - m' = -1 \quad (ج ۱۱)$$

از این نتایج، به‌سادگی می‌توان شکل ماتریسهایی را که معرف محدودیت‌های مؤلفه‌های  $V$  در داخل یک زیرفضای  $\mathcal{E}(k, j)$  هستند، استنتاج کرد. ماتریس وابسته به  $V_z$  قطری است، و ماتریسهای وابسته به  $V_{\pm}$  فقط در بالا و پایین قطر اصلی دارای عناصر ماتریسی‌اند.

(ب) تناسب بین عناصر ماتریسی  $J$  و  $V$  در داخل یک زیرفضای  $\mathcal{E}(k, j)$

۱. عناصر ماتریسی  $V_+$  و  $V_-$

با توجه به این حقیقت که عنصر ماتریسی (الف ۱۸) بین "برای"  $|k, j, m+2\rangle$  و  $|k, j, m\rangle$  وکت صفر است، داریم

$$\langle k, j, m+2 | J_+ V_+ | k, j, m \rangle = \langle k, j, m+2 | V_+ J_+ | k, j, m \rangle \quad (۱۲)$$

در هر دو طرف این رابطه و بین عملگرهای  $J_+$  و  $V_+$ ، رابطهٔ بستاری زیر را وارد می‌کنیم

$$\sum_{k', j', m'} |k', j', m'\rangle \langle k', j', m'| = 1 \quad (۱۳)$$

---

۱. نایبستی نتیجه‌گیری کرد که الزاماً  $V_{\pm}|k, j, m\rangle$  متناسب با  $|k, j, m \pm 1\rangle$  است. در حقیقت، بحث حاضر نشان می‌دهد که فقط

$$V_{\pm}|k, j, m\rangle = \sum_{k'} \sum_{j'} c_{k', j'} |k', j', m \pm 1\rangle$$

برای اینکه بتوانیم، به‌عنوان مثال، جمع‌بندی روی  $j'$  را حذف کنیم، لازم است که  $V_{\pm}$  با  $J^2$  جابه‌جا شود که در حالت عمومی این چنین نیست.

به این ترتیب، عناصر ماتریسی  $J_+$ ، یعنی  $\langle k, j, m | J_+ | k', j', m' \rangle$ ، را به دست می آوریم؛ با توجه به ساختن پایه متعارف  $\{|k, j, m\rangle\}$  دیده می شود که این عناصر، تنها در صورتی که  $k = k'$  و  $j = j'$  و  $m = m' + 1$  باشد، مخالف صفرند. از این رو، جمع بندیهای روی  $k'$ ،  $j'$  و  $m'$  در این مورد غیر ضروری است، و (۱۲) را می توانیم به صورت زیر بنویسیم

$$\langle k, j, m + 2 | J_+ | k, j, m + 1 \rangle \langle k, j, m + 1 | V_+ | k, j, m \rangle \\ = \langle k, j, m + 2 | V_+ | k, j, m + 1 \rangle \langle k, j, m + 1 | J_+ | k, j, m \rangle \quad (14)$$

یعنی

$$\frac{\langle k, j, m + 1 | V_+ | k, j, m \rangle}{\langle k, j, m + 1 | J_+ | k, j, m \rangle} = \frac{\langle k, j, m + 2 | V_+ | k, j, m + 1 \rangle}{\langle k, j, m + 2 | J_+ | k, j, m + 1 \rangle} \quad (15)$$

(تا وقتی بزرها و کتهای ظاهرشونده در این رابطه وجود داشته باشند، یعنی تا وقتی  $j - 2 \geq m \geq -j$  باشد، می توان نشان داد که هیچ یک از مخرجها نمی تواند صفر شود). با نوشتن رابطه حاصل برای  $m = -j, -j + 1, \dots, j - 2$  داریم

$$\frac{\langle k, j, -j + 1 | V_+ | k, j, -j \rangle}{\langle k, j, -j + 1 | J_+ | k, j, -j \rangle} = \frac{\langle k, j, -j + 2 | V_+ | k, j, -j + 1 \rangle}{\langle k, j, -j + 2 | J_+ | k, j, -j + 1 \rangle} = \dots \\ = \frac{\langle k, j, m + 1 | V_+ | k, j, m \rangle}{\langle k, j, m + 1 | J_+ | k, j, m \rangle} = \dots \\ = \frac{\langle k, j, j | V_+ | k, j, j - 1 \rangle}{\langle k, j, j | J_+ | k, j, j - 1 \rangle} \quad (16)$$

یعنی، اگر مقدار مشترک این کسرها را  $\alpha_+(k, j)$  بنامیم

$$\langle k, j, m + 1 | V_+ | k, j, m \rangle = \alpha_+(k, j) \langle k, j, m + 1 | J_+ | k, j, m \rangle \quad (17)$$

که  $\alpha_+(k, j)$  به  $k$  و  $j$  بستگی دارد و مستقل از  $m$  است. به علاوه، قاعده گزینش (۱۱-ب) مؤید این است که اگر  $\Delta m = m - m' \neq +1$  باشد، کلیه عناصر ماتریسی  $\langle k, j, m | V_+ | k, j, m' \rangle$  و  $\langle k, j, m | J_+ | k, j, m' \rangle$  صفرند. بنابراین،  $m$  و  $m'$  هر چه که باشند، داریم

$$\langle k, j, m | V_+ | k, j, m' \rangle = \alpha_+(k, j) \langle k, j, m | J_+ | k, j, m' \rangle \quad (الف ۱۸)$$

این نتیجه، بیان‌کنندهٔ این حقیقت است که تمام عناصر ماتریسی  $V_+$  در داخل  $\mathcal{E}(k, j)$ ، با عناصر ماتریسی  $J_+$  متناسب‌اند.

استدلال مشابهی با مساوی صفر قرار دادن عنصر ماتریسی جابه‌جاگر (۵۸) بین "برای"  $|k, j, m - 2\rangle$  و  $|k, j, m\rangle$ ، می‌تواند صورت گیرد. به این ترتیب، می‌رسیم به رابطهٔ

$$\langle k, j, m | V_- | k, j, m' \rangle = \alpha_-(k, j) \langle k, j, m | J_- | k, j, m' \rangle \quad (۱۸ ب)$$

معادله‌ای که می‌رساند، عناصر ماتریس  $V_-$  و  $J_-$  در داخل  $\mathcal{E}(k, j)$ ، با یکدیگر متناسب‌اند.

۲. عناصر ماتریسی  $V_z$

برای مربوط کردن عناصر ماتریسی  $V_z$  به عناصر ماتریسی  $J_z$ ، رابطهٔ (۵۸) را بین "برای"  $|k, j, m\rangle$  و  $|k, j, m\rangle$  قرار می‌دهیم

$$\begin{aligned} & -2\hbar \langle k, j, m | V_z | k, j, m \rangle \\ &= \langle k, j, m | (J_- V_+ - V_+ J_-) | k, j, m \rangle \\ &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \langle k, j, m+1 | V_+ | k, j, m \rangle \\ & - \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \langle k, j, m | V_+ | k, j, m-1 \rangle \quad (۱۹) \end{aligned}$$

یا استفاده از (۱۸ الف)، داریم

$$\begin{aligned} & \langle k, j, m | V_z | k, j, m \rangle \\ &= -\frac{1}{2} \alpha_+(k, j) \left\{ \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \langle k, j, m+1 | J_+ | k, j, m \rangle \right. \\ & \quad \left. - \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \langle k, j, m | J_+ | k, j, m-1 \rangle \right\} \\ &= -\frac{\hbar}{2} \alpha_+(k, j) \{ j(j+1) - m(m+1) - j(j+1) + m(m-1) \} \quad (۲۰) \end{aligned}$$

یعنی

$$\langle k, j, m | V_z | k, j, m \rangle = m\hbar \alpha_+(k, j) \quad (۲۱)$$

همچنین، استدلال مشابهی مبتنی بر (۸) و (۱۸)ب، منجر به رابطه زیر می‌شود

$$\langle k, j, m | V_z | k, j, m \rangle = m \hbar \alpha_-(k, j) \quad (22)$$

روابط (۲۱) و (۲۲) نشان می‌دهند که  $\alpha_+(k, j)$  و  $\alpha_-(k, j)$  الزاماً با یکدیگر برابرند؛ از این به بعد، مقدار مشترک آنها را  $\alpha(k, j)$  خواهیم نامید

$$\alpha(k, j) = \alpha_+(k, j) = \alpha_-(k, j) \quad (23)$$

به علاوه، از این روابط نتیجه می‌شود

$$\langle k, j, m | V_z | k, j, m' \rangle = \alpha(k, j) \langle k, j, m | J_z | k, j, m' \rangle \quad (24)$$

۳. تعمیم به یک مؤلفه دلخواه  $V$   
 هر مؤلفه  $V$ ، یک ترکیب خطی از  $V_+$ ،  $V_-$  و  $V_z$  است. در نتیجه، با استفاده از (۲۳)، روابط (۱۸الف)، (۱۸ب) و (۲۴) را می‌توان به صورت زیر خلاصه کرد

$$\langle k, j, m | V | k, j, m' \rangle = \alpha(k, j) \langle k, j, m | J | k, j, m' \rangle \quad (25)$$

بنابراین، در داخل  $\mathcal{E}(k, j)$ ، کلیه عناصر ماتریسی  $V$  با عناصر ماتریسی  $J$  متناسب‌اند. این نتیجه، قضیهٔ ویگنر-اکارت را برای یک مورد خاص بیان می‌کند. با معرفی محدودیت‌های  $V$  و  $J$  به  $\mathcal{E}(k, j)$  (رک. مکمل ۲، بخش ۳)، همچنین می‌توان آن را به صورت زیر نوشت

$$P(k, j) V P(k, j) = \alpha(k, j) P(k, j) J P(k, j) \quad (26)$$

یادداشت:

$J$  با  $P(k, j)$  جابه‌جا می‌شود [رک. (۲۷)]، به علاوه، چون

$$[P(k, j)]^\dagger = P(k, j)$$

است، می‌توانیم یکی از تصویرگرهای  $P(k, j)$  سمت راست (۲۶) را حذف کنیم.

ج) محاسبهٔ ضریب تناسب: قضیهٔ تصویر

عملگر  $\mathbf{J} \cdot \mathbf{V}$  را در نظر بگیرید؛ محدودیت آن در  $\mathcal{E}(k, j)$  برابر است با  $P(k, j) \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} P(k, j)$ . برای تبدیل این عبارت، می‌توانیم از رابطهٔ

$$[\mathbf{J}, P(k, j)] = 0 \quad (27)$$

استفاده کنیم، این رابطه را می‌توان با نشان دادن اینکه اثر جابه‌جاگرهای  $[J_z, P(k, j)]$  و  $[J_{\pm}, P(k, j)]$  بر روی هر کت از فضای  $\{|k, j, m\rangle\}$  صفر می‌شود، ثابت کرد. با استفاده از (۲۶)، داریم

$$\begin{aligned} P(k, j) \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} P(k, j) &= \mathbf{J} \cdot [P(k, j) \mathbf{V} P(k, j)] \\ &= \alpha(k, j) \mathbf{J}^{\dagger} P(k, j) \\ &= \alpha(k, j) j(j+1) \hbar^2 P(k, j) \end{aligned} \quad (28)$$

بنابراین، محدودیت عملگر  $\mathbf{J} \cdot \mathbf{V}$  به فضای  $\mathcal{E}(k, j)$  برابر است با عملگر همانی<sup>۱</sup> که در  $\alpha(k, j) j(j+1) \hbar^2$  ضرب می‌شود. بنابراین، اگر  $|\psi_{k,j}\rangle$  نمایندهٔ یک حالت بهنجار دلخواه متعلق به زیرفضای  $\mathcal{E}(k, j)$  باشد، مقدار متوسط  $\mathbf{J} \cdot \mathbf{V}$  (یعنی،  $\langle \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} \rangle$ ) مستقل از کت  $|\psi_{k,j}\rangle$  انتخابی است، زیرا

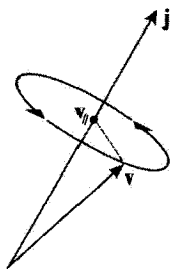
$$\langle \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} \rangle_{k,j} = \langle \psi_{k,j} | \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} | \psi_{k,j} \rangle = \alpha(k, j) j(j+1) \hbar^2 \quad (29)$$

اگر این رابطه را در رابطهٔ (۲۶) قرار بدهیم، مشاهده می‌کنیم که، در داخل زیرفضای  $\mathcal{E}(k, j)$

$$\mathbf{V} = \frac{\langle \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} \rangle_{k,j}}{\langle \mathbf{J}^{\dagger} \rangle_{k,j}} \mathbf{J} = \frac{\langle \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} \rangle_{k,j}}{j(j+1) \hbar^2} \mathbf{J} \quad (30)$$

۱. چون  $\mathbf{J} \cdot \mathbf{V}$  یک اسکالر است، این واقعیت که محدودیت آن، متناسب با عملگر همانی است، همان چیزی است که انتظار آن می‌رفت.

۲. اگر یک رابطهٔ عملگری، برای محدودیتهای عملگرهای مورد نظر به یک زیرفضای معین معتبر باشد، خواهیم گفت که آن رابطه فقط در داخل همان زیرفضا معتبر است. به این ترتیب، برای دقت هر چه بیشتر، باید هر دو طرف رابطهٔ (۳۰) را بین دو تصویرگر  $P(k, j)$  قرار دهیم.



شکل ۱ تعبیر کلاسیک قضیه تصویر: چون بردار  $v$  خیلی سریع حول تکانه زاویه‌ای کل  $J$  دوران می‌کند، تنها مؤلفه مانای آن را باید به حساب آورد.

این نتیجه، غالباً "قضیه تصویر" نامیده می‌شود. صرف نظر از سیستم فیزیکی مورد مطالعه، تا وقتی فقط حالت‌های متعلق به همان زیرفضای  $\mathcal{E}(k, j)$  مورد نظر باشند، می‌توان فرض کرد که تمام عملگرهای برداری با  $J$  متناسب‌اند.

تعبیر فیزیکی کلاسیک این ویژگی را می‌توان به صورت زیر بیان کرد: اگر  $J$  تکانه زاویه‌ای کل یک سیستم منزوی باشد، تمام کمیت‌های فیزیکی مربوط به این سیستم حول  $J$ ، که یک بردار ثابت است، دوران می‌کنند (شکل ۱). به‌ویژه، برای یک کمیت برداری  $v$ ، آنچه پس از میانگین‌گیری زمانی باقی می‌ماند، تصویر  $v_{\parallel}$  آن بر روی  $J$  است، یعنی برداری موازی با  $J$ ، که با رابطه زیر داده می‌شود

$$v_{\parallel} = \frac{j \cdot v}{j^2} j \quad (31)$$

که رابطه‌ای است در واقع مشابه (۳۰).

یادداشتها:

۱. از رابطه (۳۰) نمی‌توان نتیجه‌گیری کرد که، در فضای حالت کل [جمع مستقیم تمام زیرفضاهای  $\mathcal{E}(k, j)$ ،  $V$  و  $J$  متناسب‌اند. باید توجه داشت که ضریب تناسب  $\alpha(k, j)$  (یا  $(J \cdot V)_{k, j}$ ) به زیرفضای  $\mathcal{E}(k, j)$  انتخابی بستگی دارد. به‌علاوه، هر عملگر برداری  $V$  ممکن است دارای عناصر ماتریسی غیرصفر بین کنه‌های متعلق به زیرفضاهای متفاوت  $\mathcal{E}(k, j)$  باشد، در حالی که عناصر متناظر  $J$  همواره صفرند.

۲. یک عملگر برداری دیگر  $W$  را در نظر بگیرید. محدودیت آن به داخل  $\mathcal{E}(k, j)$  متناسب است با  $J$ ، و از این رو با محدودیت  $V$  نیز متناسب خواهد بود. بنابراین، در داخل یک زیرفضای  $\mathcal{E}(k, j)$ ، تمام عملگرهای برداری با یکدیگر متناسب‌اند.

با این همه، برای محاسبه ضریب تناسب میان  $V$  و  $W$ ، نمی‌توانیم به جای  $J$  در رابطه (۳۰)  $W$  را قرار بدهیم (که منجر به مقدار  $\langle W^2 \rangle_{k,j} / \langle V \cdot W \rangle_{k,j}$  می‌شد). در اثبات رابطه (۳۰)، از این حقیقت که در (۲۸)  $J$  با  $P(k, j)$  جابه‌جا می‌شود استفاده کردیم، در حالی که عموماً برای  $W$  این چنین نیست. برای محاسبه صحیح این ضریب تناسب، توجه داریم که، در داخل زیرفضای  $\mathcal{E}(k, j)$  داریم

$$W = \frac{\langle J \cdot W \rangle_{k,j}}{\langle J^2 \rangle_{k,j}} J \quad (32)$$

که با توجه به (۳۰) خواهیم داشت

$$V = \frac{\langle J \cdot V \rangle_{k,j}}{\langle J \cdot W \rangle_{k,j}} W \quad (33)$$

### ۳. کاربرد: محاسبه ضریب $g_J$ لاتده برای یک تراز اتمی

در این بخش، قضیه و یگنراکارت را در محاسبه اثر یک میدان مغناطیسی  $B$  بر روی ترازهای انرژی یک اتم، به کار خواهیم برد. خواهیم دید که این قضیه، محاسبات را به طور چشمگیری ساده می‌کند و ما را قادر می‌سازد که به روشی بسیار عمومی، پیش‌بینی کنیم که میدان مغناطیسی واکنشها را از بین می‌برد، و باعث ظاهر شدن ترازهای هم‌فاصله (از مرتبه اول در  $B$ ) می‌شود. اختلاف انرژی این حالتها با  $B$  و ثابت  $g_J$  (ضریب لاتده) که آنرا حساب خواهیم کرد متناسب است.

فرض کنید  $L$  تکانه زاویه‌ای مداری کل الکترونهای یک اتم (مجموع تکانه‌های زاویه‌ای مداری  $L_i$  تک تک آنها)، و  $S$  تکانه اسپینی کل آنها (مجموع اسپینهای  $S_i$  هر یک از آنها) باشد. تکانه زاویه‌ای داخلی کل اتم (با فرض اینکه اسپین هسته صفر باشد) برابر است با

$$J = L + S \quad (34)$$

هامیلتونی یک اتم، در غیاب میدان مغناطیسی، را  $H_0$  می‌نامیم؛  $H_0$  با  $J$  جابه‌جا می‌شود. فرض خواهیم کرد که  $H_0$ ،  $L^2$ ،  $S^2$ ،  $J^2$ ، و  $J_z$  تشکیل یک مجموعه کامل از مشاهده پذیرهای جابه‌جاپذیر بدهند، و ویژه بردارهای مشترک آنها را  $|E_0, L, S, J, M\rangle$  می‌نامیم؛ ویژه مقدارهای متناظر به ترتیب  $E_0$ ،  $L(L+1)\hbar^2$ ،  $S(S+1)\hbar^2$ ،  $J(J+1)\hbar^2$  و  $M\hbar$  هستند.

این فرضیه، برای اتمهای سبکی که جفت‌شدگی تکانه زاویه‌ای آنها از نوع  $L \cdot S$  است، معتبر است (مکمل ۲ از فصل ۶). اما، برای سایر اتمهای با جفت‌شدگی غیر از این نوع (مثلاً گازهای نادر پجز هلیوم)، این مطلب

۱. این ویژگی از ناوردایی انرژی اتم در اثر دوران تمام الکترونها حول محور گذرنده از مبدأ (محل هسته، که فرض می‌شود بدون حرکت است) نتیجه می‌شود. بنابراین  $H_0$  که در اثر دوران ناوردا می‌باشد، با  $J$  جابه‌جا می‌شود ( $H_0$ ). یک عملگر اسکالر است؛ مکمل ۲ از فصل ۶، بخش ۵-ب).

صحیح نیست، در این صورت، محاسباتی مبتنی بر قضیه ویگنر-اکارت، نظیر آنچه در اینجا ارائه شد می‌توان انجام داد؛ در عین حال دیدگاههای اصلی فیزیکی تغییری نمی‌کنند. به منظور سهولت، مطالعه خود را به موردی محدود خواهیم کرد که در آن،  $L$  و  $S$  در واقع اعداد کوانتومی خوبی برای تراز اتمی مورد مطالعه هستند.

### الف) واگنی دورانی؛ چندتاییها

کت  $J_{\pm}|E_0, L, S, J, M\rangle$  را در نظر بگیرید. بنا بر فرضیه بالا،  $J_{\pm}$  با  $H_0$  جابه‌جا می‌شود. بنابراین،  $J_{\pm}|E_0, L, S, J, M\rangle$  ویژه‌بردار  $H_0$  با ویژه‌مقدار  $E_0$  است. به علاوه، طبق خواص عمومی تکانه‌های زاویه‌ای و جمع آنها، داریم

$$J_{\pm}|E_0, L, S, J, M\rangle = \hbar\sqrt{J(J+1) - M(M \pm 1)}|E_0, L, S, J, M \pm 1\rangle \quad (35)$$

این رابطه نشان می‌دهد که، می‌توان با شروع از یک حالت  $|E_0, L, S, J, M\rangle$  سایر حالت‌های با همان انرژی را ساخت: حالت‌هایی که برای آنها  $-J \leq M \leq J$  است. در اینجا نتیجه می‌شود که ویژه‌مقدار  $E_0$  الزاماً حداقل  $(2J+1)$  بار واگن است. این یک واگنی اصلی است، زیرا به ناوردایی دورانی  $H_0$  مربوط می‌شود (یک واگنی اتفاقی نیز ممکن است وجود داشته باشد). در فیزیک اتمی، این تراز انرژی  $(2J+1)$  بار واگن، یک چندتایی نامیده می‌شود. ویژه‌زیرفضای وابسته به آن را، که توسط کتهای  $|E_0, L, S, J, M\rangle$ ، با  $M = J, J-1, \dots, -J$ ، پدید می‌آید، به صورت  $\mathcal{E}(E_0, L, S, J)$  می‌نویسیم.

ب) از بین بردن واگنی توسط یک میدان مغناطیسی؛ نمودار انرژی  
در حضور یک میدان مغناطیسی  $\mathbf{B}$  موازی با  $Oz$ ، هامیلتونی تبدیل می‌شود به (مکمل ۴ از فصل ۷)

$$H + H_0 + H_1 \quad (36)$$

که در آن

$$H_1 = \omega_L(L_z + 2S_z) \quad (37)$$

(ضریب ۲ در جلوی  $S_z$ ، از نسبت ژیرومغناطیسی اسپین الکترون ناشی می‌شود). "بسامد زاویه‌ای



لامبور<sup>۱</sup>  $\omega_L$  الکترون را، برحسب جرم  $m$  و بار  $q$  الکترون، به صورت زیر تعریف می‌کنیم

$$\omega_L = -\frac{qB}{2m} = -\frac{\mu_B B}{\hbar} \quad (38)$$

(که  $\mu_B = g\hbar/2m$  مگنتون بور است).

برای محاسبه اثر میدان مغناطیسی بر ترازهای انرژی اتم، فقط عناصر ماتریسی  $H_1$  در داخل زیرفضای  $\mathcal{E}(E_0, L, S, J)$  وابسته به چندتایی مورد مطالعه را، در نظر خواهیم گرفت. نظریه اختلال، که در فصل ۱۱ تشریح خواهد شد، این روش را، وقتی  $B$  خیلی بزرگ نباشد، توجیه می‌کند.

در داخل زیرفضای  $\mathcal{E}(E_0, L, S, J)$ ، بنابر قضیه تصویر (۲ج) داریم

$$\mathbf{L} = \frac{\langle \mathbf{L} \cdot \mathbf{J} \rangle_{E_0, L, S, J}}{J(J+1)\hbar^2} \mathbf{J} \quad (39\text{الف})$$

$$\mathbf{S} = \frac{\langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{J} \rangle_{E_0, L, S, J}}{J(J+1)\hbar^2} \mathbf{J} \quad (39\text{ب})$$

که  $\langle \mathbf{L} \cdot \mathbf{J} \rangle_{E_0, L, S, J}$  و  $\langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{J} \rangle_{E_0, L, S, J}$  به ترتیب معرف مقادیر میانگین عملگرهای  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{J}$  و  $\mathbf{S} \cdot \mathbf{J}$ ، برای حالت‌های سیستم متعلق به  $\mathcal{E}(E_0, L, S, J)$ ، می‌باشند. حال می‌توان نوشت

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{J} = \mathbf{L} \cdot (\mathbf{L} + \mathbf{S}) = L^2 + \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2) \quad (40\text{الف})$$

همچنین

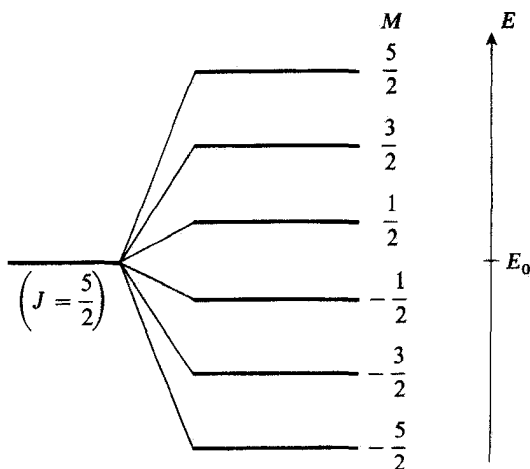
$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{J} = \mathbf{S} \cdot (\mathbf{L} + \mathbf{S}) = S^2 + \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2) \quad (40\text{ب})$$

نتیجه می‌شود که

$$\langle \mathbf{L} \cdot \mathbf{J} \rangle_{E_0, L, S, J} = L(L+1)\hbar^2 + \frac{\hbar^2}{2}[J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)] \quad (41\text{الف})$$

و

$$\langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{J} \rangle_{E_0, L, S, J} = S(S+1)\hbar^2 + \frac{\hbar^2}{2}[J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)] \quad (41\text{ب})$$



شکل ۲ نمودار انرژی، که از بین رفتن  $(2J + 1)$  بار واگنی یک چندتایی (در اینجا  $J = 5/2$ ) را توسط یک میدان مغناطیسی مانا  $B$  نشان می‌دهد. فاصله بین دو تراز متوالی با  $|B|$  و ضریب  $g_J$  لاتدا متناسب است.

با قرار دادن روابط (۴۱) در (۳۹) و سپس در (۳۷)، می‌توان نشان داد که، در داخل زیرفضای  $\mathcal{E}(E_0, L, S, J)$  عملگر  $H_1$  از رابطه زیر به دست می‌آید

$$H_1 = g_J \omega_L J_z \quad (42)$$

که ضریب  $g_J$  لاتده، متعلق به چندتایی تحت بررسی، برابر است با

$$g_J = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (43)$$

رابطه (۴۲) می‌رساند که ویژه‌حالت‌های  $H_1$  در داخل زیر فضای  $\mathcal{E}(E_0, L, S, J)$  همان بردارهای پایه  $|E_0, L, S, J, M\rangle$ ، با ویژه‌مقدارهای زیرند

$$E_1(M) = g_J M \hbar \omega_L \quad (44)$$

مشاهده می‌کنیم که میدان مغناطیسی واگنی چندتایی را کاملاً از بین می‌برد. همان‌طور که در نمودار شکل ۲ نشان داده شده است، مجموعه‌ای از  $(2J + 1)$  تراز هم‌فاصله ظاهر می‌شود، که هر کدام مربوط به یک مقدار ممکن از  $M$  است. این نمودار، امکان می‌دهد که مطالعه قبلی

خود پیرامون قطبش و بسامد خطوط نوری گسیل شده توسط یک اتم تخیلی با یک الکترون بدون اسپین ("پدیده بهنجار زیمن"، مکمل ۲ از فصل ۷) را به اتمهای چندالکترونی که اسپینهای آنها نیز باید به حساب آورده شود، تعمیم بدهیم.

### مراجع برای مطالعه بیشتر

Tensor operators: Schiff (1.18), §28; Messiah (1.17), chap. XIII, §VI; Edmonds (2.21), chap. 5; Rose (2.19), chap. 5; Meijer and Bauer (2.18), chap. 6.

# مکمل ۵

## گشتاورهای چندقطبی الکتریکی

۱. تعریف گشتاورهای چندقطبی
  - الف) بسط پتانسیل برحسب هماهنگهای کروی
  - ب) تعبیر فیزیکی عملگرهای چندقطبی
  - ج) پارامترهای عملگرهای چندقطبی
  - د) روش دیگری برای معرفی عملگرهای چندقطبی
۲. عناصر ماتریسی عملگرهای چندقطبی الکتریکی
  - الف) عبارت کلی برای عناصر ماتریسی
  - ب) قواعد گزینش
  - ج) پی آمدهای فیزیکی

یک سیستم  $\mathcal{S}$  متشکل از  $N$  ذره باردار واقع در یک پتانسیل الکتروستاتیکی معین  $U(\mathbf{r})$  را در نظر بگیرید. در این مکمل، با معرفی گشتاورهای چندقطبی الکتریکی سیستم  $\mathcal{S}$ ، چگونگی محاسبه انرژی برهمکنش سیستم  $\mathcal{S}$  با پتانسیل  $U(\mathbf{r})$  را نشان خواهیم داد. ابتدا نحوه معرفی این گشتاور را در فیزیک کلاسیک مرور می‌کنیم. سپس عملگرهای کوانتوم مکانیکی مربوط را خواهیم ساخت، و خواهیم دید که چگونه در بسیاری از موارد، استفاده از آنها بررسی خواص الکتریکی یک سیستم کوانتوم مکانیکی را ساده می‌کند. این به خاطر این است که این عملگرها دارای خواص کلی‌ای هستند که مستقل از سیستم تحت بررسی است، و بخصوص در قواعد گزینش معینی صدق می‌کنند. برای مثال، اگر حالت سیستم  $\mathcal{S}$  مورد مطالعه دارای یک تکانه زاویه‌ای  $z$  باشد [یعنی، ویژه‌بردار  $J^2$  با ویژه‌مقدار  $\hbar^2(z+1)z$  باشد]، خواهیم دید که مقادیر متوسط تمام عملگرهای چندقطبی با مرتبه بالاتر از  $z$ ، الزاماً صفرند.

## ۱. تعریف گشتاورهای چندقطبی

الف) بسط پتانسیل برحسب هماهنگهای کروی

برای سهولت، یک سیستم متشکل از یک تک‌ذره با بار  $q$  و مکان  $\mathbf{r}$  را که در پتانسیل  $U(\mathbf{r})$  قرار داده شده است، در نظر می‌گیریم. سپس، نتایج به‌دست آمده را به سیستمهای  $N$  ذره‌ای تعمیم می‌دهیم.

۱. مورد تک ذره

در فیزیک کلاسیک، انرژی پتانسیل ذره برابر است با

$$V(r) = qU(r) \quad (۱)$$

چون هماهنگهای کروی برای توابعی از  $\theta$  و  $\varphi$  تشکیل یک پایه می دهند، می توان  $U(r)$  را به صورت زیر بسط داد

$$U(r) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l f_{l,m}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (۲)$$

فرض می کنیم که بارهای مولد پتانسیل الکتروستاتیکی در خارج ناحیه حضور ذره مورد مطالعه قرار داشته باشند. در این صورت، در تمام این ناحیه داریم

$$\Delta U(r) = 0 \quad (۳)$$

حال، می دانیم که [رابطه (۱۵) از فصل ۷] لاپلاسی  $\Delta$  توسط رابطه زیر به عملگر دیفرانسیلی  $L^2$  که روی متغیرهای زاویه ای  $\theta$  و  $\varphi$  اثر می کند، بستگی دارد

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} \quad (۴)$$

همچنین، از تعریف هماهنگهای کروی نتیجه می شود

$$L^2 Y_l^m(\theta, \varphi) = l(l+1) \hbar^2 Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (۵)$$

از این رو می توان لاپلاسی بسط (۲) را به سادگی محاسبه کرد. اگر، با استفاده از (۳)، هر یک از جملاتی را که به این ترتیب به دست آمده است مساوی صفر قرار دهیم، نتیجه می شود

$$\left[ \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] f_{l,m}(r) = 0 \quad (۶)$$

این معادله دارای دو جواب مستقل خطی،  $r^l$  و  $r^{-(l+1)}$  است. چون  $U(\mathbf{r})$  به ازااء  $r = 0$  نامتناهی نیست، بنابراین باید جواب زیر را انتخاب کنیم

$$f_{l,m}(r) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} c_{l,m} r^l \quad (7)$$

که در آن  $c_{l,m}$  ضرایبی هستند که به پتانسیل مورد نظر بستگی دارند (ضریب  $\sqrt{4\pi/(2l+1)}$  همان طوری که بعداً خواهیم دید، برای سهولت معرفی می شود). بنابراین، (۲) را می توان به صورت زیر نوشت

$$V(\mathbf{r}) = qU(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_{l,m} \mathcal{Q}_l^m(\mathbf{r}) \quad (8)$$

که توابع  $\mathcal{Q}_l^m(\mathbf{r})$  را توسط عبارتهایشان در مختصات کروی به صورت زیر تعریف می کنیم

$$\mathcal{Q}_l^m(\mathbf{r}) = q \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} r^l Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (9)$$

همین نوع بسط، در مکانیک کوانتومی هم امکان پذیر است؛ عملگر انرژی پتانسیل ذره عبارت است از  $V(\mathbf{R}) = qU(\mathbf{R})$ ، که عناصر ماتریسی آن در نمایش  $\{|\mathbf{r}\rangle\}$  عبارت اند از (مکمل ۲، بخش ۴-۱۰)

$$\langle \mathbf{r} | qU(\mathbf{R}) | \mathbf{r}' \rangle = qU(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (10)$$

در این صورت از بسط (۸) نتیجه می شود

$$V(\mathbf{R}) = qU(\mathbf{R}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_{l,m} Q_l^m \quad (11)$$

که عملگرهای  $Q_l^m$  به صورت زیر تعریف می شوند

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | Q_l^m | \mathbf{r}' \rangle &= \mathcal{Q}_l^m(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ &= q \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} r^l Y_l^m(\theta, \varphi) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \end{aligned} \quad (12)$$

$Q_l^m$  "عملگرهای چندقطبی الکتریکی" نامیده می‌شوند.

۲. تعمیم به  $N$  ذره

حال  $N$  ذره با مکانهای  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N$  و بارهای  $q_1, q_2, \dots, q_N$  را در نظر بگیرید. انرژی جفت‌شدگی این ذرات با پتانسیل خارجی  $U(\mathbf{r})$  برابر است با

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{n=1}^N q_n U(\mathbf{r}_n) \quad (13)$$

استدلال بخش گذشته را می‌توان بلافاصله تعمیم داد و ثابت کرد

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_{l,m} \mathcal{Q}_l^m(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (14)$$

که در آن، ضرایب  $c_{l,m}$  [که به پتانسیل  $U(\mathbf{r})$  بستگی دارند] همان مقادیر بخش قبلی را دارند، و توابع  $\mathcal{Q}_l^m$  در مختصات قطبی به صورت زیر تعریف می‌شوند

$$\mathcal{Q}_l^m(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} \sum_{n=1}^N q_n(r_n)^l Y_l^m(\theta_n, \varphi_n) \quad (15)$$

( $\theta_n, \varphi_n$  زوایای قطبی  $\mathbf{r}_n$  هستند). بنابراین، گشاورهای چندقطبی سیستم کل برابر با مجموع گشاورهای وابسته به هر یک از ذرات‌اند.

همچنین، در مکانیک کوانتومی، انرژی جفت‌شدگی این  $N$  ذره با پتانسیل خارجی، توسط عملگر زیر توصیف می‌شود

$$V(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_N) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} c_{l,m} Q_l^m \quad (16)$$

که

$$\begin{aligned} & \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N | Q_l^m | \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2, \dots, \mathbf{r}'_N \rangle \\ &= \mathcal{Q}_l^m(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2) \cdots \delta(\mathbf{r}_N - \mathbf{r}'_N) \end{aligned} \quad (17)$$

ب) تعبیر فیزیکی عملگرهای چندقطبی

۱. عملگر  $Q_0^\circ$ ؛ بار کل سیستم

چون  $Y_0^\circ$  یک عدد ثابت است ( $Y_0^\circ = 1/\sqrt{4\pi}$ )، از تعریف (۱۵) نتیجه می‌شود که

$$\mathcal{Q}_0^\circ = \sum_{n=1}^N q_n \quad (18)$$

بنابراین، عملگر  $Q_0^\circ$  یک مقدار ثابت است که برابر است با بار کل سیستم.

بنابراین، جمله اول بسط (۱۴) انرژی جفت‌شدگی سیستم با پتانسیل  $U(\mathbf{r})$  را به دست می‌دهد، در صورتی که فرض شود تمام ذرات در مبدأ واقع شده‌اند. بدیهی است که اگر مقدار نسبی  $U(\mathbf{r})$  در فواصلی در حدود فاصله ذرات مختلف از  $O$ ، تغییرات زیادی پیدا نکند (اگر سیستم  $\mathcal{S}$  در  $O$  متمرکز باشد، این فاصله از مرتبه ابعاد  $\mathcal{S}$  است)، این یک تقریب خوب است. به علاوه، مورد خاصی وجود دارد که در آن، بسط (۱۴) دقیقاً با جمله اول داده می‌شود؛ موردی که در آن پتانسیل  $U(\mathbf{r})$  یکنواخت، و در نتیجه متناسب با هماهنگی کروی  $l = 0$  است.

۲. عملگرهای  $Q_l^m$ ؛ گشتاور دوقطبی الکتریکی

بنابر (۱۵) و رابطه مربوط به هماهنگیهای کروی  $Y_l^m$  [مکمل ۵ از فصل ۶، معادلات (۳۲)].

$$\begin{cases} \mathcal{Q}_1^1 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \sum_n q_n (x_n + iy_n) \\ \mathcal{Q}_1^0 = \sum_n q_n z_n \\ \mathcal{Q}_1^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_n q_n (x_n - iy_n) \end{cases} \quad (19)$$

این سه کمیت را می‌توان به‌عنوان مؤلفه‌های یک بردار در پایه مختلط متشکل از سه بردار  $e_1, e_0, e_{-1}$ ، در نظر گرفت

$$\mathcal{Q} = -\mathcal{Q}_1^{-1} e_1 + \mathcal{Q}_1^0 e_0 - \mathcal{Q}_1^1 e_{-1} \quad (20)$$

که در آن

$$e_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(e_x + ie_y); e_0 = e_z; e_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(e_x - ie_y) \quad (21)$$



که  $e_x, e_y, e_z$  سه بردار یکهٔ محورهای  $Ox, Oy, Oz$  و  $Oz$  اند). در این صورت مؤلفه‌های این بردار  $\mathcal{D}$  بر روی محورهای  $Oxyz$  عبارت‌اند از

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_x^i &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\mathcal{D}_1^{-1} - \mathcal{D}_1^1] = \sum_n q_n x_n \\ \mathcal{D}_y^i &= \frac{i}{\sqrt{2}}[\mathcal{D}_1^{-1} + \mathcal{D}_1^1] = \sum_n q_n y_n \\ \mathcal{D}_z^i &= \mathcal{D}_1^0 = \sum_n q_n z_n \end{aligned} \quad (22)$$

از روابط بالا سه مؤلفهٔ گشتاور دوقطبی الکتریکی کل سیستم  $\mathcal{P}$  نسبت به  $O$  را تشخیص می‌دهیم

$$\mathcal{D} = \sum_{n=1}^N q_n \mathbf{r}_n \quad (23)$$

بنابراین، عملگرهای  $Q_i^m$  در واقع همان مؤلفه‌های دوقطبی الکتریکی

$$\mathbf{D} = \sum_n q_n \mathbf{R}_n$$

هستند.

به علاوه، از روابط (۱۹) می‌توانیم جملات  $l = 1$  بسط (۱۴) را به صورت زیر بنویسیم

$$\begin{aligned} \sum_{m=-1}^{+1} c_{l,m} \mathcal{D}_l^m &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(c_{1,1} - c_{1,-1}) \sum_n q_n x_n \\ &\quad - \frac{i}{\sqrt{2}}(c_{1,1} + c_{1,-1}) \sum_n q_n y_n + c_{1,0} \sum_n q_n z_n \end{aligned} \quad (24)$$

اینک نشان می‌دهیم که ترکیبهای ضرایب  $c_{l,m}$  در رابطهٔ بالا چیزی غیر از مؤلفه‌های گرادبان پتانسیل  $U(\mathbf{r})$  در  $\mathbf{r} = 0$  نیستند. اگر از بسط (۸) پتانسیل  $U(\mathbf{r})$  گرادبان بگیریم، جملهٔ  $l = 0$  (که یک مقدار ثابت است) حذف می‌شود، جملهٔ  $l = 1$  را می‌توان به صورتی مشابه (۲۴) نوشت، لذا داریم

$$[\nabla U(\mathbf{r})]_{\mathbf{r}=0} = -\frac{1}{\sqrt{2}}(c_{1,1} - c_{1,-1})\mathbf{e}_x - \frac{i}{\sqrt{2}}(c_{1,1} + c_{1,-1})\mathbf{e}_y + c_{1,0}\mathbf{e}_z \quad (25)$$

اما برای  $l > 1$ ، جملات بسط (۸) عبارت از چند جمله‌ایهایی از  $x$ ،  $y$ ، و  $z$  هستند که درجه آنها از ۱ بزرگتر است (بخشهای ۳ و ۴ در زیر) و در نتیجه در گرادینان، هنگامی که  $\mathbf{r} = 0$  است، هیچ سهمی ندارند. بنابراین، با استفاده از (۲۳) و (۲۵)، جمله  $l = 1$  از بسط (۱۴) را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\left( \sum_{n=1}^N q_n \mathbf{r}_n \right) \cdot (\nabla U)_{\mathbf{r}=0} = -\mathcal{D} \cdot \mathcal{E}(\mathbf{r}=0) \quad (26)$$

که در آن

$$\mathcal{E}(\mathbf{r}) = -\nabla U(\mathbf{r}) \quad (27)$$

میدان الکتریکی در نقطه  $\mathbf{r}$  است. بنابراین، (۲۶) همان عبارت کاملاً شناخته شده انرژی جفت شدگی میان یک دوقطبی الکتریکی و میدان  $\mathcal{E}$  است.

یادداشتها:

- در فیزیک، اغلب با سیستمهایی روبه‌رو می‌شویم که بار کل آنها صفر است (به عنوان مثال، اتمها). در این صورت  $\mathcal{D} = 0$  برابر با صفر است، و اولین عملگر چندقطبی‌ای که در بسط (۱۴) وارد می‌شود گشتاور دوقطبی الکتریکی است. این بسط، اغلب می‌تواند به جملات  $l = 1$  محدود باشد [بنابراین تنها رابطه (۲۶) وجود دارد]، زیرا جملاتی که برای آنها  $l \geq 2$  است. عموماً خیلی کوچکترند (به عنوان مثال، وقتی تغییرات میدان الکتریکی در فواصلی حدود فاصله ذرات از مبدأ ناچیز باشد، یک چنین حالتی خواهیم داشت؛ به علاوه، جملات  $l \geq 2$  در یک مورد خاص دقیقاً صفرند: حالتی که در آن میدان الکتریکی یکنواخت باشد [بخشهای ۳ و ۴ در زیر]).
- برای سیستم  $\mathcal{S}$  متشکل از دو ذره با بارهای غیرناهمنام  $+q$  و  $-q$  (یک دوقطبی الکتریکی)، گشتاور دوقطبی  $\mathcal{D}$  برابر است با

$$\mathcal{D} = q(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (28)$$

بنابراین، مقدار آن، که به مکان "ذره نسبی" (فصل VII بخش ۷-۲) وابسته به سیستم  $\mathcal{S}$  مربوط می‌شود، به انتخاب مبدأ  $O$  بستگی ندارد. در واقع، این یک ویژگی عمومی تر است: به آسانی می‌توان نشان داد که گشتاور دوقطبی الکتریکی هر سیستم خنثای الکتریکی  $\mathcal{S}$ ، مستقل از انتخاب مبدأ  $O$  است.

۳. عملگرهای  $Q_l^m$ ؛ گشاور چهارقطبی الکتریکی

با استفاده از رابطه صریح  $Y_l^m$  [مکمل ۱ از فصل ۶، روابط (۳۳)] به سادگی می توان نشان داد

$$\begin{cases} \mathcal{Q}_l^{\pm 2} = \frac{\sqrt{6}}{4} \sum_n q_n (x_n \pm iy_n)^2 \\ \mathcal{Q}_l^{\pm 1} = \mp \frac{\sqrt{6}}{2} \sum_n q_n z_n (x_n \pm iy_n) \\ \mathcal{Q}_l^0 = \frac{1}{4} \sum_n q_n (3z_n^2 - r_n^2) \end{cases} \quad (29)$$

به این طریق، پنج مؤلفه گشاور چهارقطبی الکتریکی سیستم  $\mathcal{S}$  را به دست می آوریم. با آنکه بار کل سیستم  $\mathcal{S}$  یک اسکالر، و گشاور دوقطبی آن یک بردار،  $\mathcal{D}$  است، می توان نشان داد که گشاور چهارقطبی آن یک تانسور درجه دو است. به علاوه، با استدلالی مشابه با بخش ۲ می توان جملات  $l = 2$  از بسط (۱۴) را به صورت زیر نوشت

$$\sum_{m=-2}^{+2} c_{l,m} \mathcal{Q}_l^m = \sum_{i,j} \left[ \frac{\partial^2 U}{\partial x^i \partial x^j} \right]_{r=0} \sum_{n=1}^N q_n x_n^i x_n^j \quad (30)$$

(که  $x^i, x^j$  برابرند با  $x, y$  یا  $z$ ). این جملات، جفت شدگی بین گشاور چهارقطبی الکتریکی سیستم  $\mathcal{S}$  و گرادیان میدان  $\mathcal{E}(\mathbf{r})$ ، در نقطه  $\mathbf{r} = 0$  را توصیف می کنند.

۴. تعمیم: گشاور  $l$  قطبی الکتریکی

می توانیم استدلالهای قبلی را تعمیم بدهیم و از عبارت کلی هماهنگهای کروی نشان بدهیم (مکمل ۱ از فصل ۶، روابط (۲۶) یا (۳۰)) که:

— کمیتهای  $\mathcal{Q}_l^m$ ، چند جمله ایهایی از درجه  $l$  هستند (که نسبت به  $x, y, z$  همگن اند).  
— سهم جمله های  $l$  در بسط (۱۴)، مشتقات مرتبه  $l$  پتانسیل  $U(\mathbf{r})$ ، محاسبه شده در  $\mathbf{r} = 0$  را در بر می گیرند.

از این رو ملاحظه می کنیم که رابطه (۱۴) برای پتانسیل، یک بسط رشته تیلور در مجاورت مبدأ است. وقتی تغییر پتانسیل  $U(\mathbf{r})$  در ناحیه مجاور  $\mathcal{S}$  پیچیده تر شود، جملات مرتبه بالاتری را باید در بسط نگه داشت. به عنوان مثال، اگر  $U(\mathbf{r})$  ثابت باشد، دیدیم که جمله  $l = 0$  تنها جمله ای است که وارد می شود. اگر میدان  $\mathcal{E}(\mathbf{r})$  یکنواخت باشد، جملات  $l = 1$  را نیز باید به بسط افزود. اگر گرادیان میدان  $\mathcal{E}$  یکنواخت باشد، باید داشته باشیم  $l \leq 2$ ، و الی آخر.

## ج) پاریتته عملگرهای چندقطبی

بالاخره، پاریتته  $Q_i^m$  را بررسی می‌کنیم. می‌دانیم که پاریتته  $Y_l^m$  برابر است با  $(-1)^l$ . [فصل ۶، رابطه (۲۸)]. بنابراین (مکمل ۲، بخش ۹-۲)، عملگر چندقطبی الکتریکی  $Q_i^m$  دارای پاریتته معینی برابر با  $(-1)^l$  و مستقل از  $m$  است. این ویژگی در آنچه به دنبال می‌آید، مورد استفاده قرار خواهد گرفت.

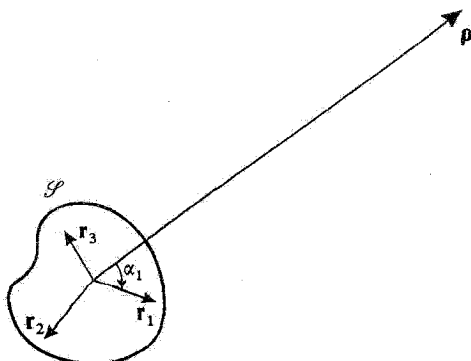
## د) روش دیگری برای معرفی عملگرهای چندقطبی

همان سیستم متشکل از  $N$  ذره باردار بخش ۱ الف را در نظر می‌گیریم. اما به جای بررسی انرژی برهم‌کنش این سیستم با یک پتانسیل خارجی معین  $U(\mathbf{r})$ ، سعی خواهیم کرد پتانسیل  $W(\rho)$  حاصل از این بارها در یک نقطه دور  $\rho$  را محاسبه کنیم (شکل ۱). برای سهولت، از مکانیک کلاسیک برای بررسی این مسئله استفاده خواهیم کرد. در این صورت پتانسیل  $W(\rho)$  برابر است با

$$W(\rho) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{n=1}^N \frac{q_n}{|\rho - \mathbf{r}_n|} \quad (31)$$

حال، اگر  $|\rho| \gg |\mathbf{r}_n|$  باشد می‌توان نشان داد که

$$\frac{1}{|\rho - \mathbf{r}_n|} = \frac{1}{\rho} \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{r_n}{\rho}\right)^l P_l(\cos \alpha_n) \quad (32)$$



شکل ۱ پتانسیل  $W(\rho)$  که توسط یک سیستم  $S$  متشکل از  $N$  ذره باردار (به مکانهای  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots$ ) در یک نقطه دور به وجود می‌آید، می‌تواند برحسب گشتاورهای چندقطبی  $S$  بیان شود.

که  $\alpha_n$  نشان دهنده زاویه  $(\rho, r_n)$  و  $P_l$  چندجمله‌ای مرتبه  $l$  لژاندر است. با استفاده از قضیه جمع هماهنگهای کروی (مکمل ۱ از فصل ۶، بخش ۲-۵-۴)، می‌توان نوشت

$$P_l(\cos \alpha_n) = \frac{\sqrt{4\pi}}{\sqrt{2l+1}} \sum_{m=-l}^{+l} (-1)^m Y_l^{-m}(\theta_n, \varphi_n) Y_l^m(\Theta, \Phi) \quad (33)$$

که  $\Theta$  و  $\Phi$  زوایای قطبی  $\rho$  هستند. با قرار دادن (۳۲) و (۳۳) در (۳۱)، بالاخره نتیجه می‌شود

$$W(\rho) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} (-1)^m \mathcal{Q}_l^{-m} \frac{1}{\rho^{l+1}} Y_l^m(\Theta, \Phi) \quad (34)$$

که  $\mathcal{Q}_l^m(r_1, r_2, \dots, r_N)$  توسط رابطه (۱۵) تعریف می‌شود.

رابطه (۳۴) نشان می‌دهد که مشخص شدن  $\mathcal{Q}_l^m$ ، به‌طور کامل پتانسیل حاصل از سیستم ذرات را در نواحی فضای خارجی سیستم  $\mathcal{S}$  تعریف می‌کند. بنابراین، ملاحظه می‌کنیم که پتانسیل  $W(\rho)$  برابر است با مجموع تعدادی نامتناهی جمله:

۱. جمله  $l=0$  سهم بار کل سیستم را می‌دهد. این جمله، همسانگرد است (به  $\Theta$  و  $\Phi$  بستگی ندارد) و می‌توان آن را به‌صورت زیر نوشت

$$W_0(\rho) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\rho} \sum_n q_n \quad (35)$$

این همان پتانسیل  $1/\rho$  است که اگر تمام بارها در  $O$  قرار می‌داشتند. توسط آنها ایجاد می‌شد. اگر سیستم کلاً خنثی باشد. این مقدار صفر است.

۲. جمله  $l=1$  سهم گشتاور دوقطبی الکتریکی  $\mathcal{D}$  سیستم را می‌دهد. با انجام تبدیلهایی مشابه با آنچه در بخش ۲ انجام شد، می‌توان نشان داد که این سهم را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$W_1(\rho) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathcal{D} \cdot \rho}{\rho^3} \quad (36)$$

این پتانسیل با افزایش  $\rho$  به‌صورت  $1/\rho^2$  کاهش می‌یابد.

۳. به‌همین طریق، جملات  $l=2, 3, \dots$ ، سهمهای گشتاورهای چندقطبی متوالی سیستم مورد مطالعه در پتانسیل  $W(\rho)$  را بیان می‌کنند. با افزایش  $\rho$  هر یک از این سهمها به‌صورت

$1/\rho^{l+1}$  کاهش می‌یابد، و وابستگی زاویه‌ای آن توسط یک هماهنگ‌گروی مرتبه  $l$  بیان می‌شود. به علاوه، از (۳۴) و (۱۵) ملاحظه می‌شود که پتانسیل مربوط به گشتاور چندقطبی  $\mathcal{D}_l$  حداکثر از مرتبه بزرگی  $(d/\rho)^l \times W_0(\rho)$  است، که در آن  $d$  ماکزیموم فاصله ذرات مختلف سیستم  $\mathcal{S}$  از مبدأ است. بنابراین، اگر پتانسیل در نقطه‌ای مانند  $\rho$  مورد نظر باشد، به طوری که  $\rho \gg d$  (پتانسیل در یک نقطه دور)، جملات  $W_l(\rho)$  با افزایش  $l$  به سرعت کاهش می‌یابند، و به این ترتیب اگر فقط پایینترین مقادیر  $l$  را در (۳۴) نگهداریم، خطای زیادی مرتکب نمی‌شویم.

یادداشت:

اگر می‌خواستیم میدان مغناطیسی حاصل از یک سیستم از بارهای متحرک را حساب کنیم، می‌توانستیم گشتاورهای چندقطبی مغناطیسی سیستم را به روش مشابهی تعریف کنیم: گشتاور دوقطبی مغناطیسی<sup>۱</sup>، گشتاور چهارقطبی مغناطیسی و غیره. پاریته‌های گشتاورهای مغناطیسی؛ مخالف با پاریته‌های گشتاورهای الکتریکی نظیر هستند: گشتاور دوقطبی مغناطیسی زوج است، گشتاور چهارقطبی مغناطیسی فرد است و الی آخر. این ویژگی از این واقعیت ناشی می‌شود که میدان الکتریکی یک بردار قطبی است و حال آنکه میدان مغناطیسی، یک بردار محوری است.

## ۲. عناصر ماتریسی عملگرهای چندقطبی الکتریکی

مجدداً، برای سادگی، سیستمی متشکل از یک تک‌ذره بدون اسپین را در نظر می‌گیریم. اما، تعمیم آن به سیستمهای  $N$  ذره‌ای هیچ مشکل نظری ایجاد نمی‌کند.

فضای حالت  $\mathcal{E}_r$  ذره توسط یک پایه راست‌هنجار  $\{|\chi_{n,l,m}\rangle\}$ ، از ویژه‌بردارهای مشترک  $L^2$  [ویژه‌مقدار  $l(l+1)\hbar^2$  و  $L_z$  (ویژه‌مقدار  $m\hbar$ )، پدید می‌آید. عناصر ماتریسی یک عملگر چندقطبی  $Q_l^m$  را در چنین پایه‌ای تعیین خواهیم کرد.

### الف) عبارت کلی برای عناصر ماتریسی

#### ۱. بسط عناصر ماتریسی

از نتایج کلی فصل ۷ می‌دانیم که تابع موجهای وابسته به حالت‌های  $|\chi_{n,l,m}\rangle$  الزاماً به شکل زیرند

$$\chi_{n,l,m}(\mathbf{r}) = R_{n,l}(r)Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (37)$$

۱. گشتاور چندقطبی مغناطیسی از مرتبه  $l = 0$  (تک قطبی مغناطیسی) وجود ندارد. این نتیجه به این حقیقت مربوط است که میدان مغناطیسی، که بر طبق معادلات ماکسول واگرایی آن صفر است، دارای یک شار پایسته است.

بنابراین، با استفاده از (۱۲)، می‌توانیم عنصر ماتریسی عملگر  $Q_l^m$  به صورت زیر بنویسیم

$$\begin{aligned} & \langle \chi_{n_1, l_1, m_1} | Q_l^m | \chi_{n_2, l_2, m_2} \rangle = \\ & = \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \chi_{n_1, l_1, m_1}^*(r, \theta, \varphi) Q_l^m(r, \theta, \varphi) \chi_{n_2, l_2, m_2}(r, \theta, \varphi) \\ & = q \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} \int_0^\infty r^2 dr R_{n_1, l_1}^*(r) R_{n_2, l_2}(r) r^l \int_0^\pi \sin \theta d\theta \\ & \quad \times \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{l_1}^{m_1*}(\theta, \varphi) Y_l^m(\theta, \varphi) Y_{l_2}^{m_2}(\theta, \varphi) \quad (38) \end{aligned}$$

بنابراین، در عنصر ماتریسی مورد مطالعه، یک انتگرال شعاعی داریم و یک انتگرال زاویه‌ای. به علاوه، انتگرال زاویه‌ای را می‌شود ساده کرد؛ با استفاده از رابطه همیوخ مختلط برای هماهنگهای کروی [فصل ۶، رابطه (۲۹)] و رابطه (۲۶) از مکمل ۳ فصل ۱۰ قضیه ویگنر-اکارت برای هماهنگهای کروی، می‌توان نشان داد که این انتگرال را می‌شود به صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned} & (-1)^{m_1} \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{l_1}^{-m_1}(\theta, \varphi) Y_l^m(\theta, \varphi) Y_{l_2}^{m_2}(\theta, \varphi) = \\ & = \sqrt{\frac{(2l+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l_1+1)}} \langle l_2, l_2; 0, 0 | l_1, 0 \rangle \langle l_2, l_2; m_2, m | l_1, m_1 \rangle \quad (39) \end{aligned}$$

بالاخره، خواهیم داشت

$$\begin{aligned} & \langle \chi_{n_1, l_1, m_1} | Q_l^m | \chi_{n_2, l_2, m_2} \rangle = \\ & = \frac{1}{\sqrt{2l_1+1}} \langle \chi_{n_1, l_1} \| Q_l \| \chi_{n_2, l_2} \rangle \langle l_2, l_2; m_2, m | l_1, m_1 \rangle \quad (40) \end{aligned}$$

که "عنصر ماتریسی ساده‌شده"  $\langle \chi_{n_1, l_1} \| Q_l \| \chi_{n_2, l_2} \rangle$ ، متعلق به عملگر چندقطبی الکتریکی مرتبه  $l$ ام، به صورت زیر تعریف می‌شود

$$\begin{aligned} & \langle \chi_{n_1, l_1} \| Q_l \| \chi_{n_2, l_2} \rangle = q \sqrt{2l_2+1} \langle l_2, l_2; 0, 0 | l_1, 0 \rangle \\ & \quad \times \int_0^\infty dr r^{l+1} R_{n_1, l_1}^*(r) R_{n_2, l_2}(r) \quad (41) \end{aligned}$$

رابطه (۴۰)، در مورد خاص عملگرهای چندقطبی الکتريکی، یک قضیه عمومی را بیان می‌کند که کاربرد آن را در مورد عملگرهای برداری قبلاً تشریح کردیم (مکمل ۴ از فصل ۱۰): قضیه ویگنر-اکارت.

یادداشت:

در اینجا مطالعه خود را به سیستم  $\mathcal{S}$ ، متشکل از یک ذره بدون اسپین، محدود کرده‌ایم. با وجود این، اگر یک سیستم متشکل از  $N$  ذره اسپین‌دار را در نظر بگیریم، می‌توانیم نتایجی را که به دست آوردیم تعمیم بدهیم. برای این کار، باید تکانه زاویه‌ای  $J$  کل سیستم (مجموع تکانه‌های زاویه‌ای مداري و اسپینی  $N$  ذره) را معرفی کنیم، و ویژه بردارهای مشترک  $J^2$  و  $J_z$  را به  $|\chi_{n,j,m}\rangle$  نشان بدهیم. به این ترتیب، می‌توانیم رابطه‌ای مشابه با (۴۰) به دست بیاوریم، که در آن  $l_1$  و  $l_2$  با  $j_1$  و  $j_2$  جایگزین شده‌اند (مکمل ۷ از فصل ۱۰، تمرین ۸). با این همه، بسته به سیستم فیزیکی مورد نظر، اعداد کوانتومی  $j_1, j_2, m_1$  و  $m_2$  می‌توانند اعداد صحیح یا اعداد نیمه صحیح باشند.

۲. عنصر ماتریسی ساده شده

عنصر ماتریسی ساده شده  $\langle \chi_{n_1, l_1} | Q_i | \chi_{n_2, l_2} \rangle$  مستقل از  $m_1, m_2$  است. این عنصر ماتریسی قسمت شعاعی  $R_{n,l}(r)$  تابع موجهای  $\chi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi)$  را در بر می‌گیرد. بنابراین، مقدار آن بستگی به پایه انتخابی  $\{|\chi_{n,l,m}\rangle\}$  دارد، و فاقد ویژگیهای عام چندانی است. با این همه، می‌توان توجه کرد که اگر  $l_1 + l_2 + l$  عدد فردی باشد، ضریب کلبش گوردن  $\langle l_2, l; 0, 0 | l_1, 0 \rangle$  موجود در (۱۴) صفر است (مکمل ۲ از فصل ۱۰، بخش ۳ ج)؛ این حاکی از آن است که عنصر ماتریسی ساده شده، دارای همان ویژگی عنصر ماتریسی ساده نشده است.

یادداشت:

این ویژگی به پاریته  $l^2 (-1)^l$  عملگرهای چندقطبی الکتريکی  $Q_i^m$  بستگی دارد. برای عملگرهای چندقطبی مغناطیسی، قبلاً اشاره کردیم که پاریته آنها  $(-1)^{l+1}$  است؛ از این رو وقتی  $l_1 + l_2 + l$  صفر باشد، عناصر ماتریسی آنها صفر خواهند بود.

۳. قسمت زاویه‌ای عنصر ماتریسی

در (۴۰)، ضریب کلبش گوردن  $\langle l_2, l; m_2, m | l_1, m_1 \rangle$  منحصراً از انتگرال زاویه‌ای موجود در عنصر ماتریسی  $Q_i^m$  ناشی می‌شود. این ضریب، فقط به اعداد کوانتومی تکانه‌های زاویه‌ای حالت‌های مورد نظر بستگی دارد و شامل وابستگی شعاعی  $R_{n,l}(r)$  تابع موجها نیست. به همین علت است که هر وقت پایه‌ای از ویژه بردارهای مشترک  $L_z^2$  و  $J^2$  (یا  $J_z^2$ ) برای سیستمی متشکل



از  $N$  ذره که ممکن است اسپین نیز داشته باشند، یادداشت بخش ۱ بالا) انتخاب می‌کنیم، این ضریب، در عناصر ماتریسی عملگرهای چندقطبی ظاهر می‌شود. حال، می‌دانیم که در مکانیک کوانتومی چنین پایه‌هایی غالباً مورد استفاده قرار می‌گیرند، و بخصوص می‌دانیم که، حالت‌های مانای یک ذره در یک پتانسیل مرکزی  $W(r)$  را می‌توانیم به این شکل انتخاب کنیم. بنابراین، توابع شعاعی  $R_{n,l}(r)$  وابسته به حالت‌های مانا، به پتانسیل انتخابی  $W(r)$  بستگی دارند؛ از این رو، این مطلب در مورد عنصر ماتریسی ساده‌شده  $\langle \chi_{n_1, l_1} | Q_l | \chi_{n_2, l_2} \rangle$  نیز صحیح است. از طرف دیگر، در مورد وابستگی زاویه‌ای تابع موجها چنین نیست، و برای تمام  $W(r)$ ها یک ضریب کلبش گوردن ظاهر می‌شود؛ به این جهت است که این ضریب یک نقش اساسی (جهانی) دارد.

### ب) قواعد گزینش

طبق ویژگیهای ضریب کلبش گوردن (مکمل ۲ از فصل ۱۰، بخش ۱)،  $(l_1, m_1, l_2, l; m_2, m)$  تنها وقتی مخالف صفر است که دو شرط زیر برقرار باشند

$$m_1 = m_2 + m \quad (42)$$

$$|l_1 - l_2| \leq l \leq l_1 + l_2 \quad (43)$$

بنابراین، رابطه (۴۰) حاکی از این است که اگر حداقل یکی از این شرایط برقرار نباشد، عنصر ماتریسی  $\langle \chi_{n_1, l_1, m_1} | Q_l^m | \chi_{n_2, l_2, m_2} \rangle$  الزاماً صفر خواهد بود. در نتیجه، قواعد گزینشی به دست می‌آوریم که این امکان را می‌دهند که بدون انجام محاسبات، جستجوی ماتریس معرف عملگر چندقطبی  $Q_l^m$  را به طور قابل ملاحظه‌ای ساده کنیم.

به علاوه، در بخش ۲-الف-۲ دیدیم که عنصر ماتریسی ساده‌شده یک عملگر چندقطبی، از قاعده گزینش دیگری تبعیت می‌کند:

— برای عملگر چندقطبی الکتريکی

$$l_1 + l_2 + l = \text{یک عدد زوج} \quad (44\text{الف})$$

— برای عملگر چندقطبی مغناطیسی

$$l_1 + l_2 + l = \text{یک عدد فرد} \quad (44\text{ب})$$

## ج) پی آمدهای فیزیکی

۱. مقدار متوسط یک عملگر چندقطبی در یک حالت با تکانه زاویه‌ای خوش تعریف فرض کنید که حالت  $|\psi\rangle$  ذره، یکی از حالت‌های پایه  $|\chi_{n_1, l_1, m_1}\rangle$  باشد. در این صورت، مقدار متوسط عملگر  $(Q_l^m)$  برابر

$$\langle Q_l^m \rangle = \langle \chi_{n_1, l_1, m_1} | Q_l^m | \chi_{n_1, l_1, m_1} \rangle \quad (45)$$

شرایط (۴۲) و (۴۳) را در اینجا به صورت زیر می‌نویسیم

$$m = 0 \quad (46)$$

$$0 \leq l \leq 2l_1 \quad (47)$$

بنابراین قواعد مهم زیر را به دست می‌آوریم:

— اگر  $m \neq 0$  باشد، مقادیر متوسط تمام عملگرهای  $Q_l^m$  در یک حالت  $|\chi_{n_1, l_1, m_1}\rangle$  مساوی صفرند

$$\langle Q_l^m \rangle = 0 \quad \text{اگر } m \neq 0 \quad (48)$$

— مقادیر متوسط تمام عملگرهای مرتبه  $l$ ، در صورتی که  $l$  بزرگتر از  $2l_1$  باشند، صفرند

$$\langle Q_l^m \rangle = 0 \quad \text{اگر } l > 2l_1 \quad (49)$$

حال، اگر فرض کنیم که حالت  $|\psi\rangle$  به جای اینکه یک حالت  $|\chi_{n_1, l_1, m_1}\rangle$  باشد، برهم‌نهی از این چنین حالت‌هایی باشد، که تمام آنها مربوط به یک مقدار  $l_1$  هستند، به سادگی می‌توان نشان داد که قاعده (۴۹) برقرار می‌ماند [ولی قاعده (۴۸) نه، زیرا، در این صورت، معمولاً عناصر ماتریسی‌ای که برای آنها  $m_1 \neq m_2$  است در مقدار متوسط  $\langle Q_l^m \rangle$  مشارکت می‌کنند]. از این رو، رابطه (۴۹) یک رابطه بسیار کلی است و هر وقت سیستم در یک ویژه حالت  $\mathbb{I}^2$  باشد، می‌توانیم آن را به کار ببریم. به علاوه، از روابط (۴۴) نتیجه می‌شود که مقدار متوسط یک عملگر چندقطبی مرتبه  $l$  تنها زمانی مخالف صفر است که:

— برای یک عملگر چندقطبی الکتریکی

$$l = \text{یک عدد زوج} \quad (50\text{الف})$$

— برای یک عملگر چندقطبی مغناطیسی

$$l = \text{یک عدد فرد} \quad (50\text{ب})$$

از نتایج اخیر می‌توان برخی نتایج ساده فیزیکی را به سهولت و بدون انجام محاسبات به دست آورد. به عنوان مثال، در یک حالت  $l = 0$  (نظیر حالت پایه اتم هیدروژن)، گشاورهای دوقطبی (الکتريکی یا مغناطیسی)، گشاورهای چهارقطبی (الکتريکی یا مغناطیسی)، و غیره، همواره صفرند. برای یک حالت  $l = 1$ ، تنها عملگرهای چندقطبی از مرتبه‌های 0، 1، و 2 می‌توانند غیر صفر باشند؛ قواعد پاریته (50) نشان می‌دهد که اینها بارکل و چهارقطبی الکتريکی و همین‌طور دوقطبی مغناطیسی سیستم هستند.

یادداشت:

پیش‌بینیهای به دست آمده را می‌توانیم به سیستمهای پیچیده‌تری (مثل، اتمهای چندالکترونی) تعمیم بدهیم. اگر تکانه زاویه‌ای یک چنین سیستمی  $J$  باشد (عدد صحیح یا نیمه صحیح) می‌توان نشان داد که کافی است در (49) به جای  $l$ ،  $J$  قرار بدهیم.

به عنوان مثال، قواعد (49) و (50) را برای بررسی خواص الکترومغناطیسی یک هسته اتمی به کار خواهیم برد. می‌دانیم که چنین هسته‌ای عبارت از یک سیستم مقید متشکل از پروتونها و نوترونهاست، که از طریق نیروهای هسته‌ای برهم‌کنش دارند. اگر، در حالت پایه،<sup>1</sup> ویژه مقدار مربع تکانه زاویه‌ای  $I(I+1)\hbar^2$  باشد، عدد کوانتومی  $I$  را اسپین هسته‌ای می‌نامیم.

— اگر  $I = 0$  باشد، برهم‌کنشهای الکترومغناطیسی هسته توسط بارکل آن مشخص می‌شوند، و سایر گشاورهای چندقطبی صفرند. به عنوان مثال، برای هسته‌های  ${}^4\text{He}$  ("ذرات  $\alpha$ "), هسته‌های  ${}^2\text{Ne}$  و غیره این چنین است.

— اگر  $I = 1/2$  باشد، هسته دارای یک بار الکتريکی و یک گشاور دوقطبی مغناطیسی است [قاعده پاریته (50) وجود گشاور دوقطبی الکتريکی را نفی می‌کند]. برای هسته  ${}^2\text{He}$  و هسته  ${}^1\text{H}$  (یعنی پروتون) و همچنین تمام ذرات با اسپین  $1/2$  (الکترونها، میونونها، نوترونها و غیره) این حالت برقرار است.

— اگر  $I = 1$  باشد، باید به بار و گشاور دوقطبی مغناطیسی، گشاور چهارقطبی الکتريکی را نیز افزود.  ${}^2\text{H}$  (دوتریم)،  ${}^6\text{Li}$  و غیره نمونه‌هایی از این موزند.

۱. در فیزیک اتمی، عموماً هسته در حالت پایه‌اش فرض می‌شود؛ انرژیهای اتمی، اگرچه آن قدر زیاد هستند که اثر الکترونی اتم را برانگیزند، ولی برای برانگیختن هسته بسیار کوچک‌اند.

این بحث را می‌توان به هر مقدار  $I$  تعمیم داد. عملاً، تعداد بسیار کمی از هسته‌ها دارای اسپین بزرگتر از ۳ یا ۴ هستند.

۲. عناصر ماتریسی بین حالت‌های با اعداد کوانتومی متفاوت برای مقادیر دلخواه  $l_1, l_2, m_1, m_2$  باید شکل کلی قواعد گزینش یعنی، (۴۲)، (۴۳)، و (۴۴) را اعمال کرد. برای مثال، ذره‌ای را که بار آن  $q$  است و تحت تأثیر یک پتانسیل مرکزی  $V_0(r)$  قرار دارد و حالت‌های مانای آن  $|\chi_{n,l,m}\rangle$  هستند، در نظر بگیرید. سپس فرض کنید که یک میدان الکتریکی اضافی  $\mathcal{E}$  یکنواخت و موازی با  $Oz$ ، بیفزاییم. در هامیلتونی جفت‌شدگی مربوط، تنها جمله غیرصفر، جمله دوقطبی الکتریکی است (بخش ۱-ب-۲)

$$\begin{aligned} V(\mathbf{R}) &= -\mathbf{D} \cdot \mathcal{E} \\ &= -D_z \mathcal{E} \end{aligned} \quad (51)$$

همان‌طور که در (۲۲) دیدیم، عملگر  $D_z$  برابر با عملگر  $Q_1^0$  است. در این صورت قواعد گزینش (۴۲) و (۴۳) دلالت بر این دارند که:

— حالت‌های  $|\chi_{n,l,m}\rangle$  جفت شده با هامیلتونی اضافی  $V(\mathbf{R})$  الزاماً به یک مقدار  $m$  مربوط‌اند؛  
 — مقادیر  $l$  دو حالت، لزوماً به اندازه  $\pm 1$  با یکدیگر اختلاف دارند [طبق (۴۴الف) نمی‌توانند با یکدیگر برابر باشند]. بدون محاسبه می‌توان پیش‌بینی کرد که بسیاری از عناصر ماتریسی  $V(\mathbf{R})$  صفرند. این مطلب، به‌عنوان مثال، مطالعه اثر استارک (مکمل ۵ از فصل ۱۲) و قواعد گزینش حاکم بر طیف گسیلی آنها (مکمل ۱ از فصل ۱۳) را به‌طور قابل ملاحظه‌ای ساده می‌کند.

مراجع برای مطالعه بیشتر

Cagnac and Pebay-Peyroula (11.2), annexe IV; Valentin (16.1), chap. VIII; Jackson (7.5), chaps. 4 and 16.

# مکمل ۶

تحول دو تکانه زاویه‌ای  $J_1$  و  $J_2$  جفت شده توسط یک برهم‌کنش

$$aJ_1 \cdot J_2$$

۱. مرور کلاسیک

الف) معادلات حرکت

ب) حرکت  $J_1$  و  $J_2$

۲. تحول مکانیک کوانتومی مقادیر متوسط  $\langle J_1 \rangle$  و  $\langle J_2 \rangle$

الف) محاسبه  $d/dt \langle J_1 \rangle$  و  $d/dt \langle J_2 \rangle$

ب) بحث

۳. مورد خاص دو اسپین  $1/2$

الف) حالت‌های مانای سیستم دواسپینی

ب) محاسبه  $\langle S_1 \rangle(t)$

ج) بحث. قطبش انتقال‌های دو قطبی مغناطیسی

۴. مطالعه یک مدل ساده برای برخورد دو ذره با اسپین  $1/2$

الف) تشریح مدل

ب) حالت سیستم پس از برخورد

ج) بحث. همبستگی ناشی از برخورد

در یک سیستم فیزیکی، اغلب باید اثر جفت‌شدگی بین دو تکانه زاویه‌ای جزئی  $J_1$  و  $J_2$  را در نظر بگیریم. این دو تکانه زاویه‌ای می‌توانند، مثلاً، تکانه‌های زاویه‌ای دو الکترون یک اتم، یا تکانه‌های زاویه‌ای مداری و اسپینی یک الکترون باشند. در حضور یک چنین جفت‌شدگی  $J_1$  و  $J_2$  دیگر ثابت‌های حرکت نخواهند بود؛ تنها

$$J = J_1 + J_2 \quad (1)$$

با هامیلتونی کل سیستم جابه‌جا می‌شود.

فرض خواهیم کرد جمله‌ای از هامیلتونی که معرف جفت‌شدگی بین  $J_1$  و  $J_2$  است، شکل

ساده زیر را داشته باشد

$$W = a \mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2 \quad (2)$$

که در آن  $a$  یک ثابت حقیقی است. در فیزیک اتمی خیلی از مواقع با چنین وضعیتی مواجه می‌شویم. در فصل ۱۲ که از نظریه اختلال برای مطالعه اثر برهم‌کنشهای اسپینهای الکترون یا پروتون بر طیف اتم هیدروژن استفاده می‌کنیم، نمونه‌های متعددی از این وضعیت را خواهیم دید. وقتی جفت‌شدگی به صورت (۲) باشد، نظریه کلاسیک پیش‌بینی می‌کند که تکانه‌های زاویه‌ای کلاسیک  $\mathcal{J}_1$  و  $\mathcal{J}_2$  حول بریندشان  $\mathcal{J}$  با سرعت زاویه‌ای متناسب با ثابت  $a$ ، یک حرکت تقدیمی انجام خواهند داد (بخش ۱ در زیر). "مدل برداری" اتم، که در تاریخ توسعه فیزیک اتمی نقش بسیار مهمی ایفا کرده است، مبتنی بر این نتیجه است. در این مکمل، نشان خواهیم داد که چگونه، با دانستن ویژه‌حالت‌های مشترک  $\mathcal{J}^2$  و  $\mathcal{J}_z$ ، می‌توان حرکت مقادیر متوسط  $\langle \mathcal{J}_1 \rangle$  و  $\langle \mathcal{J}_2 \rangle$  را مطالعه کرد، و مجدداً نتایج مدل برداری اتم را، لافل به‌طور جزئی، به‌دست آورد (بخشهای ۲ و ۳). علاوه بر این، این بررسی به‌ما امکان خواهد داد تا در موارد ساده، قطبش امواج الکترومغناطیسی گسیل‌شده یا جذب‌شده در انتقال‌های دوقطبی مغناطیسی را مشخص کنیم. بالاخره، (بخش ۴)، موردی را که در آن دو تکانه زاویه‌ای  $\mathcal{J}_1$  و  $\mathcal{J}_2$  فقط در حین یک برخورد با یکدیگر جفت می‌شوند و نه به‌طور دائم، در نظر خواهیم گرفت. این مورد، نمایش ساده‌ای از مفهوم مهم همبستگی بین دو سیستم را عرضه خواهد کرد.

## ۱. مرور کلاسیک

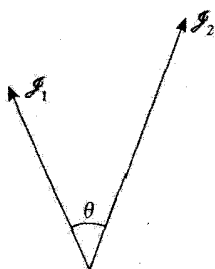
### الف) معادلات حرکت

اگر زاویه بین دو تکانه زاویه‌ای کلاسیک  $\mathcal{J}_1$  و  $\mathcal{J}_2$  را  $\theta$  بگیریم (شکل ۱)، انرژی جفت‌شدگی را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\mathcal{W} = a \mathcal{J}_1 \cdot \mathcal{J}_2 = a \mathcal{J}_1 \mathcal{J}_2 \cos \theta \quad (3)$$

فرض کنید  $\mathcal{H}_0$  انرژی سیستم کل در غیاب جفت‌شدگی باشد [ $\mathcal{H}_0$ ، به‌عنوان مثال، می‌تواند مجموع انرژیهای جنبشی دورانی سیستمهای (۱) و (۲) باشد]. فرض خواهیم کرد که

$$\mathcal{W} \ll \mathcal{H}_0 \quad (4)$$



شکل ۱ دو تکانه زاویه‌ای کلاسیک  $J_1$  و  $J_2$  که توسط یک برهم‌کنش  $\mathcal{H} = a J_1 \cdot J_2 = a J_1 J_2 \cos \theta$  با یکدیگر جفت شده‌اند.

حال، گشتاور  $\mathcal{M}_1$  نیروهای وارد بر سیستم (۱) را محاسبه می‌کنیم.  $\mathbf{u}$  را یک بردار یکه و  $d\mathcal{H}$  را تغییر انرژی جفت‌شدگی حاصل از دوران سیستم (۱) به اندازه زاویه  $d\alpha$  حول  $\mathbf{u}$  در نظر بگیرید. می‌دانیم (بنابه قضیه کار مجازی) که

$$\mathcal{M}_1 \cdot \mathbf{u} = -\frac{d\mathcal{H}}{d\alpha} \quad (۵)$$

به این ترتیب، یا شروع از (۳) و (۵)، و از طریق یک محاسبه ساده، خواهیم داشت

$$\mathcal{M}_1 = -a J_1 \times J_2 \quad (۶الف)$$

$$\mathcal{M}_2 = -a J_2 \times J_1 \quad (۶ب)$$

و در نتیجه

$$\frac{dJ_1}{dt} = -a J_1 \times J_2 \quad (۷الف)$$

$$\frac{dJ_2}{dt} = -a J_2 \times J_1 \quad (۷ب)$$

ب) حرکت  $J_1$  و  $J_2$

با جمع کردن (۷الف) و (۷ب)، داریم

$$\frac{d}{dt}(J_1 + J_2) = 0 \quad (۸)$$

که نشان می‌دهد تکانه زاویه‌ای کل  $\mathcal{M}_1 + \mathcal{M}_2$  در واقع یک ثابت حرکت است. به علاوه، به سادگی می‌توان از (۷الف) و (۷ب) نتیجه گرفت که

$$\mathcal{M}_1 \cdot \left( \frac{d\mathcal{M}_1}{dt} \right) = \mathcal{M}_2 \cdot \left( \frac{d\mathcal{M}_2}{dt} \right) = 0 \quad (9)$$

و

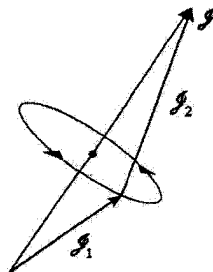
$$\mathcal{M}_1 \cdot \left( \frac{d\mathcal{M}_2}{dt} \right) + \left( \frac{d\mathcal{M}_1}{dt} \right) \cdot \mathcal{M}_2 = \frac{d}{dt} (\mathcal{M}_1 \cdot \mathcal{M}_2) = 0 \quad (10)$$

بنابراین، زاویه  $\theta$  بین  $\mathcal{M}_1$  و  $\mathcal{M}_2$  و همچنین مدولهای  $\mathcal{M}_1$  و  $\mathcal{M}_2$  نسبت به زمان ثابت می‌مانند. بالاخره

$$\frac{d}{dt} \mathcal{M}_1 = a \mathcal{M}_2 \times \mathcal{M}_1 = a (\mathcal{M}_2 - \mathcal{M}_1) \times \mathcal{M}_1 = a \mathcal{M}_2 \times \mathcal{M}_1 \quad (11)$$

چون  $\mathcal{M} = \mathcal{M}_1 + \mathcal{M}_2$  ثابت است، معادلهٔ اخیر نشان می‌دهد که  $\mathcal{M}_1$  حول  $\mathcal{M}$  با سرعت زاویه‌ای  $a|\mathcal{M}|$  حرکت تقدیمی دارد (شکل ۲).

بنابراین،  $\mathcal{M}_1$  و  $\mathcal{M}_2$ ، تحت تأثیر جفت‌شدگی، حول برابندشان  $\mathcal{M}$  با یک سرعت زاویه‌ای متناسب با  $a|\mathcal{M}|$  و ثابت جفت‌شدگی  $a$  حرکت تقدیمی انجام می‌دهند.



شکل ۲ تحت تأثیر جفت‌شدگی  $\mathcal{M}_1 \cdot \mathcal{M}_2 = \mathcal{M}^2$ ، تکانه‌های زاویه‌ای  $\mathcal{M}_1$  و  $\mathcal{M}_2$  حول برابندشان  $\mathcal{M}$ ، که یک ثابت حرکت است، حرکت تقدیمی انجام می‌دهند.



۲. تحول مکانیک کوانتومی مقادیر متوسط  $\langle J_1 \rangle$  و  $\langle J_2 \rangle$

الف) محاسبه  $d/dt \langle J_1 \rangle$  و  $d/dt \langle J_2 \rangle$

قبل از هر چیز به خاطر بیاورید که اگر  $A$  مشاهده‌پذیری از یک سیستم کوانتومی با هامیلتونی  $H$  باشد، داریم (فصل ۳، بخش D-۱-d)

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle(t) = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle(t) \quad (۱۲)$$

در مورد حاضر، هامیلتونی  $H$  برابر است با

$$H = H_0 + W \quad (۱۳)$$

که  $H_0$  مجموع انرژیهای سیستمهای (۱) و (۲) و  $W$  جفت‌شدگی بین  $J_1$  و  $J_2$  است که با رابطه (۲) داده می‌شود. در غیاب یک چنین جفت‌شدگی،  $J_1$  و  $J_2$  ثابتهای حرکت‌اند (با  $H_0$  جابه‌جا می‌شوند). از این رو، در حضور جفت‌شدگی، داریم

$$\frac{d}{dt} \langle J_1 \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [J_1, W] \rangle = \frac{a}{i\hbar} \langle [J_1, J_1 \cdot J_2] \rangle \quad (۱۴)$$

و رابطه مشابهی برای  $d/dt \langle J_2 \rangle$  محاسبه جابه‌جاگر موجود در فرمول (۱۴)، هیچ مشکلی پدید نمی‌آورد. به‌عنوان مثال، داریم

$$\begin{aligned} [J_{1x}, J_1 \cdot J_2] &= [J_{1x}, J_{1y} J_{2y}] + [J_{1x}, J_{1z} J_{2z}] \\ &= i\hbar J_{1z} J_{2y} - i\hbar J_{1y} J_{2z} \\ &= -i\hbar (J_1 \times J_2)_x \end{aligned} \quad (۱۵)$$

بالاخره از این رابطه، ملاحظه می‌شود که

$$\frac{d}{dt} \langle J_1 \rangle = -a \langle J_1 \times J_2 \rangle \quad (۱۶ \text{ الف})$$

$$\frac{d}{dt} \langle J_2 \rangle = -a \langle J_2 \times J_1 \rangle \quad (۱۶ \text{ ب})$$

(ب) بحث

به تشابه بسیار زیاد بین فرمولهای (۷الف) و (۷ب) از یک طرف و فرمولهای (۱۶الف) و (۱۶ب) از طرف دیگر، توجه کنید. با جمع کردن (۱۶الف) و (۱۶ب)، بار دیگر نتیجه می‌گیریم که  $\mathbf{J}$  یک ثابت حرکت است، زیرا

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{J}_1 \rangle + \frac{d}{dt}\langle \mathbf{J}_2 \rangle = \frac{d}{dt}\langle \mathbf{J} \rangle = 0 \quad (17)$$

اما، باید به خاطر داشته باشیم که، عموماً

$$\langle \mathbf{J}_1 \times \mathbf{J}_2 \rangle \neq \langle \mathbf{J}_1 \rangle \times \langle \mathbf{J}_2 \rangle \quad (18)$$

بنابراین، حرکت مقادیر متوسط الزاماً با حرکت کلاسیک یکسان نیست. برای بررسی دقیق این نکته، یک مورد خاص را مطالعه می‌کنیم: موردی که در آن  $\mathbf{J}_1$  و  $\mathbf{J}_2$  دو اسپین  $1/2$  هستند، که ما آنها را با  $S_1$  و  $S_2$  نمایش می‌دهیم.

### ۳. مورد خاص دو اسپین $1/2$

تحول یک سیستم کوانتومی را می‌توان در پایه ویژه‌حالت‌های هامیلتونی آن سیستم، به سادگی محاسبه کرد. از این رو، با تعیین حالت‌های مانای سیستم دو اسپینی شروع به کار می‌کنیم.

الف) حالت‌های مانای سیستم دواسپینی

فرض کنید

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 \quad (19)$$

اسپینی کل باشد. با مربع کردن طرفین (۱۹) داریم

$$\mathbf{S}^2 = \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \quad (20)$$

که از آن می‌توان  $W$  را به صورت زیر نوشت

$$W = a \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = \frac{a}{4} [\mathbf{S}^2 - \mathbf{S}_1^2 - \mathbf{S}_2^2] = \frac{a}{4} \left[ \mathbf{S}^2 - \frac{3}{4} \hbar^2 \right] \quad (21)$$

کلیده بردارهای فضای حالت، ویژه‌حالت‌های  $S_z^+$  و  $S_z^-$  با ویژه‌مقدار  $3/4\hbar^2$  هستند).

درغیاب جفت‌شدگی، هامیلتونی  $H_0$  سیستم در پایه  $\{|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle\}$  (با  $\epsilon_1 = \pm 1$  و  $\epsilon_2 = \pm 1$ ) ویژه‌حالت‌های  $S_{1z}$  و  $S_{2z}$  و همچنین در پایه  $\{|S, M\rangle\}$  (با  $-S \leq M \leq +S$  یا  $S = 0$ ) ویژه‌حالت‌های  $S_z$  و  $S^2$  قطری است. بردارهای مختلف  $|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle$  یا  $|S, M\rangle$  ویژه‌بردارهای  $H_0$  با یک ویژه‌مقدار مساوی هستند که آن را مبدأ انرژی می‌گیریم.

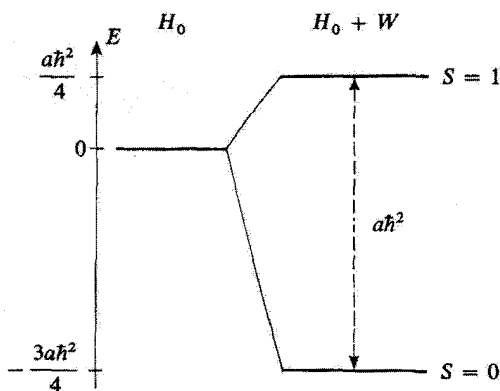
وقتی جفت‌شدگی  $W$  را به حساب بیاوریم، از فرمول (۲۱) مشاهده می‌کنیم که هامیلتونی کل  $H = H_0 + W$  دیگر در پایه  $\{|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle\}$  قطری نیست. اما می‌توان نوشت

$$(H_0 + W)|S, M\rangle = \frac{a\hbar^2}{4} \left[ S(S+1) - \frac{3}{4} \right] |S, M\rangle \quad (22)$$

بنابراین، حالت‌های مانای سیستم دواسپینی به دو تراز تقسیم می‌شود (شکل ۳): تراز  $S = 1$  با انرژی  $E_1 = a\hbar^2/4$  که سه بار واگن است، و تراز ناواگن  $S = 0$  با انرژی  $E_0 = -3a\hbar^2/4$ . فاصله جدایی میان این تراز برابر با  $a\hbar^2$  است. اگر قرار دهیم

$$a\hbar^2 = \hbar\Omega \quad (23)$$

تنها بسامد غیرصفر بوز سیستم دواسپینی است.



شکل ۳ ترازهای انرژی یک سیستم متشکل از دواسپین  $1/2$ . در طرف چپ شکل، فرض شده است که جفت‌شدگی صفر باشد، و یک تراز منفرد که چهار بار واگن است به دست می‌آوردیم. جفت‌شدگی  $W = aS_1 \cdot S_2$  آن را به دو تراز مجزا، که اختلاف انرژی آنها  $a\hbar^2$  است، تجزیه می‌کند: تراز سه‌تایی ( $S = 1$  که سه‌بار واگن است) و یک تراز یکتایی ( $S = 0$ ، ناواگن).

ب) محاسبه  $\langle S_1 \rangle(t)$

برای یافتن تحول  $\langle S_1 \rangle(t)$ ، ابتدا باید ماتریسهای معرف  $S_{1x}$ ،  $S_{1y}$  و  $S_{1z}$  (یا، ساده‌تر،  $S_{1z}$ ، و  $(S_{1+} = S_{1x} + iS_{1y})$  را در پایه  $\{|S, M\rangle\}$  حالت‌های مانا محاسبه کنیم. اگر از روابط (۱۰-۴۳) و (۱۰-۴۴) فصل ۱۰، که بسط حالت‌های  $|S, M\rangle$  را در پایه  $\{\epsilon_1, \epsilon_2\}$  می‌دهند، استفاده کنیم، به‌سادگی می‌توان عمل  $S_{1z}$  یا  $S_{1+}$  را بر روی کتهای  $|S, M\rangle$  حساب کرد. بنابراین، به‌دست می‌آید

$$\begin{cases} S_{1z}|1, 1\rangle = \frac{\hbar}{2}|1, 1\rangle \\ S_{1z}|1, 0\rangle = \frac{\hbar}{2}|1, 0\rangle \\ S_{1z}|1, -1\rangle = -\frac{\hbar}{2}|1, -1\rangle \\ S_{1z}|0, 0\rangle = \frac{\hbar}{2}|1, 0\rangle \end{cases} \quad (24)$$

$$\begin{cases} S_{1+}|1, 1\rangle = 0 \\ S_{1+}|1, 0\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}|1, 1\rangle \\ S_{1+}|1, -1\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}(|1, 0\rangle + |0, 0\rangle) \\ S_{1+}|0, 0\rangle = -\frac{\hbar}{\sqrt{2}}|1, 1\rangle \end{cases} \quad (25)$$

از این روابط، می‌توان بلافاصله ماتریسهای معرف  $S_{1z}$  و  $S_{1+}$  را در پایه چهار حالت  $|S, M\rangle$  که به‌صورت  $|1, 1\rangle$ ،  $|1, 0\rangle$ ،  $|1, -1\rangle$  و  $|0, 0\rangle$  مرتب شده‌اند، به‌دست آورد

$$(S_{1z}) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (26)$$

$$(S_{1+}) = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (27)$$

یادداشت:

به‌سادگی می‌توان نشان داد که محدودیت‌های ماتریسهای  $S_{1z}$  و  $S_{1+}$  به زیرفضای  $S = 1$  به‌ترتیب متناسب‌اند (با ضریب تناسب یکسان) با ماتریسهای معرف  $S_z$  و  $S_+$  در همان زیرفضا. این نتیجه، نظر به قضیهٔ ویگنر-اکارت در مورد عملگرهای برداری (مکمل ۴ از فصل ۱۰)، می‌توانست قابل انتظار باشد. ■ فرض کنید

$$|\psi(0)\rangle = \alpha|0, 0\rangle + \beta_{-1}|1, -1\rangle + \beta_0|1, 0\rangle + \beta_1|1, 1\rangle \quad (28)$$

حالت سیستم در لحظه  $t = 0$  باشد. از این حالت، عبارت  $|\psi(t)\rangle$  را (با تقریب ضریب  $e^{i\alpha\hbar t/\hbar}$ ) به‌دست می‌آوریم

$$|\psi(t)\rangle = \alpha|0, 0\rangle + [\beta_{-1}|1, -1\rangle + \beta_0|1, 0\rangle + \beta_1|1, 1\rangle]e^{-i\Omega t} \quad (29)$$

سپس، با استفاده از (۲۶) و (۲۷)، به‌آسانی خواهیم داشت

$$\begin{aligned} \langle S_{1z} \rangle(t) &= \langle \psi(t) | S_{1z} | \psi(t) \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2} [|\beta_1|^2 - |\beta_{-1}|^2 + e^{i\Omega t} \alpha \beta_0^* + e^{-i\Omega t} \alpha^* \beta_0] \end{aligned} \quad (30)$$

$$\begin{aligned} \langle S_{1+} \rangle(t) &= \langle \psi(t) | S_{1+} | \psi(t) \rangle \\ &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} [\beta_1^* \beta_0 + \beta_0^* \beta_{-1} - e^{i\Omega t} \beta_1^* \alpha + e^{-i\Omega t} \alpha^* \beta_{-1}] \end{aligned} \quad (31)$$

$\langle S_{1x} \rangle(t)$  و  $\langle S_{1y} \rangle(t)$  را می‌توان برحسب  $\langle S_{1+} \rangle(t)$  بیان کرد

$$\langle S_{1x} \rangle(t) = \text{Re} \langle S_{1+} \rangle(t) \quad (32)$$

$$\langle S_{1y} \rangle(t) = \text{Im} \langle S_{1+} \rangle(t) \quad (33)$$

با محاسبات مشابهی می‌توانیم سه مؤلفهٔ  $\langle \mathbf{S}_r \rangle(t)$  را به‌دست بیاوریم.

## ج) بحث. قطبش انتقالهای دوقطبی مغناطیسی

مطالعه حرکت  $\langle S_1 \rangle(t)$ ، کاری بیشتر از مقایسه مدل برداری اتم با پیش‌بینیهای مکانیک کوانتومی انجام می‌دهد. این بررسی، همچنین امکان می‌دهد که قطبش امواج الکترومغناطیسی گسیل‌شده ناشی از حرکت  $\langle S_1 \rangle(t)$  را نیز مشخص کنیم.

بسامد بور  $\hbar\omega/2\pi$ ، به‌خاطر وجود عناصر ماتریسی غیرصفر  $S_{1z}$ ،  $S_{1y}$  یا  $S_{1z}$  بین حالت  $(0, 0)$  و یکی از حالت‌های  $|1, M\rangle$  (با  $M = -1, 0, +1$ ) در تحول  $\langle S_1 \rangle(t)$  ظاهر می‌شود. فرض خواهیم کرد که در (۲۸) یا (۲۹)،  $\alpha$  غیرصفر و تنها یکی از سه ضریب  $\beta_0$ ،  $\beta_{-1}$  یا  $\beta_1$  مخالف صفر باشد. از این‌رو، بررسی حرکت  $\langle S_1 \rangle(t)$  در سه مورد مربوط، امکان خواهد داد تا قطبیدگی تابش وابسته به سه انتقال دوقطبی مغناطیسی

$$|0, 0\rangle \longleftrightarrow |1, -1\rangle \quad \text{و} \quad |0, 0\rangle \longleftrightarrow |1, 0\rangle, |0, 0\rangle \longleftrightarrow |1, 1\rangle$$

را مشخص کنیم. می‌توانیم  $\alpha$  را همواره حقیقی انتخاب کنیم؛ قرار خواهیم داد

$$\beta_M = |\beta_M| e^{i\varphi_M} \quad (M = -1, 0, 1) \quad (34)$$

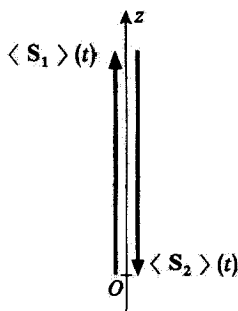
یادداشت:

در واقع، امواج الکترومغناطیسی توسط گشتاورهای مغناطیسی  $M_1$  و  $M_2$  وابسته به  $S_1$  و  $S_2$  گسیل می‌شوند (از این‌رو، آنها را انتقالهای دوقطبی مغناطیسی می‌نامیم).  $M_1$  و  $M_2$  به ترتیب با  $S_1$  و  $S_2$  متناسب‌اند. برای دقت بیشتر، ما باید تحول  $(M_1 + M_2)$  را بررسی کنیم. در اینجا فرض خواهیم کرد که  $\langle M_1 \rangle \gg \langle M_2 \rangle$  باشد. چنین وضعیتی، به‌عنوان مثال، در حالت پایه اتم هیدروژن پیدا می‌شود: ساختار فوق‌ریز این حالت، از جفت‌شدگی بین اسپین الکترون و اسپین پروتون ناشی می‌شود (فصل ۱۲، بخش ۱۲-۴). اما گشتاور مغناطیسی اسپین الکترون به مراتب از گشتاور مغناطیسی اسپین پروتون بزرگتر است، به طوری که گسیل و جذب امواج الکترومغناطیسی در بسامد انتقال فوق‌ریز اساساً توسط حرکت اسپین الکترون صورت می‌گیرد. احتساب  $\langle M_2 \rangle$ ، محاسبات را بدون اینکه هیچ تغییری در نتایج پدید آورد، مشکلتر خواهد کرد.

$$1. \text{ انتقال } |0, 0\rangle \longleftrightarrow |1, 0\rangle \quad (\beta_1 = \beta_{-1} = 0)$$

اگر در (۳۰)، (۳۱)، (۳۲) و (۳۳)، قرار دهیم  $\beta_1 = \beta_{-1} = 0$ ، خواهیم داشت

$$\langle S_{1y} \rangle(t) = \langle S_{1x} \rangle(t) = 0$$



شکل ۴ وقتی که حالت سیستم دواسپینی، برهم‌نهشی باشد از فقط دو حالت مانای  $|0, 0\rangle$  و  $|1, 0\rangle$ ،  $\langle S_1 \rangle$  و  $\langle S_2 \rangle$  همواره مختلف‌الجهت خواهند بود و با بسامد  $\Omega/2\pi$  در امتداد  $Oz$  ارتعاش خواهند کرد.

$$\langle S_{1z} \rangle(t) = \hbar \alpha |\beta_0| \cos(\Omega t - \varphi_0) \quad (35)$$

به‌علاوه، به‌آسانی می‌توان دید که

$$\langle S_x \rangle(t) = \langle S_y \rangle(t) = \langle S_z \rangle(t) = 0 \quad (36)$$

در این صورت  $\langle S_1 \rangle(t)$  و  $\langle S_2 \rangle(t)$  دائماً مختلف‌الجهت خواهند بود و با بسامد  $\Omega/2\pi$  در امتداد  $Oz$  ارتعاش خواهند کرد (شکل ۴).

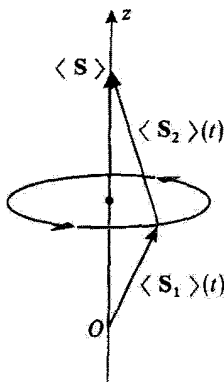
بنابراین، امواج الکترومغناطیسی گسیل شده توسط  $\langle S_1 \rangle$ ، دارای یک میدان مغناطیسی<sup>۱</sup> هستند که در امتداد  $Oz$  خطی قطبیده است ("قطبش  $\pi$ ").

در این مثال، ملاحظه می‌کنیم که  $\langle S_1 \rangle^2$  با زمان تغییر می‌کند و از این رو مساوی با  $\langle S_1^2 \rangle$  (که مقداری ثابت و برابر با  $3\hbar^2/4$  است) نیست. این معرف، یک اختلاف مهم با وضعیت کلاسیک، بخش ۱، است که در آن، طول موج نسبت به زمان ثابت می‌ماند.

$$2. \text{ انتقال } |1, 1\rangle \longleftrightarrow |0, 0\rangle (\beta_0 = \beta_{-1} = 0)$$

در این مورد، داریم

۱. چون این انتقالها، انتقالهای دوقطبی مغناطیسی‌اند، بردار میدان مغناطیسی موج تابش‌شده، مورد توجه ماست. از طرف دیگر، در مورد یک انتقال دوقطبی الکتریکی (مکمل ۴ از فصل ۷، بخش ۲-الف را نگاه کنید) میدان الکتریکی تابش‌شده مورد توجه ما خواهد بود.



شکل ۵ اگر حالت سیستم دواسپینی، برهم‌نهشی باشد فقط از حالت‌های مانای  $(\sigma_+, \sigma_+)$  و  $(\sigma_-, \sigma_-)$  و  $(\sigma_+, \sigma_-)$  و  $(\sigma_-, \sigma_+)$  و  $(\sigma_+, \sigma_+)$  و  $(\sigma_-, \sigma_-)$  حول برابندشان  $\langle S \rangle$  یک حرکت تقدیمی با سرعت زاویه‌ای  $\Omega$  و در خلاف جهت عقربه‌های ساعت خواهند داشت.

$$\begin{cases} \langle S_{1z} \rangle(t) = \frac{\hbar}{2} |\beta_1|^2 \\ \langle S_{1x} \rangle(t) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2}} \alpha |\beta_1| \cos(\Omega t - \varphi_1) \\ \langle S_{1y} \rangle(t) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2}} \alpha |\beta_1| \sin(\Omega t - \varphi_1) \end{cases} \quad (37)$$

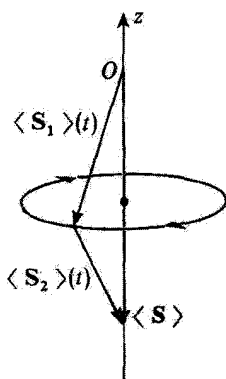
به‌علاوه، به‌سادگی می‌توان ثابت کرد که

$$\begin{cases} \langle S_z \rangle(t) = \hbar |\beta_1|^2 \\ \langle S_x \rangle(t) = \langle S_y \rangle(t) = 0 \end{cases} \quad (38)$$

از این رابطه، می‌توان ملاحظه کرد (شکل ۵) که  $\langle S_1 \rangle(t)$  و  $\langle S_2 \rangle(t)$  با سرعت زاویه‌ای  $\Omega$  حول برابندشان  $\langle S \rangle$ ، که موازی با  $Oz$  است در خلاف جهت عقربه‌های ساعت حرکت تقدیمی دارند. لذا، در این حالت، امواج الکترومغناطیسی گسیل‌شده توسط  $\langle S \rangle(t)$ ، دایره‌ای قطبیده راستگرد هستند ("قطبش  $\sigma_+$ ").

توجه کنید که در اینجا، حرکت به‌دست آمده برای مقادیر متوسط  $\langle S_1 \rangle$  و  $\langle S_2 \rangle$ ، حرکت کلاسیک است.





شکل ۶ اگر حالت سیستم دواسپینی برهم‌نهشی باشد از تنها حالت‌های مانای  $|0, 0\rangle$  و  $|1, -1\rangle$ ،  $\langle S_1 \rangle$  و  $\langle S_2 \rangle$  باز هم با سرعت زاویه‌ای  $\Omega$  حول برابندشان  $\langle S \rangle$ ، و در خلاف جهت عقربه‌های ساعت، حرکتی تقدیمی خواهند داشت، اما  $\langle S \rangle$  در این حالت در خلاف جهت  $Oz$  است.

$$3. \text{ انتقال } |1, -1\rangle \longleftrightarrow |0, 0\rangle \text{ (} \beta_0 = \beta_1 = 0 \text{)}$$

محاسبات این قسمت، شباهت نزدیکی به محاسبات بخش قبلی دارند و به نتیجه زیر منجر می‌شوند (شکل ۶):  $\langle S_1 \rangle(t)$  و  $\langle S_2 \rangle(t)$ ، با سرعت زاویه‌ای  $\Omega$ ، حول  $Oz$  حرکت تقدیمی انجام می‌دهند، اما این بار در جهت حرکت عقربه‌های ساعت. باید توجه داشته باشید که در این مورد  $\langle S_z \rangle = -\hbar|1, -1|^2$  منفی است، به طوری که، هر چند جهت حرکت تقدیمی  $\langle S_1 \rangle$  و  $\langle S_2 \rangle$  حول  $Oz$  با حرکت حالت قبل متفاوت است ولی نسبت به  $\langle S \rangle$  تغییری نمی‌کند. در این مورد، امواج الکترومغناطیسی گسیل شده توسط  $\langle S_1 \rangle$  دایره‌ای قطبیدهٔ چپگردند ("قطبش  $-\sigma$ ").

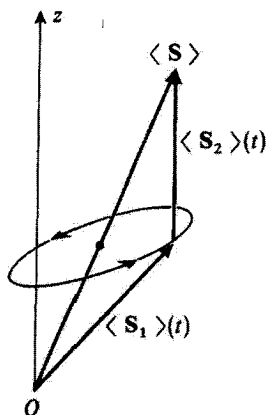
#### ۴. حالت کلی

در حالت کلی (به‌ازاء هر مقدار  $\alpha, \beta_0, \beta_1$  و  $\beta_2$ )، از روابط  $(30)$ ،  $(31)$ ،  $(32)$ ، و  $(33)$  ملاحظه می‌کنیم که مؤلفه‌های  $\langle S_1 \rangle(t)$  روی سه محور، دارای یک قسمت استاتیک و یک قسمت مدوله‌شده در بسامد  $\Omega/2\pi$  هستند. چون این سه حرکت تصویر شده، حرکت‌های سینوسی با بسامدهای مساوی هستند، حرکت نوک  $\langle S_1 \rangle(t)$  یک بیضی در فضا به‌وجود می‌آورد. از آنجا که

مجموع

$$\langle S_1 \rangle(t) + \langle S_2 \rangle(t) = \langle S \rangle$$

ثابت باقی می‌ماند، نوک  $\langle S_2 \rangle(t)$  نیز یک بیضی به‌وجود خواهد آورد (شکل ۷).



شکل ۷ حرکت  $\langle S_1 \rangle(t)$  و  $\langle S_2 \rangle(t)$  در حالت کلی، که در آن حالت، سیستم دواسپینی، برهم‌نهمی از چهار حالت مانای  $(0, 0)$ ،  $(1, 1)$ ،  $(1, 0)$  و  $(-1, -1)$  است. براینده  $\langle S \rangle$  باز هم ثابت است ولی الزاماً در امتداد  $Oz$  نیست.  $\langle S_1 \rangle$  و  $\langle S_2 \rangle$  دیگر طولهای ثابتی نداشته و نوکهای آنها بیضیهایی به وجود می‌آورند.

بنابراین، برای حالت کلی فقط قسمتی از نتایج مدل برداری اتم را پیدا می‌کنیم. مهم، اینکه، هر چه ثابت جفت‌شدگی  $a$  بزرگتر باشد، حرکت تقدیمی  $\langle S_1 \rangle(t)$  و  $\langle S_2 \rangle(t)$  حول  $\langle S \rangle$  سریعتر خواهد بود. با این همه، همان‌طوری که به‌وضوح در مورد خاص  $\alpha$  بالا دیدیم،  $|\langle S_1 \rangle(t)|$  ثابت نیست، و نوک  $\langle S_1 \rangle(t)$  در حالت کلی یک دایره را طی نمی‌کند.

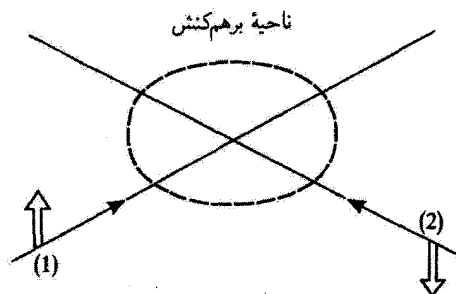
#### ۴. مطالعهٔ یک مدل ساده برای برخورد دو ذرهٔ با اسپین $1/2$

##### الف) تشریح مدل

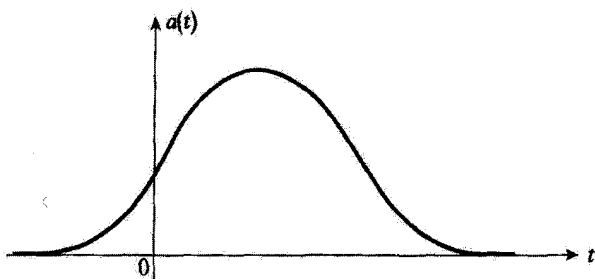
دو ذره با اسپینهای  $1/2$  را که، درجات آزادی خارجی آنها را به‌طور کلاسیکی و درجات آزادی اسپین آنها را به‌طور کوانتومی بررسی خواهیم کرد، در نظر بگیریم. فرض خواهیم کرد که مسیرهای آنها خط راست است (شکل ۸) و برهم‌کنش بین دو اسپین  $S_1$  و  $S_2$  به صورت  $W = aS_1 \cdot S_2$  است، که در آن ثابت جفت‌شدگی  $a$  یک تابع شدیداً نزولی از فاصلهٔ  $r$  میان دو ذره است.

چون  $r$  با زمان تغییر می‌کند،  $a$  نیز با زمان تغییر خواهد کرد. منحنی تغییرات  $a$  نسبت به  $t$  در شکل (۹) نشان داده شده است. نقطهٔ ماکزیموم، مربوط به زمانی است که فاصلهٔ میان دو ذره مینیموم باشد. برای ساده کردن بحث، منحنی شکل ۹ را توسط منحنی شکل ۱۰ جایگزین خواهیم کرد.

مسئله‌ای که در اینجا مطرح است از این قرار است: قبل از برخورد، یعنی در  $t = -\infty$



شکل ۸ برخورد دو ذره (۱) و (۲) با اسپینهای  $1/2$  که متغیرهای مداری آنها را می‌توان به‌طور کلاسیک بررسی کرد. حالت اسپین هر ذره توسط یک پیکان بزرگ نشان داده شده است.



شکل ۹ منحنی تغییرات ثابت جفت‌شدگی  $a(t)$  در خلال برخورد.

حالت اسپین سیستم دو ذره‌ای عبارت است از

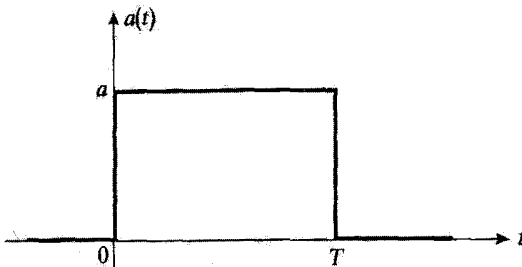
$$|\psi(-\infty)\rangle = |+, -\rangle \quad (39)$$

حالت  $|\psi(+\infty)\rangle$  سیستم بعد از برخورد چیست؟

ب) حالت سیستم پس از برخورد

چون برای  $t < 0$ ، هامیلتونی صفر است، داریم

$$\begin{aligned} |\psi(0)\rangle &= |\psi(-\infty)\rangle = |+, -\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|1, 0\rangle + |0, 0\rangle] \end{aligned} \quad (40)$$



شکل ۱۰ منحنی ساده شده که برای نشان دادن نموداری تغییرات ثابت جفت شدگی  $a(t)$  در حین برخورد به کار رفته است.

نتایج بخش گذشته در رابطه با ویژه حالتها و ویژه مقادیرهای  $W = aS_1 \cdot S_2$  بین زمانهای  $T$  و  $0$  قابل اعمال است و محاسبه  $|\psi(T)\rangle$  را ممکن می سازند

$$|\psi(T)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |1, 0\rangle e^{-iE_1 T/\hbar} + |0, 0\rangle e^{-iE_0 T/\hbar} ] \quad (41)$$

با ضرب کردن (۴۱) در ضریب فاز کلی  $e^{i(E_0 + E_1)T/2\hbar}$  (که هیچ اهمیت فیزیکی ندارد)، قرار دادن  $E_1 - E_0 = \hbar\Omega$  [فرمول (۲۳)]، و برگشتن به پایه  $\{|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle\}$  خواهیم داشت

$$|\psi(T)\rangle = \cos \frac{\Omega T}{2} |+, -\rangle - i \sin \frac{\Omega T}{2} |-, +\rangle \quad (42)$$

بالاخره، چون برای  $t > T$  هامیلتونی صفر است، داریم

$$|\psi(+\infty)\rangle = |\psi(T)\rangle \quad (43)$$

یادداشت:

این محاسبه را می توانستیم برای یک تابع دلخواه  $a(t)$  از نوع نشان داده شده در شکل ۹، انجام بدهیم. در این صورت لازم می بود که، در فرمول قبل، به جای  $\int_{-\infty}^{+\infty} a(t) dt$  را  $aT = \Omega T/\hbar$  قرار بدهیم (تمرین ۲ از مکمل ۵ فصل ۱۳).

ج) بحث. همبستگی ناشی از برخورد  
اگر شرط

$$\frac{\Omega T}{\gamma} = \frac{\pi}{\gamma} + k\pi, \quad k \text{ یک عدد صحیح مثبت یا صفر} \quad (44)$$

برقرار باشد، از رابطه (۴۲) داریم

$$|\psi(+\infty)\rangle = |-, +\rangle \quad (45)$$

در این مورد، جهت دو اسپین در حین برخورد تعویض می‌شود.  
از طرف دیگر، اگر داشته باشیم

$$\frac{\Omega T}{\gamma} = k\pi \quad k \text{ یک عدد صحیح مثبت یا منفی} \quad (46)$$

ملاحظه می‌کنیم که

$$|\psi(+\infty)\rangle = |+, -\rangle = |\psi(-\infty)\rangle \quad (47)$$

در این مورد، برخورد، هیچ تأثیری در جهت اسپینها ندارد.  
برای سایر مقادیر  $T$ ، داریم

$$|\psi(+\infty)\rangle = \alpha|+, -\rangle + \beta|-, +\rangle \quad (48)$$

که  $\alpha$  و  $\beta$  به‌طور همزمان غیرصفرند. حالت سیستم دواسپینی در اثر برخورد، به یک برهم‌نهی خطی از دو حالت  $|+, -\rangle$  و  $|-, +\rangle$  تبدیل شده است. بنابراین، اگرچه  $|\psi(-\infty)\rangle$  یک حاصلضرب تانسوری بود، ولی  $|\psi(+\infty)\rangle$  دیگر یک حاصلضرب تانسوری نیست: برهم‌کنش دواسپین، بین آنها همبستگی‌هایی ایجاد کرده است.

برای پی بردن به این مطلب، آزمایشی را که در آن، یک ناظر [ناظر (۱)]، پس از برخورد،  $S_{1z}$  را اندازه‌گیری می‌کند، تجزیه و تحلیل خواهیم کرد. طبق فرمول (۴۸) برای  $|\psi(+\infty)\rangle$ ، احتمال یافتن مقدار  $+\hbar/2$  برابر با  $|\alpha|^2$  و احتمال یافتن مقدار  $-\hbar/2$  برابر با  $|\beta|^2$  است [بنابر (۴۲)  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ ]. فرض کنید که ناظر، مقدار  $-\hbar/2$  را به دست بیاورد. بلافاصله پس از این

اندازه‌گیری، حالت سیستم کل، طبق اصل موضوع تقلیل بسته‌موج، عبارت است از  $(+, -)$ . اگر، در این لحظه، یک ناظر دیگر [ناظر (۲)]  $S_{2z}$  را اندازه‌گیری کند، همواره مقدار  $+\hbar/2$  را به دست خواهد آورد. همین‌طور، به‌سادگی می‌توان نشان داد که اگر ناظر (۱) نتیجه  $+\hbar/2$  را به دست بیاورد، ناظر (۲) همواره  $-\hbar/2$  را به دست خواهد آورد. بنابراین، نتیجه به دست آمده توسط ناظر (۱)، و در نتیجه‌ای که ناظر (۲) بعداً به دست خواهد آورد قویاً اثر می‌گذارد، حتی اگر در زمان این دو اندازه‌گیری، ذرات فوق‌العاده از یکدیگر دور باشند. این نتیجه به‌ظاهر پارادوکسی (پارادوکس اینشتین-پودولسکی-روزن) وجود یک همبستگی قوی میان دو اسپین را، که به‌خاطر برهم‌کنش آنها در حین برخورد ظاهر شده است، منعکس می‌سازد.

بالاخره، توجه کنید که اگر تنها یکی از دو اسپین مورد علاقه ما باشد، غیرممکن است که بتوان حالت آن‌را بعد از برخورد توسط یک بردار حالت توصیف کرد، زیرا، بنابر فرمول (۴۸)،  $\langle\psi(+\infty)\rangle$  یک حاصلضرب تانسوری نیست. مثلاً اسپین (۱) در این مورد فقط توسط یک عملگر چگالی توصیف می‌شود (مکمل E<sub>III</sub>). فرض کنید

$$\rho = |\psi(+\infty)\rangle\langle\psi(+\infty)| \quad (49)$$

عملگر چگالی سیستم دواسپینی کل باشد. برطبق نتایج مکمل ۵ از فصل ۳ (بخش ۵-ب)، عملگر چگالی اسپین (۱) را می‌توان از ردیابی جزئی  $\rho$  نسبت به متغیرهای اسپین ذره (۲) به دست آورد

$$\rho(1) = \text{Tr}_2 \rho \quad (50)$$

به‌طور مشابه

$$\rho(2) = \text{Tr}_1 \rho \quad (51)$$

به‌سادگی می‌توان از رابطه (۴۸) مربوط به  $\langle\psi(+\infty)\rangle$  ماتریس معرف  $\rho$  را در پایه چهار حالتی:  $\{|+, +\rangle, |+, -\rangle, |-, +\rangle, |-, -\rangle\}$  که به‌همین ترتیب آرایش یافته‌اند، محاسبه کرد. نتیجه حاصله عبارت است از

$$\rho = \begin{pmatrix} \circ & \circ & \circ & \circ \\ \circ & |\alpha|^2 & \alpha\beta^* & \circ \\ \circ & \beta\alpha^* & |\beta|^2 & \circ \\ \circ & \circ & \circ & \circ \end{pmatrix} \quad (52)$$

با به‌کار بردن  $(50)$  و  $(51)$ ، داریم

$$\rho(1) = \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & 0 \\ 0 & |\beta|^2 \end{pmatrix} \quad (53)$$

$$\rho(2) = \begin{pmatrix} |\beta|^2 & 0 \\ 0 & |\alpha|^2 \end{pmatrix} \quad (54)$$

با شروع از  $(53)$  و  $(54)$ ، می‌توان  $\rho'$  را به‌شکل زیر نوشت

$$\rho' = \rho(1) \otimes \rho(2) \quad (55)$$

که نمایش ماتریسی آن به‌صورت زیر است

$$\rho' = \begin{pmatrix} |\alpha|^2 |\beta|^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & |\alpha|^4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & |\beta|^4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & |\alpha|^2 |\beta|^2 \end{pmatrix} \quad (56)$$

ملاحظه می‌کنیم که  $\rho'$  با  $\rho$  متفاوت است، که این، وجود همبستگی‌های میان دو اسپین را نشان می‌دهد.

### مراجع برای مطالعه بیشتر

مدل برداری اتم:

Eisberg and Resnick (1.3), chap. 8, §5; Cagnac and Pebay-Peyroula (11.2), chaps. XVI, §3B and XVII, §§3E and 4C.

پارادوکس اینشتین-پودولسکی-روزن:

see references of complement D<sub>III</sub>.

# مکمل ۷

## تمرینات

۱. یک اتم دوتریوم (مشکل از یک هسته با اسپین  $I = 1$  و یک الکترون را در نظر بگیرید). تکانه زاویه‌ای الکترونی عبارت است از  $J = L + S$ ، که در آن  $L$  تکانه زاویه‌ای مداری و الکترون  $S$  اسپین آن است. تکانه زاویه‌ای کل اتم برابر است با  $F = J + I$ ، که  $I$  اسپین هسته‌ای است. ویژه‌مقدارهای  $J^2$  و  $F^2$  به ترتیب برابرند با  $J(J+1)\hbar^2$  و  $F(F+1)\hbar^2$ .

الف) مقادیر ممکن اعداد کوانتومی  $J$  و  $F$  برای یک اتم دوتریوم در حالت پایه  $1s$  چیست؟  
 ب) به همین سؤال برای دوتریوم در حالت برانگیخته  $2p$  جواب دهید.

۲. هسته اتم هیدروژن، یک پروتون با اسپین  $I = 1/2$  است.

الف) با نمادگذاری تمرین قبل، مقادیر ممکن اعداد کوانتومی  $J$  و  $F$  برای یک اتم هیدروژن در حالت  $2p$  چقدر است؟

ب) فرض کنید حالت‌های مانای هامیلتونی  $H_0$  اتم هیدروژن که در بخش ۷-۳ از فصل ۷ بررسی کردیم،  $\{|n, l, m\rangle\}$  باشد.

پایه‌ای را که از جمع کردن  $L$  و  $S$  برای تشکیل  $J$  به دست می‌آید،  $\{|n, l, s, J, M_J\rangle\}$  بگیری،  
 ویژه‌مقدار  $J_z$  است، و فرض کنید پایه‌ای که از جمع کردن  $J$  و  $I$  برای تشکیل  $F$  به دست می‌آید،  $\{|n, l, s, J, I, F, M_F\rangle\}$  باشد ( $M_F \hbar$  ویژه‌مقدار  $F_z$  است).

عملگر گشتاور مغناطیسی الکترون برابر است با

$$M = \mu_B \frac{(L + 2S)}{\hbar}$$

در هر یک از زیرفضاهای  $\mathcal{E}(n=2, l=1, s=1/2, J, I=1/2, F)$  که از تراز  $2p$  حاصل شده و شامل  $2F+1$  بردار

$$\left| n=2, l=1, s=\frac{1}{2}, J, I=\frac{1}{2}, F, M_F \right\rangle$$

مربوط به مقادیر ثابت  $J$  و  $F$  است، با استفاده از قضیه تصویر (مکمل ۴ از فصل ۱۰، بخش‌های ۲-ج



$$M = g_{JF} \mu_B \frac{F}{\hbar}$$

مقادیر مختلف ممکن ضرایب  $g_{JF}$  لاتده مربوط به تراز  $2p$  را محاسبه کنید.

۳. یک سیستم مرکب از دو ذره با اسپین  $1/2$  را که از متغیرهای مداری آنها چشمپوشی می‌کنیم، در نظر بگیرید. هامیلتونی این سیستم عبارت است از

$$H = \omega_1 S_{1z} + \omega_2 S_{2z}$$

که  $S_{1z}$  و  $S_{2z}$  تصاویر اسپینهای  $S_1$  و  $S_2$ ی دو ذره روی  $Oz$  است و  $\omega_1$  و  $\omega_2$  ثابتهایی حقیقی هستند.

الف) حالت اولیه سیستم در زمان  $t = 0$  عبارت است از

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+-\rangle + |-+\rangle]$$

(طبق نمادگذاری بخش ۱۰-۲ از فصل ۱۰). در زمان  $t$ ،  $S^2 = (S_1 + S_2)^2$  را اندازه‌گیری می‌کنیم. چه نتایجی و با چه احتمالهایی می‌تواند به دست آید؟  
 ب) اگر حالت اولیه سیستم دلخواه باشد، بسامدهای پور ظاهر شده در تحول  $\langle S^2 \rangle$  کدامند؟  
 به همین سؤال در مورد  $S_x = S_{1x} + S_{2x}$  پاسخ دهید.

۴. ذره (الف) با اسپین  $3/2$  را که می‌تواند به دو ذره (ب) با اسپین  $1/2$  و (ج) با اسپین فرد بیاشد در نظر بگیرید. خود را در دستگاه در حال سکون (الف) قرار می‌دهیم. در خلال فروپاشی، تکانه زاویه‌ای کل سیستم پایسته است.

الف) تکانه زاویه‌ای مداری نسبی دو ذره نهایی چه مقادیری می‌تواند اختیار کند؟ نشان دهید که اگر پارامتر حالت مداری نسبی ثابت باشد، فقط یک مقدار ممکن وجود دارد. آیا اگر اسپین ذره (الف) بزرگتر از  $3/2$  می‌بود باز هم این نتیجه معتبر بود؟

ب) فرض کنید ذره (الف) ابتدا در حالت اسپینی باشد که توسط ویژه مقدار  $m_a \hbar$  متعلق به مؤلفه اسپین خود در امتداد  $Oz$ ، مشخص می‌شود. می‌دانیم که حالت مداری نهایی دارای یک پارامتر معین است. آیا امکان دارد که این پارامتر را با اندازه‌گیری احتمال یافتن ذره (ب) در یکی از

حالت‌های  $(+)$  یا  $(-)$  تعیین کنیم؟ (می‌توانید از فرمول‌های عمومی مکمل ۱ از فصل ۱۰، بخش ۲ استفاده کنید).

۵. فرض کنید  $S = S_1 + S_2 + S_3$  تکانه زاویه‌ای کل سه ذره با اسپین‌های  $1/2$  (که از متغیرهای مداری آنها صرف‌نظر خواهیم کرد) باشد. فرض کنید  $|\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3\rangle$  ویژه‌حالت‌های مشترک  $S_{1z}, S_{2z}, S_{3z}$  است که ویژه‌مقدارهای آنها به ترتیب  $\epsilon_1 \hbar/2, \epsilon_2 \hbar/2, \epsilon_3 \hbar/2$  هستند. یک پایه از ویژه‌بردارهای مشترک  $S^2$  و  $S_z$  برحسب کتهای  $|\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3\rangle$  بنویسید. آیا این دو عملگر تشکیل یک مجموعه کاملی از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاپذیر می‌دهند؟ حل مسئله را با جمع بستن دو اسپین شروع کنید، سپس تکانه زاویه‌ای جزئی‌ای را که به این ترتیب به دست آورده‌اید به اسپین سوم بیفزایید).

۶. فرض کنید  $S_1$  و  $S_2$  تکانه‌های زاویه‌ای ذاتی دو ذره با اسپین‌های  $1/2$ ،  $R_1$  و  $R_2$  مشاهده‌پذیرهای مکانی آنها، و  $m_1$  و  $m_2$  جرم‌های آنها (با جرم کاهش‌یافته  $\mu = m_1 m_2 / m_1 + m_2$ ) باشد. فرض کنید که برهم‌کنش بین این دو ذره به صورت زیر باشد

$$W = U(R) + V(R) \frac{S_1 \cdot S_2}{\hbar^2}$$

که در آن  $U(R)$  و  $V(R)$  فقط به فاصله  $R = |\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|$  بین دو ذره بستگی دارند. الف)  $S = S_1 + S_2$  را اسپین کل دو ذره فرض کنید. ۱. نشان بدهید که

$$P_1 = \frac{3}{4} + \frac{S_1 \cdot S_2}{\hbar^2}$$

$$P_0 = \frac{1}{4} - \frac{S_1 \cdot S_2}{\hbar^2}$$

به ترتیب تصویرگرهای بر روی حالت‌های اسپین کل  $S = 0$  و  $S = 1$  اند.

۲. با استفاده از این موضوع، نشان بدهید که:  $W = W_1(R)P_1 + W_0(R)P_0$ ، که در آن

$W_1(R)$  و  $W_0(R)$  دو تابع از  $R$  هستند که باید برحسب  $U(R)$  و  $V(R)$  بیان شوند.

ب) هامیلتونی  $H$  "ذره نسبی" را در دستگاه مرکز جرم بنویسید؛  $P$  معرف تکانه این ذره نسبی است. نشان بدهید که  $H$  با  $S^2$  جابه‌جا می‌شود و به  $S_z$  بستگی ندارد. به کمک این مطلب نشان بدهید که می‌توان ویژه‌حالت‌های  $H$  مربوط به  $S = 0$  و  $S = 1$  را به‌طور جداگانه مطالعه کرد.

نشان بدهید که می‌توان ویژه‌حالت‌های  $H$ ، با ویژه‌مقدار  $E$ ، را به صورت زیر به دست آورد

$$|\psi_E\rangle = \lambda_{00} |\varphi_E^0\rangle |S=0, M=0\rangle + \sum_{M=-1}^{+1} \lambda_{1M} |\varphi_E^1\rangle |S=1, M\rangle$$

که در آن  $\lambda_{1M}$  و  $\lambda_{00}$  مقادیر ثابت، و  $|\varphi_E^0\rangle$  و  $|\varphi_E^1\rangle$  کتهای فضای حالت  $\mathcal{E}_E$  ذره نسبی هستند ( $M\hbar$  ویژه‌مقدار  $S_z$  است). معادلات ویژه‌مقداری را که  $|\varphi_E^0\rangle$  و  $|\varphi_E^1\rangle$  در آنها صدق می‌کنند، بنویسید. (ج) می‌خواهیم برخورد‌های بین دو ذره مورد نظر را مطالعه کنیم. فرض کنید  $E = \hbar^2 k^2 / 2\mu$  انرژی سیستم در دستگاه مرکز جرم باشد. در تمام آنچه بعداً می‌آید، فرض می‌کنیم که قبل از برخورد، یکی از ذرات در حالت اسپین  $|+\rangle$  و ذره دیگر در حالت اسپین  $|-\rangle$  قرار داشته باشد. فرض کنید  $|\psi_k^{\uparrow\downarrow}\rangle$ ، حالت مانای پراکندگی مربوط باشد (فصل ۸، بخش ۸-۲). نشان بدهید که

$$|\psi_k^{\uparrow\downarrow}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\varphi_k^0\rangle |S=0, M=0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |\varphi_k^1\rangle |S=1, M=0\rangle$$

که در آن  $|\varphi_k^0\rangle$  و  $|\varphi_k^1\rangle$  کتهای مانای پراکندگی برای یک ذره بدون اسپین با جرم  $\mu$  هستند که به ترتیب توسط پتانسیلهای  $W_0(R)$  و  $W_1(R)$  پراکنده شده‌اند.

(د) فرض کنید  $f_0(\theta)$  و  $f_1(\theta)$  دامنه‌های پراکندگی مربوط به  $|\varphi_k^0\rangle$  و  $|\varphi_k^1\rangle$  باشند سطح مقطع پراکندگی  $\sigma_b(\theta)$  دو ذره در جهت  $\theta$  را با معلق زدن همزمان دو اسپین (اسپینی که در حالت  $|+\rangle$  بود به حالت  $|-\rangle$  می‌رود و بالعکس) برحسب  $f_0(\theta)$  و  $f_1(\theta)$  محاسبه کنید.

(ه) فرض کنید  $\delta_1^0$  و  $\delta_1^1$  انتقال فازهای پاره‌موجهای  $l$  باشند که به ترتیب وابسته به  $W_0(R)$  و  $W_1(R)$  هستند (فصل ۸، بخش ۸-۳-۳). نشان بدهید که سطح مقطع کل پراکندگی  $\sigma_b$  با معلق زدن همزمان دو اسپین، برابر است با

$$\sigma_b = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2(\delta_l^1 - \delta_l^0)$$

۷. مؤلفه‌های متعارف یک عملگر برداری  $\mathbf{V}$  را به صورت سه عملگر زیر تعریف می‌کنیم

$$\begin{cases} V_1^{(1)} = -\frac{1}{\sqrt{2}}(V_x + iV_y) \\ V_0^{(1)} = V_z \\ V_{-1}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(V_x - iV_y) \end{cases}$$

با استفاده از مؤلفه‌های متعارف  $V_p^{(1)}$  و  $W_q^{(1)}$  دو عملگر برداری  $V$  و  $W$ ، عملگرهای

$$[V^{(1)} \otimes W^{(1)}]_M^{(K)} \sum_p \sum_q \langle \lambda, \lambda; p, q | K, M \rangle V_p^{(1)} W_q^{(1)}$$

را می‌سازیم، که  $\langle \lambda, \lambda; p, q | K, M \rangle$  ضرایب کلیش گوردن هستند که در جمع دو تکانه زاویه‌ای  $\lambda$  وارد می‌شوند (این ضرایب را می‌توانیم از نتایج بخش ۱ مکمل ۱ از فصل ۱۰، به دست بیاوریم).

الف) نشان بدهید که  $[V^{(1)} \otimes W^{(1)}]_M^{(0)}$  متناسب است با حاصلضرب اسکالر  $V \cdot W$  دو عملگر برداری.

ب) نشان بدهید که سه عملگر  $[V^{(1)} \otimes W^{(1)}]_M^{(1)}$  متناسب‌اند با سه مؤلفه متعارف عملگر برداری  $V \times W$ .

ج) پنج مؤلفه  $[V^{(1)} \otimes W^{(1)}]_M^{(2)}$  را برحسب  $V_x, V_y, V_z, V_{\pm} = V_x \pm iV_y$  و  $W_x, W_y, W_z, W_{\pm} = W_x \pm iW_y$  بنویسید.

د) فرض می‌کنیم  $V = W = R$  باشد، که در آن  $R$  مشاهده‌پذیر مکانی یک ذره است. نشان بدهید که پنج عملگر  $[R^{(1)} \otimes R^{(1)}]_M^{(2)}$  با پنج مؤلفه  $Q^M$  عملگر گشتاور چهارقطبی الکتریکی این ذره، متناسب‌اند [فرمول (۲۹) از مکمل ۵ از فصل ۱۰].

ه) فرض می‌کنیم  $V = W = L$  باشد، که در آن  $L$  تکانه زاویه‌ای مداری ذره است. پنج عملگر  $[L^{(1)} \otimes L^{(1)}]_M^{(2)}$  را برحسب  $L_+, L_-, L_z$  بنویسید. قواعد گزینشی که این پنج عملگر در یک پایه متعارف  $\{|k, l, m\rangle\}$  از ویژه‌حالت‌های مشترک  $L^2$  و  $L_z$ ، در آنها صدق می‌کنند کدامها هستند (به عبارت دیگر، در چه شرایطی عنصر ماتریسی

$$\langle k, l, m | [L^{(1)} \otimes L^{(1)}]_M^{(2)} | k', l', m' \rangle$$

غیرصفر است)؟

۸. عملگرهای تانسوری ساده‌نشده؛ قضیه ویگنر-اکارت  
 $2K + 1$  عملگر  $T_Q^{(K)}$ ، که در آن  $K$  یک عدد صحیح مثبت یا صفر و

$$Q = -K, -K + 1, \dots, +K$$

است، در صورتی که روابط جابه‌جایی آنها با تکانه زاویه‌ای کل  $L$  سیستم فیزیکی به صورت زیر باشد

$$[J_z, T_Q^{(K)}] = \hbar Q T_Q^{(K)} \quad (۱)$$

$$[J_+, T_Q^{(K)}] = \hbar \sqrt{K(K+1) - Q(Q+1)} T_{Q+1}^{(K)} \quad (۲)$$

$$[J_-, T_Q^{(K)}] = \hbar \sqrt{K(K+1) - Q(Q-1)} T_{Q-1}^{(K)} \quad (۳)$$

بنا به تعریف،  $(2K+1)$  مؤلفهٔ یک عملگر تانسوری ساده‌نشده‌ی از رتبهٔ  $K$  نامیده می‌شوند. الف) نشان بدهید که یک عملگر اسکالر، عبارت از یک عملگر تانسوری ساده‌نشده‌ی از مرتبهٔ  $K=0$  است، و سه مؤلفهٔ متعارف یک عملگر برداری (تمرین ۷)، مؤلفه‌های یک عملگر تانسوری ساده‌نشده‌ی از مرتبهٔ  $1 = K$  اند.

ب) فرض کنید  $\{|k, J, M\rangle\}$  یک پایهٔ متعارف ویژه‌حالت‌های مشترک  $J_z$  و  $J^2$  باشد. با توجه به اینکه عناصر ماتریسی دو طرف (۱) بین  $|k, J, M\rangle$  و  $|k', J', M'\rangle$  یکسان هستند، نشان بدهید که اگر  $M$  مساوی  $Q + M'$  نباشد،  $\langle k, J, M | T_Q^{(K)} | k', J', M' \rangle$  صفر است.

ج) با ادامهٔ همین روش برای روابط (۲) و (۳)، نشان بدهید که  $(2J+1)(2K+1)(2J'+1)$  عنصر ماتریسی  $\langle k, J, M | T_Q^{(K)} | k', J', M' \rangle$  مربوط به مقادیر ثابت  $k, J, k', J', K, J, k, J'$  و  $(2J+1)(2K+1)(2J'+1)$  ضریب کلیش گوردن  $\langle J', K; M', Q | J, M \rangle$  (مکمل ۲ از فصل ۱۰، بخش‌های ۱-ج و ۲) مربوط به مقادیر ثابت  $J, K$  و  $J'$ ، در روابط بازگشتی یکسانی صدق می‌کنند.

د) نشان بدهید که

$$\langle k, J, M | T_Q^{(K)} | k', J', M' \rangle = \alpha \langle J', K; M', Q | J, M \rangle \quad (۴)$$

که در آن  $\alpha$  یک مقدار ثابت است و فقط به  $k, J, k', J', K, J, k, J'$  بستگی دارد و معمولاً به صورت زیر نوشته می‌شود

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2J+1}} \langle k, J \| T^{(K)} \| k', J' \rangle$$

ه) نشان بدهید که برعکس، اگر  $(2K+1)$  عملگر  $T_Q^{(K)}$  به‌ازاء کلیهٔ کتهای  $|k, J, M\rangle$  و  $|k', J', M'\rangle$  در رابطهٔ (۴) صدق کنند، در روابط (۱)، (۲) و (۳) نیز صدق خواهند کرد، یعنی، این عملگرها  $(2K+1)$  مؤلفهٔ یک عملگر تانسوری ساده‌نشده‌ی از مرتبهٔ  $K$  را تشکیل می‌دهد. و) نشان بدهید که برای یک ذره بدون اسپین، عملگرهای گشتاور چندقطبی الکتریکی  $Q_i^m$  معرفی شده در مکمل ۵ از فصل ۱۰، در فضای حالت  $\mathcal{E}_T$  این ذره، عملگرهای تانسوری

ساده‌نشدنی از مرتبه  $l$  هستند. به علاوه، نشان بدهید که وقتی درجه آزادی اسپین را به حساب بیاوریم، عملگرهای  $Q_l^m$ ، عملگرهای تانسوری ساده‌نشدنی در فضای حالت  $\mathcal{E}_l \otimes \mathcal{E}_s$  (که  $\mathcal{E}_s$  فضای حالت اسپین است) باقی می‌مانند.

۸) قواعد گزینشی را به دست بیاورید که توسط  $Q_l^m$  در یک پایه متعارف  $\{|k, l, K, M_J\rangle\}$  به دست آمده از جمع تکانه زاویه‌ای مداری  $L$  و اسپین  $S$  ذره برای تشکیل تکانه زاویه‌ای کل  $J = L + S$ ، برقرار باشند  $[l(l+1)\hbar^2, J(J+1)\hbar^2, M_J\hbar]$  به ترتیب ویژه‌مقدارهای  $J^2, L^2, J_z$  هستند.

۹. فرض کنید  $A_{Q_1}^{(K_1)}$  یک عملگر تانسوری ساده‌نشدنی (تمرین ۸) از مرتبه  $K_1$  در فضای حالت  $\mathcal{E}_1$  و  $B_{Q_2}^{(K_2)}$  یک عملگر تانسوری ساده‌نشدنی مرتبه  $K_2$  در فضای حالت  $\mathcal{E}_2$  باشند. با  $A_{Q_1}^{(K_1)}$  و  $B_{Q_2}^{(K_2)}$  عملگر زیر را می‌سازیم

$$C_Q^{(K)} = [A^{(K_1)} \otimes B^{(K_2)}]_Q^{(K)} = \sum_{Q_1, Q_2} \langle K_1, K_2; Q_1, Q_2 | K, Q \rangle A_{Q_1}^{(K_1)} B_{Q_2}^{(K_2)}$$

الف) با استفاده از روابط بازگشتی برای ضرایب کلبش گوردن (مکمل ۲ از فصل ۱۰)، نشان بدهید که  $C_Q^{(K)}$  و تکانه زاویه‌ای کل  $J = J_1 + J_2$  سیستم در روابط جابه‌جایی (۱)، (۲) و (۳)ی تمرین ۸ صدق می‌کنند. نشان بدهید که  $C_Q^{(K)}$  مؤلفه‌های یک عملگر تانسوری ساده‌نشدنی از مرتبه  $k$  هستند.

ب) نشان بدهید که  $\sum_Q (-1)^Q A_Q^{(K)} B_{-Q}^{(K)}$  یک عملگر اسکالر است (می‌توانید از نتایج بخش ۳-۲ مکمل ۲ از فصل ۱۰ استفاده کنید).

### ۱۰. جمع سه تکانه زاویه‌ای

فرض کنید  $\mathcal{E}(1), \mathcal{E}(2), \mathcal{E}(3)$  فضاهای حالت سه سیستم (۱)، (۲) و (۳) یا تکانه‌های زاویه‌ای  $J_1, J_2, J_3$  باشند. تکانه زاویه‌ای کل را به صورت  $J = J_1 + J_2 + J_3$  خواهیم نوشت. فرض کنید  $\{|k_a, j_a, m_a\rangle\}, \{|k_b, j_b, m_b\rangle\}$  و  $\{|k_c, j_c, m_c\rangle\}$  به ترتیب پایه‌های متعارف  $\mathcal{E}(1), \mathcal{E}(2), \mathcal{E}(3)$  باشند. برای ساده کردن نمادگذاری، نظیر فصل ۱۰، شاخص  $k_a, k_b, k_c$  را حذف خواهیم کرد. می‌خواهیم ویژه‌حالتها و ویژه‌مقدارهای تکانه زاویه‌ای کل را در زیر فضای  $\mathcal{E}(j_a, j_b, j_c)$  از کتهای

$$\{|j_a m_a\rangle | j_b m_b\rangle | j_c m_c\rangle\} \quad (1)$$

$$-j_a \leq m_a \leq j_a, -j_b \leq m_b \leq j_b, -j_c \leq m_c \leq j_c$$

تشکیل می‌شود، پیدا کنیم. بدین منظور باید  $j_a, j_b$  و  $j_c$  را با هم جمع کنیم تا یک ویژه حالت  $J_z$  و  $J_x$  که توسط اعداد کوانتومی  $j_f$  و  $m_f$  مشخص می‌شود، پدید بیاید. ابتدا  $j_b$  را به  $j_c$  می‌افزاییم تا یک تکانه زاویه‌ای  $j_e$  به دست بیاید، سپس  $j_a$  و  $j_e$  را با هم جمع می‌کنیم تا حالت  $(j_f m_f)$  به دست بیاید، یک چنین ویژه حالت بهنجاری را به صورت زیر نشان خواهیم داد

$$|j_a, (j_b j_c) j_e; j_f m_f\rangle \quad (۲)$$

همچنین می‌توانستیم  $j_a$  و  $j_b$  را به یکدیگر بیفزاییم تا  $j_g$  به دست بیاید و سپس  $j_e$  را با  $j_g$  جمع کنیم تا حالت نسبی  $(j_f m_f)$  که به صورت

$$|(j_a j_b) j_g, j_c; j_f m_f\rangle \quad (۳)$$

نوشته می‌شود، به دست بیاید.

الف) نشان بدهید که سیستم کتهای (۲)، مربوط به مقادیر مختلف ممکن  $j_e, j_f, m_f$  تشکیل یک پایه راست‌هنجار در  $\mathcal{E}(j_a, j_b, j_c)$  می‌دهند. به همین سؤال در مورد سیستم کتهای (۳)، مربوط به مقادیر مختلف  $m_f, j_f, j_g$  پاسخ بدهید.

ب) با استفاده از عملگرهای  $J_{\pm}$ ، نشان بدهید که حاصلضرب اسکالر  $\langle j_a, (j_b j_c) j_e; j_f m_f | (j_a j_b) j_g, j_c; j_f m_f \rangle$  به  $m_f$  بستگی ندارد، چنین حاصلضرب اسکالری را با  $\langle j_a, (j_b j_c) j_e; j_f | (j_a j_b) j_g, j_c; j_f \rangle$  نمایش می‌دهیم.  
ج) نشان بدهید که

$$\langle j_a, (j_b j_c) j_e; j_f m_f | = \sum_{j_g} \langle (j_a j_b) j_g, j_c; j_f | \langle j_a, (j_b j_c) j_e; j_f | \langle j_a j_b) j_g, j_c; j_f m_f | \quad (۴)$$

د) با استفاده از ضرایب کلیش گوردن، بسط بردارهای (۲) و (۳) را در پایه (۱) بنویسید، و از آن نتیجه بگیرید که

$$\begin{aligned} \sum_{m_e} \langle j_b, j_c; m_b, m_c | j_e, m_e \rangle \langle j_a, j_e; m_a, m_e | j_f, m_f \rangle = \\ \sum_{j_g m_g} \langle j_a, j_b; m_a, m_b | j_g, m_g \rangle \langle j_g, j_c; m_g, m_c | j_f, m_f \rangle \\ \times \langle (j_a j_b) j_g, j_c; j_f | \langle j_a, (j_b j_c) j_e; j_f | \end{aligned} \quad (۵)$$

ه) با شروع از رابطه (۵)، و استفاده از روابط تعامدی ضرایب کلیش گوردن، روابط زیر را ثابت کنید

$$\sum_{m_a m_b m_c} \langle j_b, j_c; m_b, m_c | j_e, m_e \rangle \langle j_a, j_e; m_a, m_e | j_f, m_f \rangle \langle j_d, m_d | j_a, j_b; m_a, m_b \rangle \\ = \langle j_d, j_c; m_d, m_c | j_f, m_f \rangle \langle (j_a j_b) j_d, j_c; j_f | j_a, (j_b j_c) j_e; j_f j_e; j_f \rangle \quad (۶)$$

و

$$\langle (j_a j_b) j_d, j_c; j_f | j_a, (j_b j_c) j_e; j_f \rangle = \frac{1}{2j_f + 1} \sum_{m_a m_b m_c m_d m_e m_f} \langle j_b, j_c; m_b, m_c | j_e, m_e \rangle \\ \times \langle j_a, j_e; m_a, m_e | j_f, m_f \rangle \langle j_d, m_d | j_a, j_b; m_a, m_b \rangle \langle j_f, m_f | j_d, j_c; m_d, m_c \rangle \quad (۷)$$

تمرینات ۸ و ۹:

مراجع: به مراجع مکمل ۴ از فصل ۱۰ مراجعه کنید

تمرین ۱۰:

مراجع

Edmonds (2.21), chap. 6; Messiah (1.17), §XIII-29 and App. C; Rose (2.19), App. I.



۱۱

نظريهٔ اختلال مانا

۱-۱۱ تشریح روش

۱-۱-۱۱ بیان مسئله

۲-۱-۱۱ حل تقریبی معادله ویژه مقدار  $H(\lambda)$

۲-۱۱ اختلال یک تراز ناواگن

۱-۲-۱۱ تصحیحات مرتبه اول

الف) تصحیح انرژی

ب) تصحیح ویژه بردار

۲-۲-۱۱ تصحیحات مرتبه دوم

الف) تصحیح انرژی

ب) تصحیح ویژه بردار

ج) حد بالای  $\epsilon_2$

۳-۱۱ اختلال یک تراز واگن

مطالعه کوانتوم مکانیکی سیستمهای فیزیکی پایستار (یعنی، سیستمهایی که هامیلتونیهای آنها صریحاً وابسته به زمان نیست) مبتنی بر معادله ویژه مقدار عملگر هامیلتونی است. قبلاً با دو نمونه مهم از سیستمهای فیزیکی (نوسانگر هماهنگ و اتم هیدروژن)، که هامیلتونیهای آنها آن قدر ساده هست که بتوان معادلات ویژه مقدار آنها را دقیقاً حل کرد، برخورد کرده ایم. ولی، این امر تنها در تعداد کمی از مسائل اتفاق می افتد. عموماً، معادله بسیار پیچیده است و نمی توانیم جوابهای آن را به روش تحلیلی پیدا کنیم.<sup>۱</sup> به عنوان مثال، ما نمی دانیم چگونه اتمهای چندالکترونی، حتی اتم هلیوم، را دقیقاً بررسی کنیم. به علاوه، نظریه اتم هیدروژن، فصل ۷ بخش ج)، فقط برهم کنش الکتروستاتیکی بین پروتون و الکترون را در نظر می گیرد؛ وقتی تصحیحات نسبیتی (نظیر نیروهای مغناطیسی) به این برهم کنش اصلی افزوده شوند، معادله به دست آمده برای اتم هیدروژن دیگر به طریق تحلیلی قابل حل کردن نیست. در این صورت برای حل آن باید به روش عددی، که غالباً با کامپیوتر انجام می شود، متوسل شویم. با این همه، روشهای تقریبی ای وجود دارند که امکان می دهند، در بعضی موارد، جوابهای تقریبی معادله ویژه مقدار اصلی را به طور تحلیلی به دست بیاوریم. در این فصل، یکی از این روشها را که "نظریه اختلال مانا" نامیده می شود، مطالعه خواهیم کرد.<sup>۲</sup> (در فصل ۱۳) "نظریه اختلال وابسته به زمان" را تشریح خواهیم کرد که در بررسی سیستمهایی به کار برده می شود که هامیلتونیهای آنها شامل جملاتی است که صریحاً به زمان هستند).

نظریه اختلال به طور بسیار وسیعی در فیزیک کوانتومی مورد استفاده قرار می گیرد، زیرا با برخورد متداول فیزیکدانها با مسائل فیزیکی ارتباط مستقیم دارد. در مطالعه یک پدیده یا یک سیستم فیزیکی، ابتدا عوامل عمده ای که سبب ویژگیهای اصلی این پدیده یا سیستم هستند، جدا می کنیم. وقتی این عوامل را شناختیم، سعی می کنیم با مورد نظر قرار دادن عوامل کم اهمیت تری که در تقریب اول از آنها صرف نظر کردیم، جزئیات "ریزتر" را تشریح کنیم. برای بررسی این عوامل ثانویه است که معمولاً نظریه اختلال استفاده می شود. مثلاً در فصل ۱۲، اهمیت نظریه اختلال را در فیزیک اتمی خواهیم دید؛ این نظریه ما را قادر خواهد ساخت تا تصحیحات نسبیتی را در مورد اتم هیدروژن محاسبه کنیم. همین طور، مکمل ۲ از فصل ۱۴، که به اتم هلیوم اختصاص داده شده است، نشان می دهد که چگونه امکان بررسی اتمهای چندالکترونی را فراهم می سازد. کاربردهای متعدد دیگری از نظریه اختلال در مکملهای این فصل و فصل بعدی آمده است.

بالاخره یک روش تقریبی خیلی متداول دیگر، به نام روش وردشی را، که در مکمل ۵ از

۱. البته این پدیده منحصر به محدوده مکانیک کوانتومی نیست. در تمام بخشهای فیزیک مسائل بسیار کمی هستند که می توانند به طور کامل و به طور تحلیلی بررسی شوند.

۲. در مکانیک کلاسیک نیز نظریه اختلال وجود دارد، که اساساً با آنچه در اینجا تشریح خواهیم کرد کاملاً مشابه است.

فصل ۱۱ ارائه خواهیم داد ذکر می‌کنیم، و خلاصه‌ای از کاربردهای آن را در فیزیک حالت جامد (مکمل ۶ از فصل ۱۱) و فیزیک مولکولی (مکمل ۷ از فصل ۱۱) متذکر می‌شویم.

## ۱-۱۱ تشریح روش

### ۱-۱-۱۱ بیان مسئله

نظریهٔ اختلال وقتی قابل استفاده است که بتوان هامیلتونی سیستم مورد نظر را به صورت

$$H = H_0 + W \quad (۱-۱۱)$$

نوشت. در رابطهٔ بالا ویژه‌حالتها و ویژه‌مقدارهای  $H_0$  معلوم‌اند، و  $W$  خیلی کوچکتر از  $H_0$  است. عملگر  $H_0$ ، که مستقل از زمان است، "هامیلتونی نامختل" و  $W$ ، "اختلال" نامیده می‌شوند. اگر  $W$  وابسته به زمان نباشد، می‌گوییم با یک "اختلال مانا" مواجهیم؛ این موردی است که ما در این فصل بررسی می‌کنیم (مورد اختلالهای وابسته به زمان را در فصل ۱۳ مطالعه خواهیم کرد). در این صورت مسئله عبارت است از یافتن تغییراتی که در اثر افزودن اختلال  $W$ ، در ترازهای انرژی سیستم و حالتهای مانای آن به وجود می‌آید.

وقتی می‌گوییم  $W$  خیلی کوچکتر از  $H_0$  است، مقصودمان این است که عناصر ماتریسی  $W$  خیلی کوچکتر از عناصر ماتریسی  $H_0$  اند.<sup>۱</sup> برای روشن‌تر کردن این نکته، فرض می‌کنیم که  $W$  با یک پارامتر حقیقی بدون بعد  $\lambda$  که خیلی کوچکتر از ۱ است، متناسب باشد

$$W = \lambda \hat{W}$$

$$\lambda \ll 1 \quad (۲-۱۱)$$

(که  $\hat{W}$  عملگری است که عناصر ماتریسی آن قابل مقایسه با عناصر ماتریسی  $H_0$  اند). نظریهٔ اختلال، مشتمل است بر بسط ویژه‌مقدارها و ویژه‌حالتها  $H$  برحسب توانهای  $\lambda$ ، و نگهداشتن تنها تعداد محدودی از جملات این بسطها، (که اغلب فقط یک یا دو جمله است).

فرض خواهیم کرد که ویژه‌حالتها و ویژه‌مقدارهای هامیلتونی نامختل  $H_0$  معلوم باشند. علاوه بر این، فرض خواهیم کرد که انرژیهای نامختل، یک طیف ناپیوسته تشکیل دهند، و آنها را با یک شاخص عدد صحیح  $p$  علامت‌گذاری خواهیم کرد:  $E_p^0$ . ویژه‌حالتهاى متناظر را با  $\langle \varphi_p^0 |$  نشان

۱. به عبارت دقیقتر، نکتهٔ مهم این است که عناصر ماتریسی  $W$  از اختلالهای بین ویژه‌مقدارهای  $H_0$  (باید داشت ۱-۲-۱-ب) خیلی کوچکترند.

خواهیم داد، شاخص اضافی  $i$  امکان می‌دهد که، در مورد یک ویژه‌مقدار واگن  $E_p^0$ ، بردارهای مختلف یک پایهٔ راست‌هنجار ویژه‌زیرفضای وابسته را از یکدیگر تمیز دهیم. از این رو داریم

$$H_0 |\varphi_p^i\rangle = E_p^0 |\varphi_p^i\rangle \quad (۳-۱۱)$$

که مجموعه بردارهای  $|\varphi_p^i\rangle$ ، یک پایهٔ راست‌هنجار فضای حالت را تشکیل می‌دهند

$$\langle \varphi_p^i | \varphi_{p'}^{i'} \rangle = \delta_{pp'} \delta_{ii'} \quad (۱۱-۴الف)$$

$$\sum_p \sum_i |\varphi_p^i\rangle \langle \varphi_p^i| = 1 \quad (۱۱-۴ب)$$

اگر (۱۱-۲) را در (۱۱-۱) قرار بدهیم، می‌توانیم هامیلتونی سیستم را تابع پیوسته‌ای از پارامتر  $\lambda$  که مشخص‌کننده شدت اختلال است، در نظر بگیریم

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda \hat{W} \quad (۱۱-۵)$$

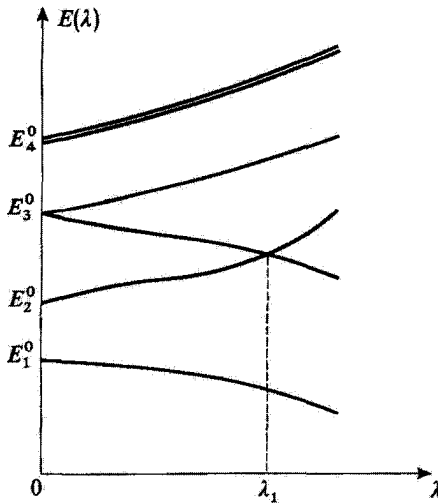
وقتی  $\lambda$  مساوی صفر باشد،  $H(\lambda)$  برابر با هامیلتونی نامختل  $H_0$  می‌شود. ویژه‌مقدارهای  $E(\lambda)$  مربوط به  $H(\lambda)$ ، در حالت کلی به  $\lambda$  بستگی دارند، و شکل ۱۱-۱ اشکال ممکن تغییرات آنها را نسبت به  $\lambda$  نشان می‌دهد.

به هر یک از منحنیهای شکل ۱۱-۱، یک ویژه‌بردار  $H(\lambda)$  وابسته است. برای یک  $\lambda$  معین، این بردارها یک پایه از فضای حالت را تشکیل می‌دهند [ $H(\lambda)$  یک مشاهده‌پذیر است]. وقتی  $\lambda$  خیلی کوچکتر از ۱ باشد، ویژه‌مقدارهای  $E(\lambda)$  و ویژه‌بردارهای  $|\psi(\lambda)\rangle$  مربوط به  $H(\lambda)$ ، خیلی به مقادیر  $H_0 = H(\lambda = 0)$ ، که به‌ازاء  $\lambda \rightarrow 0$  حاصل می‌شوند، نزدیک می‌مانند.

البته، ممکن است  $H(\lambda)$  دارای یک یا چند ویژه‌مقدار واگن باشد. به‌عنوان مثال، در شکل ۱۱-۱، منحنی دوگانه، نمایندهٔ یک انرژی دو‌بار واگن است (انرژی‌ای که وقتی  $\lambda \rightarrow 0$  میل کند به  $E_p^0$  میل می‌کند)، که برای تمام  $\lambda$ ها به یک ویژه‌زیرفضای دوبعدی مربوط است. همچنین ممکن است که چند ویژه‌مقدار متمایز  $E(\lambda)$  وقتی  $\lambda \rightarrow 0$  میل کنند<sup>۱</sup> به یک انرژی نامختل  $E_p^0$  میل کنند (در شکل ۱۱-۱)، برای  $E_p^0$  یک چنین حالتی وجود دارد). در این صورت می‌گوییم که اثر اختلال این است که واگنی ویژه‌مقدار مربوط به  $H_0$  را برطرف می‌کند.

در بخش زیر، یک حل تقریبی از معادلهٔ ویژه‌مقدار  $H(\lambda)$  را برای  $\lambda \ll 1$  ارائه می‌دهیم.

۱. این غیرممکن نیست که واگنهای اضافی بتوانند به‌ازاء مقادیر غیرصفر بخصوصی از  $\lambda$  ظاهر شوند (تقاطع در  $\lambda = \lambda_1$  در شکل ۱۱-۱). در اینجا فرض می‌کنیم که  $\lambda$  به‌حد کافی کوچک باشد که از چنین وضعی جلوگیری می‌شود.



شکل ۱-۱۱ تغییرات ویژه‌مقدارهای  $E(\lambda)$  ی هامیلتونی  $H(\lambda) = H_0 + \lambda \hat{W}$  نسبت به  $\lambda$ . هر منحنی مربوط به یک ویژه‌حالت از  $H(\lambda)$  است. برای  $\lambda = 0$ ، طیف  $H_0$  را به دست می‌آوریم. در اینجا فرض کرده‌ایم که ویژه‌مقدارهای  $E_1^0$  و  $E_2^0$  دوبار واگن باشند؛ اعمال اختلال  $\lambda \hat{W}$  واگنی  $E_1^0$  را بر طرف می‌کند ولی در واگنی  $E_2^0$  تغییری نمی‌دهد. یک واگنی دوگانه اضافی به‌ازاء  $\lambda = \lambda_1$  ظاهر می‌شود.

### ۱-۱-۲ حل تقریبی معادلهٔ ویژه‌مقدار $H(\lambda)$

می‌خواهیم ویژه‌حالت‌های  $|\psi(\lambda)\rangle$  و ویژه‌مقدارهای  $E(\lambda)$  ی عملگر هرمیتی  $H(\lambda)$  را پیدا کنیم

$$H(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle \quad (۶-۱۱)$$

فرض خواهیم کرد که  $|\psi(\lambda)\rangle$  و  $E(\lambda)$  بتوان  $^1$  را به صورت زیر برحسب توان‌های  $\lambda$  بسط داد

$$E(\lambda) = \varepsilon_0 + \lambda \varepsilon_1 + \dots + \lambda^q \varepsilon_q + \dots \quad (۷-۱۱ الف)$$

$$|\psi(\lambda)\rangle = |0\rangle + \lambda |1\rangle + \dots + \lambda^q |q\rangle + \dots \quad (۷-۱۱ ب)$$

۱. از دیدگاه ریاضی این نکته آشکار نیست، مسئلهٔ اساسی عبارت است از همگرایی رشته‌های (۷-۱۱).

سپس این بسطها و همچنین تعریف (۵-۱۱) را در معادله (۶-۱۱) قرار می‌دهیم

$$(H_0 + \lambda \hat{W}) \left[ \sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q |q\rangle \right] = \left[ \sum_{q'=0}^{\infty} \lambda^{q'} \varepsilon_{q'} \right] \left[ \sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q |q\rangle \right] \quad (۸-۱۱)$$

می‌خواهیم که این معادله برای  $\lambda$  های کوچک ولی دلخواه برقرار باشد. بنابراین، باید ضرایب توانهای متوالی  $\lambda$  در طرفین معادله را با هم مساوی قرار بدهیم. در این صورت خواهیم داشت — برای جملات مرتبه صفر از  $\lambda$

$$H_0 |0\rangle = \varepsilon_0 |0\rangle \quad (۹-۱۱)$$

— برای جملات مرتبه اول

$$(H_0 - \varepsilon_0) |1\rangle + (\hat{W} - \varepsilon_1) |0\rangle = 0 \quad (۱۰-۱۱)$$

— برای جملات مرتبه دوم

$$(H_0 - \varepsilon_0) |2\rangle + (\hat{W} - \varepsilon_1) |1\rangle - \varepsilon_2 |0\rangle = 0 \quad (۱۱-۱۱)$$

— و برای جملات مرتبه  $q$  ام

$$(H_0 - \varepsilon_0) |q\rangle + (\hat{W} - \varepsilon_1) |q-1\rangle - \varepsilon_2 |q-2\rangle \dots - \varepsilon_q |0\rangle = 0 \quad (۱۲-۱۱)$$

در اینجا، مطالعه خودمان را به بررسی سه معادله اول محدود می‌کنیم، یعنی، در بسطهای (۷-۱۱)، از جملات مرتبه بالاتر از ۲ در  $\lambda$ ، صرف نظر می‌کنیم.

می‌دانیم که معادله ویژه مقدار (۶-۱۱)،  $|\psi(\lambda)\rangle$  را فقط با تقریب یک ضریب ثابت تعریف می‌کند. بنابراین می‌توانیم هنج  $|\psi(\lambda)\rangle$  و فاز آن را انتخاب کنیم: شرط خواهیم کرد که  $\langle \psi(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle = 1$  باشد. و فاز آن را طوری انتخاب خواهیم کرد که حاصلضرب اسکالر  $\langle \psi(\lambda) | 0 \rangle$  حقیقی باشد. از این مطلب نتیجه می‌شود که، تا مرتبه صفر، بردار  $|0\rangle$  باید بهنجار باشد

$$\langle 0 | 0 \rangle = 1 \quad (۱۳-۱۱)$$

اما، فاز این بردار، دلخواه باقی می‌ماند؛ در بخشهای ۲-۱۱ و ۳-۱۱ خواهیم دید که در هر مورد خاص چگونه می‌توان این فاز را انتخاب کرد. تا مرتبهٔ اول، مربع هنج  $\langle\psi(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle$  را می‌توانیم به صورت زیر بنویسیم

$$\begin{aligned}\langle\psi(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle &= [\langle 0| + \lambda\langle 1|][|0\rangle + \lambda|1\rangle] + O(\lambda^2) \\ &= \langle 0|0\rangle + \lambda[\langle 1|0\rangle + \langle 0|1\rangle] + O(\lambda^2)\end{aligned}\quad (14-11)$$

(که نماد  $O(\lambda^p)$  معرف تمام جملاتی است که مرتبهٔ آنها بزرگتر یا مساوی  $p$  است). با استفاده از (۱۳-۱۱)، مشاهده می‌کنیم که اگر جملهٔ  $\lambda$  صفر باشد، این عبارت تا مرتبهٔ اول برابر با ۱ است. اما انتخاب فاز نشان می‌دهد که حاصلضرب اسکالر  $\langle 0|1\rangle$  حقیقی است (زیرا  $\lambda$  حقیقی است). بنابراین داریم

$$\langle 0|1\rangle = \langle 1|0\rangle = 0 \quad (15-11)$$

با استدلال مشابه، برای مرتبهٔ دوم از  $\lambda$ ، خواهیم داشت

$$\langle 0|2\rangle = \langle 2|0\rangle = -\frac{1}{2}\langle 1|1\rangle \quad (16-11)$$

و برای مرتبهٔ  $q$  ام

$$\begin{aligned}\langle 0|q\rangle = \langle q|0\rangle &= -\frac{1}{2}[(q-1)\langle 1|1\rangle + (q-2)\langle 2|2\rangle + \dots \\ &\quad + \langle 2|q-2\rangle + \langle 1|q-1\rangle]\end{aligned}\quad (17-11)$$

بنابراین، وقتی مطالعه را به مرتبهٔ دوم از  $\lambda$  محدود کنیم. معادلات اختلال عبارت خواهند بود از (۹-۱۱)، (۱۰-۱۱) و (۱۱-۱۱). با قراردادهایی که پذیرفته‌ایم. بایستی شرایط (۱۳-۱۱)، (۱۵-۱۱) و (۱۶-۱۱) را اضافه کنیم.

معادلهٔ (۹-۱۱) این حقیقت را بیان می‌کند که  $|0\rangle$  یک ویژه‌بردار  $H_0$  با ویژه‌مقدار  $\varepsilon_0$  است. بنابراین،  $\varepsilon_0$  به طیف  $H_0$  تعلق دارد. این چیزی است که انتظار آن هم می‌رفت، زیرا وقتی  $\lambda \rightarrow 0$  میل کند، هر ویژه‌مقدار  $H(\lambda)$  به سمت یکی از انرژی‌های نامختل میل می‌کند. سپس یک ویژه‌مقدار خاص  $\varepsilon_0$ ، یعنی، یک ویژه‌مقدار  $E_n^0$  عملگر  $H_0$  را انتخاب می‌کنیم. همان‌طور که شکل ۱-۱۱



نشان می‌دهد، یک یا چند انرژی مختلف  $E(\lambda)$  (ویژه‌مقدارهای  $H(\lambda)$ ) وجود دارند که وقتی  $\lambda \rightarrow 0$  میل کند، به سمت  $E_n^0$  میل می‌کنند.

مجموعه ویژه‌حالت‌های  $H(\lambda)$  ی مربوط به ویژه‌مقدارهای مختلف  $E(\lambda)$  را در نظر بگیرید که وقتی  $\lambda \rightarrow 0$  میل می‌کند، به سمت  $E_n^0$  میل می‌کند. این ویژه‌حالت‌ها، یک زیرفضای برداری به وجود می‌آورند که اگر  $\lambda$  در حوالی صفر تغییر کند، بعد آن مسلماً نمی‌تواند به طور ناپیوسته تغییر کند. در نتیجه، این بعد برابر با واگنی  $g_n$  مربوط به  $E_n^0$  است. بخصوص اگر  $E_n^0$  ناواگن باشد، فقط می‌تواند به یک تک انرژی  $E(\lambda)$  منجر شود، و این انرژی ناواگن است. برای مطالعه تأثیر اختلال  $W$ ، موارد تراز ناواگن و ترازهای واگن  $H_0$  را به طور جداگانه بررسی خواهیم کرد.

## ۱۱-۲ اختلال یک تراز ناواگن

یک ویژه‌مقدار ناواگن خاص  $E_n^0$  منتسب به هامیلتونی نامختل  $H_0$  را در نظر بگیرید. یک ویژه‌بردار  $|\varphi_n\rangle$ ، که با تقریب یک ضریب ثابت یکتاست، به این ویژه‌مقدار وابسته است. می‌خواهیم تغییراتی را که در این انرژی نامختل و حالت مانای مربوط به آن در اثر افزودن اختلال  $W$  به هامیلتونی، حاصل می‌شود، تعیین کنیم.

برای انجام این کار، از معادلات اختلال (۹-۱۱) تا (۱۱-۱۲) و همچنین شرایط (۱۱-۱۳) و (۱۱-۱۵) تا (۱۱-۱۷)، استفاده می‌کنیم. برای آن ویژه‌مقدار  $H(\lambda)$  که وقتی  $\lambda \rightarrow 0$  به سمت  $E_n^0$  میل می‌کند، داریم

$$\varepsilon_0 = E_n^0 \quad (11-18)$$

که بنابر (۹-۱۱)، مؤید این است  $|\varphi_n\rangle$  باید با  $|\varphi_n\rangle$  متناسب باشد. بردارهای  $|\varphi_n\rangle$  و  $|\varphi_n\rangle$  هر دو بهنجار هستند (۱۱-۱۳)، و ما فرض می‌کنیم

$$|\varphi_n\rangle = |\varphi_n\rangle \quad (11-19)$$

بنابراین، وقتی  $\lambda \rightarrow 0$  میل کند، مجدداً حالت نامختل  $|\varphi_n\rangle$  با همان فاز را به دست می‌آوریم. ویژه‌مقدار  $H(\lambda)$  را که، وقتی  $\lambda \rightarrow 0$  به سمت ویژه‌مقدار  $E_n^0$  مربوط به  $H_0$  میل می‌کند،  $E_n(\lambda)$  می‌نامیم. فرض خواهیم کرد که  $\lambda$  به حد کافی کوچک باشد تا این ویژه‌مقدار، ناواگن باقی بماند، یعنی، اینکه یک ویژه‌بردار منحصر به فرد  $|\psi_n(\lambda)\rangle$  به آن مربوط باشد (در مورد تراز  $n = 2$

شکل ۱، اگر  $\lambda < \lambda_1$  باشد این فرض صادق است. اینک جملات اول بسطهای  $E_n(\lambda)$  و  $\langle \psi_n(\lambda) |$  برحسب  $\lambda$  را حساب می‌کنیم.

### ۱-۲-۱۱ تصحیحات مرتبهٔ اول

این محاسبه را با تعیین  $\varepsilon_1$  و بردار  $|1\rangle$  از روی معادلهٔ (۱۱-۱۰) و شرط (۱۱-۱۵)، شروع می‌کنیم.

#### الف) تصحیح انرژی

از تصویر کردن معادلهٔ (۱۱-۱۰) بر روی بردار  $|\varphi_n\rangle$ ، داریم

$$\langle \varphi_n | (H_0 - \varepsilon_0) | 1 \rangle + \langle \varphi_n | (\hat{W} - \varepsilon_1) | 0 \rangle = 0 \quad (20-11)$$

جملهٔ اول صفر است زیرا  $|\varphi_n\rangle = |0\rangle$  یک ویژه بردار عملگر هرمیتی  $H_0$ ، با ویژه مقدار  $E_n^0 = \varepsilon_0$  است. سپس با در نظر گرفتن (۱۱-۱۹)، از معادلهٔ (۱۱-۲۰) نتیجه می‌شود

$$\varepsilon_1 = \langle \varphi_n | \hat{W} | 0 \rangle = \langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_n \rangle \quad (21-11)$$

در مورد یک حالت ناواگن  $E_n^0$ ، می‌توان ویژه مقدار  $E_n(\lambda)$  عملگر  $H$  را که مربوط به  $E_n^0$  است، تا مرتبهٔ اول اختلال  $W = \lambda \hat{W}$ ، به صورت زیر نوشت

$$E_n(\lambda) = E_n^0 + \langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle + O(\lambda^2) \quad (22-11)$$

تصحیح مرتبهٔ اول در یک انرژی ناواگن  $E_n^0$  برابر با مقدار متوسط جملهٔ اختلال  $W$  در حالت نامختل  $|\varphi_n\rangle$  است.

#### ب) تصحیح ویژه بردار

مسلماً تصویر (۱۱-۲۰) تمام اطلاعات موجود در معادلهٔ اختلال (۱۱-۱۰) را به دست نمی‌دهد. حال باید این معادله را بر روی تمام بردارهای پایهٔ  $\{|\varphi_p^i\rangle\}$  بجز  $|\varphi_n\rangle$  تصویر کنیم. با استفاده از (۱۱-۱۸) و (۱۱-۱۹) داریم

$$\langle \varphi_p^i | (H_0 - E_n^0) | 1 \rangle + \langle \varphi_p^i | (\hat{W} - \varepsilon_1) | \varphi_n \rangle = 0 \quad (p \neq n) \quad (23-11)$$

از آنجا که بجز ویژه مقدار  $E_n^0$ ، سایر ویژه مقدارهای  $E_p^0$  واگن‌اند، باید در اینجا شاخص واگنی  $i$  را حفظ کنیم). چون ویژه بردارهای  $H_0$  وابسته به ویژه مقدارهای متفاوت، متعامدند، جمله آخر، یعنی  $\langle \varphi_p^i | \varphi_n \rangle$ ، صفر است. به علاوه، در جمله اول،  $H_0$  را از سمت چپ بر  $\langle \varphi_p^i |$  اثر می‌دهیم. در این صورت (۲۳-۱۱) به صورت زیر در می‌آید

$$(E_p^0 - E_n^0) \langle \varphi_p^i | 1 \rangle + \langle \varphi_p^i | \hat{W} | \varphi_n \rangle = 0 \quad (24-11)$$

که ضرایب بسط مورد نظر بردار  $|1\rangle$  روی کلیه حالت‌های پایه نامختل، به استثناء  $|\varphi_n\rangle$ ، را به دست می‌دهد

$$\langle \varphi_p^i | 1 \rangle = \frac{1}{E_n^0 - E_p^0} \langle \varphi_p^i | \hat{W} | \varphi_n \rangle \quad (p \neq n) \quad (25-11)$$

آخرین ضریبی که ما در اختیار نداریم، یعنی  $\langle \varphi_n | 1 \rangle$ ، در واقع بنا بر شرط (۱۱-۱۵)، که هنوز آن را به‌کار نبرده‌ایم، صفر است [بنا بر (۱۱-۱۹)،  $|\varphi_n\rangle$  بر  $|0\rangle$  منطبق است]

$$\langle \varphi_n | 1 \rangle = 0 \quad (26-11)$$

بنابراین، بردار  $|1\rangle$  را می‌شناسیم زیرا بسط آن را روی پایه  $\{|\varphi_p^i\rangle\}$  می‌دانیم

$$|1\rangle = \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{\langle \varphi_p^i | \hat{W} | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} |\varphi_p^i\rangle \quad (27-11)$$

در نتیجه می‌توانیم بردار ویژه  $|\psi_n(\lambda)\rangle$  عملگر  $H$  را، که مربوط به حالت نامختل  $|\varphi_n\rangle$  است، با تقریب مرتبه اول نسبت به اختلال  $W = \lambda \hat{W}$ ، به صورت زیر بنویسیم

$$|\psi_n(\lambda)\rangle = |\varphi_n\rangle + \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{\langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} |\varphi_p^i\rangle + O(\lambda^2) \quad (28-11)$$

تصحیح مرتبه اول بردار حالت، یک برهم‌نهش خطی از تمام حالت‌های نامختل، بجز  $|\varphi_n\rangle$ ، است؛ اصطلاحاً گفته می‌شود که اختلال  $W$  "اختلاطی" از حالت  $|\varphi_n\rangle$  با سایر ویژه حالت‌های  $H_0$  ایجاد می‌کند. اگر اختلال  $W$  هیچ عنصر ماتریسی بین  $|\varphi_n\rangle$  و  $|\varphi_p^i\rangle$  نداشته باشد، سهم حالت مفروض  $|\varphi_p^i\rangle$  صفر است. به‌طور کلی، هرچه جفت‌شدگی القاء شده توسط  $W$  بین  $|\varphi_n\rangle$  و  $|\varphi_p^i\rangle$

(که با عنصر ماتریسی  $\langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle$  مشخص می‌شود) قوی‌تر باشد، و هر چه تراز  $E_p^\circ$  به تراز  $E_n^\circ$  مورد نظر نزدیکتر باشد، اختلاط با  $|\varphi_p^i\rangle$  بیشتر خواهد بود.

یادداشت:

ما فرض کرده‌ایم که اختلال  $W$  از هامیلتونی نامختل  $H_0$  خیلی کوچکتر باشد، یعنی، عناصر ماتریسی  $W$  از عناصر ماتریسی  $H_0$  خیلی کوچکتر باشند. در اینجا به نظر می‌رسد که این فرضیه کافی نباشد: تصحیح مرتبهٔ اول بردار حالت، تنها وقتی کوچک است که عناصر ماتریسی غیرقطری  $W$  از اختلاف انرژیهای نامختل متناظر خیلی کوچکتر باشند. ■

### ۱۱-۲-۲ تصحیحات مرتبهٔ دوم

تصحیحات مرتبهٔ دوم را می‌توانیم با روش قبل، با اضافه کردن شرط (۱۱-۱۶)، از معادلهٔ اختلال (۱۱-۱۱) به دست بیاوریم.

الف) تصحیح انرژی

برای محاسبهٔ  $\varepsilon_2$ ، معادلهٔ (۱۱-۱۱) را روی بردار  $|\varphi_n\rangle$  تصویر می‌کنیم، با استفاده از (۱۱-۱۸) و (۱۱-۱۹) داریم

$$\langle \varphi_n | (H_0 - E_n^\circ) | 2 \rangle + \langle \varphi_n | (\hat{W} - \varepsilon_1) | 1 \rangle - \varepsilon_2 \langle \varphi_n | \varphi_n \rangle = 0 \quad (29-11)$$

به همان دلیلی که در بخش ۱۱-۲-۱ الف ذکر کردیم، جملهٔ اول صفر است. برای  $\langle \varphi_n | 1 \rangle$  نیز این چنین است، زیرا بنا بر (۱۱-۲۶)،  $|1\rangle$  با  $|\varphi_n\rangle$  متعامد است. پس داریم

$$\varepsilon_2 = \langle \varphi_n | \hat{W} | 1 \rangle \quad (30-11)$$

یعنی، با قرار دادن رابطهٔ (۱۱-۲۷) به جای  $|1\rangle$  خواهیم داشت

$$\varepsilon_2 \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{|\langle \varphi_p^i | \hat{W} | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^\circ - E_p^\circ} \quad (31-11)$$

این نتیجه به ما امکان می‌دهد که انرژی  $E_n(\lambda)$  را، تا تقریب مرتبهٔ دوم نسبت به اختلال  $W = \lambda \hat{W}$ ، به صورت زیر بنویسیم

$$E_n(\lambda) = E_n^\circ + \langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle + \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{|\langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^\circ - E_p^\circ} + O(\lambda^3) \quad (32-11)$$

یادداشت:

تصحیح مرتبه دوم انرژی برای حالت  $|\varphi_n\rangle$  ناشی از حضور حالت  $|\varphi_p^i\rangle$  با  $(E_n^\circ - E_p^\circ)$  هم علامت است. بنابراین، می‌توانیم بگوییم تا تقریب مرتبه دوم، هر چه حالت  $|\varphi_p^i\rangle$  به حالت  $|\varphi_n\rangle$  نزدیکتر باشد، و هر چه "جفت‌شدگی"  $|\langle\varphi_p^i|W|\varphi_n\rangle|$  قویتر باشد، این دو تراز یکدیگر را بیشتر "دفع" خواهند کرد.

## ب) تصحیح ویژه‌بردار

با تصویر کردن معادله (۱۱-۱۱) بر روی مجموعه بردارهای پایه  $|\varphi_p^i\rangle$  که با  $|\varphi_n\rangle$  متفاوتند، و با استفاده از شرایط (۱۱-۱۶)، می‌توانستیم رابطه‌ای برای کت (۲) بنویسیم، و در نتیجه، ویژه‌بردار را تا تقریب مرتبه دوم، به دست بیاوریم. این محاسبه، هیچ‌گونه مشکل نظری ندارد، و در اینجا به ذکر آن نخواهیم پرداخت.

یادداشت:

در (۱۱-۲۱)، تصحیح مرتبه اول انرژی برحسب ویژه‌بردار مرتبه صفر بیان شده است. همچنین، در (۱۱-۳۰)، تصحیح مرتبه دوم انرژی شامل ویژه‌بردار مرتبه اول است [که تشابه بین فرمولهای (۱۱-۲۷) و (۱۱-۳۱) را بیان می‌کند]. این یک نتیجه کلی است: با تصویر کردن (۱۱-۱۲) بر  $|\varphi_n\rangle$ ، جمله اول را به سمت صفر میل می‌دهیم، که از آن  $\varepsilon_q$  برحسب تصحیحات مرتبه  $1-q, 2-q, \dots$  ویژه‌بردار به دست می‌آید. به این علت است که عموماً در بسط انرژی، یک جمله بیشتر از بسط ویژه‌بردار نگه می‌داریم: به عنوان مثال، انرژی تا مرتبه دوم و ویژه‌بردار تا مرتبه اول داده می‌شوند.

ج) حد بالای  $\varepsilon_2$ 

اگر بسط انرژی را تا مرتبه اول در  $\lambda$  محدود کنیم، می‌توانیم با محاسبه جمله مرتبه دوم که به سادگی به دست می‌آید، به یک برداشت تقریبی از خطای موجود برسیم.

رابطه (۱۱-۳۱) برای  $\varepsilon_2$  را در نظر بگیرید. این رابطه شامل یک مجموع (که عموماً نامتناهی است) از جملاتی است که صورت آنها مثبت یا صفرند. قدرمطلق اختلاف بین انرژی  $E_n^\circ$  تراز مورد مطالعه و انرژی نزدیکترین تراز به آن را با  $\Delta E$  نشان می‌دهیم. برای کلیه مقادیر  $n$  داریم

$$|E_n^\circ - E_p^\circ| \geq \Delta E \quad (۱۱-۳۳)$$

این رابطه، حد بالای قدرمطلق  $\varepsilon_2$  را به دست می‌دهد

$$|\varepsilon_2| \leq \frac{1}{\Delta E} \sum_{p \neq n} \sum_i |(\varphi_p^i | \hat{W} | \varphi_n)|^2 \quad (۳۴-۱۱)$$

که می‌توانیم آن را به صورت زیر بنویسیم

$$\begin{aligned} |\varepsilon_2| &\leq \frac{1}{\Delta E} \sum_{p \neq n} \sum_i \langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_p^i \rangle \langle \varphi_p^i | \hat{W} | \varphi_n \rangle \\ &\leq \frac{1}{\Delta E} \langle \varphi_n | \hat{W} \left[ \sum_{p \neq n} \sum_i |\varphi_p^i \rangle \langle \varphi_p^i| \right] \hat{W} | \varphi_n \rangle \end{aligned} \quad (۳۵-۱۱)$$

اختلاف عملگر داخل کروشه با عملگر همانی، تنها در تصویرگر بر روی حالت  $|\varphi_n\rangle$  است، زیرا پایهٔ حالت‌های نامختل، در رابطهٔ بستاری زیر صدق می‌کند

$$|\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| + \sum_{p \neq n} \sum_i |\varphi_p^i \rangle \langle \varphi_p^i| = 1 \quad (۳۶-۱۱)$$

بنابراین، نامعادلهٔ (۳۵-۱۱) به صورت زیر در می‌آید

$$\begin{aligned} |\varepsilon_2| &\leq \frac{1}{\Delta E} \langle \varphi_n | \hat{W} [1 - |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|] \hat{W} | \varphi_n \rangle \\ &\leq \frac{1}{\Delta E} [\langle \varphi_n | \hat{W}^2 | \varphi_n \rangle - (\langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_n \rangle)^2] \end{aligned} \quad (۳۷-۱۱)$$

با ضرب کردن طرفین (۳۷-۱۱) در  $\lambda^2$ ، یک حد بالا برای جملهٔ مرتبهٔ دوم در بسط  $E_n(\lambda)$  به دست می‌آید

$$|\lambda^2 \varepsilon_2| \leq \frac{1}{\Delta E} (\Delta W)^2 \quad (۳۸-۱۱)$$

که در آن،  $\Delta E$  عبارت است از ریشهٔ میانگین مربعی انحراف اختلال  $W$  در حالت نامختل  $|\varphi_n\rangle$ . این رابطه، مرتبهٔ بزرگی خطای ناشی از احتساب فقط تصحیح مرتبهٔ اول را نشان می‌دهد.

### ۱۱-۳ اختلال یک تراز واگن

حال فرض کنید که تراز  $E_n^\circ$  که می‌خواهیم اختلال آن را بررسی کنیم،  $g_n$  بار واگن باشد (که  $g_n$  بزرگتر از یک ولی متناهی است). ویژه‌زیرفضای متناظر  $H_0$  را با  $\mathcal{E}_n^\circ$  نمایش می‌دهیم. در این مورد، انتخاب

$$\varepsilon_0 = E_n^\circ \quad (39-11)$$

برای تعیین بردار  $|\circ\rangle$  کافی نیست، زیرا از جنبه نظری، معادله (۹-۱۱) می‌تواند توسط هر ترکیب خطی از تعداد  $g_n$  بردار  $|\varphi_n^i\rangle$  ( $i = 1, 2, \dots, g_n$ ) برقرار باشد. ما فقط این را می‌دانیم که  $|\circ\rangle$  به ویژه‌زیرفضای  $\mathcal{E}_n^\circ$  که توسط آنها پدید آمده است، تعلق دارد.

خواهیم دید، که این بار، تحت تأثیر اختلال  $W$ ، انرژی  $E_n^\circ$  عموماً به چند "زیرتراز" متمایز از یکدیگر تفکیک می‌شود. تعداد این زیرترازها،  $(f_n)$ ، بین ۱ و  $g_n$  است. هرگاه  $f_n$  کوچکتر از  $g_n$  باشد، بعضی از این زیرترازها واگن خواهند بود، زیرا تعداد کل ویژه‌بردارهای متعامد  $H$  وابسته به  $f_n$  زیرتراز، همواره برابر با  $g_n$  است. برای محاسبه ویژه‌مقادیر و ویژه‌بردارهای هامیلتونی کل  $H$ ، مطابق معمول مطالعه خود را به مرتبه اول در  $\lambda$  برای انرژیها و به مرتبه صفر برای ویژه‌بردارها محدود خواهیم کرد.

برای تعیین  $\varepsilon_1$  و  $|\circ\rangle$ ، می‌توانیم معادله (۱۱-۱) را روی  $g_n$  بردار پایه  $|\varphi_n^i\rangle$  تصویر کنیم. چون  $|\varphi_n^i\rangle$  ویژه‌بردارهای  $H_0$  با ویژه‌مقدار  $E_n^\circ = \varepsilon_0$  هستند، تعداد  $g_n$  رابطه از نوع زیر به دست می‌آوریم

$$\langle \varphi_n^i | \hat{W} | \circ \rangle = \varepsilon_1 \langle \varphi_n^i | \circ \rangle \quad (40-11)$$

حال، میان عملگر  $\hat{W}$  و بردار  $|\circ\rangle$ ، رابطه بستاری برای پایه  $\{|\varphi_p^i\rangle\}$  را وارد می‌کنیم

$$\sum_p \sum_{i'} \langle \varphi_n^i | \hat{W} | \varphi_p^{i'} \rangle \langle \varphi_p^{i'} | \circ \rangle = \varepsilon_1 \langle \varphi_n^i | \circ \rangle \quad (41-11)$$

بردار  $|\circ\rangle$  که به ویژه‌زیرفضای وابسته به  $E_n^\circ$  تعلق دارد، با کلیه بردارهای پایه  $|\varphi_p^i\rangle$  که برای آنها  $p$  مخالف  $n$  است، متعامد است. در نتیجه، در طرف چپ معادله (۴۱-۱۱)، جمع‌بندی روی شاخص  $p$ ، به یک جمله ( $p = n$ ) تقلیل می‌یابد، و داریم

$$\sum_{i'=1}^{g_n} \langle \varphi_n^i | \hat{W} | \varphi_n^{i'} \rangle \langle \varphi_n^{i'} | \circ \rangle = \varepsilon_1 \langle \varphi_n^i | \circ \rangle \quad (42-11)$$

تعداد  $g_n^2$  عدد  $\langle \varphi_n^i | \hat{W} | \varphi_n^{i'} \rangle$  را (که در آنها،  $n$  ثابت و  $i, i' = 1, 2, \dots, g_n$  است) به صورت یک ماتریس  $g_n \times g_n$  که شاخص سطری آن  $i$  و شاخص ستونی آن  $i'$  است، مرتب می‌کنیم. این ماتریس مربعی، که آن را، به صورت  $(\hat{W}^{(n)})$  نمایش می‌دهیم، اصطلاحاً گفته می‌شود که، از ماتریس معرف  $\hat{W}$  در پایهٔ  $\{|\varphi_n^i\rangle\}$  بریده شده است:  $(\hat{W}^{(n)})$  قسمتی است که مربوط به  $\mathcal{E}_n^0$  است. به این ترتیب، معادلات (۴۲-۱۱) نشان می‌دهند که بردار ستونی با عناصر  $\langle \varphi_n^i | 0 \rangle$  ( $i = 1, 2, \dots, g_n$ ) یک ویژه بردار  $(\hat{W}^{(n)})$  با ویژه مقدار  $\varepsilon_1$  است.

بعلاوه، دستگاه (۴۲-۱۱) را می‌توانیم به یک معادلهٔ برداری در داخل  $\mathcal{E}_n^0$  تبدیل کنیم. آنچه لازم است انجام دهیم این است که عملگر  $\hat{W}^{(n)}$ ، محدودیت  $\hat{W}$  به زیرفضای  $\mathcal{E}_n^0$  را تعریف کنیم.  $\hat{W}^{(n)}$  تنها در  $\mathcal{E}_n^0$  عمل می‌کند، و توسط ماتریسی با عناصر  $\langle \varphi_n^i | \hat{W} | \varphi_n^{i'} \rangle$ ، یعنی توسط  $(\hat{W}^{(n)})$ ، در این زیرفضا نشان داده می‌شود.<sup>۱</sup> بنابراین، دستگاه (۴۲-۱۱) با معادلهٔ برداری زیر معادل است

$$\hat{W}^{(n)}|0\rangle = \varepsilon_1|0\rangle \quad (43-11)$$

[روی این مطلب تأکید می‌کنیم که عملگر  $\hat{W}^{(n)}$ ، که محدودیت  $\hat{W}$  را بیان می‌کند، با  $\hat{W}$  متفاوت است: معادلهٔ (۴۳-۱۱) یک معادله ویژه مقدار در داخل  $\mathcal{E}_n^0$  است و نه در تمام فضا].

بنابراین برای محاسبهٔ ویژه مقدارهای (تا مرتبهٔ اول) و ویژه حالت‌های (تا مرتبهٔ صفر) هامیلتونی مربوط به یک حالت نامختل واگن  $E_n^0$ ، ماتریس  $(W^{(n)})$  را، که معرف اختلال  $W^2$  در داخل ویژه زیرفضای  $\mathcal{E}_n^0$  وابسته به  $E_n^0$  است، قطری می‌کنیم.

حال، اثر مرتبهٔ اول اختلال  $W$  روی حالت واگن  $E_n^0$  را دقیقتر بررسی می‌کنیم. فرض کنید که  $\varepsilon_j^{(1)}$  ( $j = 1, 2, \dots, f_n^{(1)}$ ) ریشه‌های مختلف و متمایز معادلهٔ مشخصهٔ  $(\hat{W}^{(n)})$  باشند. چون  $(\hat{W}^{(n)})$  هرمیتی است، تمام ویژه مقدارهای آن حقیقی‌اند، و مجموع درجات واگنی آنها برابر است با  $(g_n \geq f_n^{(1)})g_n$ . هر ویژه مقدار، یک تصحیح انرژی متفاوت معرفی می‌کند. بنابراین، تراز واگن، تحت تأثیر اختلال  $W = \lambda \hat{W}$ ، تا مرتبهٔ اول، به  $f_n^{(1)}$  زیر تراز متمایز تفکیک می‌شود که انرژی‌های

۱. اگر  $P_n$  تصویرگر بر روی زیرفضای  $\mathcal{E}_n^0$  باشد،  $\hat{W}^{(n)}$  می‌تواند به صورت زیر نوشته شود (مکمل ۲ از فصل ۲، بخش ۳):

$$\hat{W}^{(n)} = P_n \hat{W} P_n$$

۲.  $(W^{(n)})$  برابر است با  $(\lambda \hat{W}^{(n)})$ ؛ به همین علت است که ویژه مقدارهای آن مستقیماً تصحیحات  $\lambda \varepsilon_1$  را می‌دهند.



این زیرترازها را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$E_{n,j}(\lambda) = E_n^0 + \lambda \varepsilon_j^1 \quad j = 1, 2, \dots, f_n^{(1)} \leq g_n \quad (۴۴-۱۱)$$

اگر  $f_n^{(1)} = g_n$  باشد، می‌گوییم که اختلال  $W$ ، تا مرتبه اول، واگنی تراز  $E_n^0$  را کاملاً برطرف می‌کند. چنانچه  $f_n^{(1)} < g_n$  باشد، واگنی، تا مرتبه اول، تنها به طور جزئی برطرف می‌شود (یا اگر  $f_n^{(1)} = 1$  باشد واگنی به هیچ وجه از بین نمی‌رود).

حال، یک ویژه مقدار  $\varepsilon_j^1$  از عملگر  $\hat{W}^{(n)}$  را انتخاب می‌کنیم. اگر این ویژه مقدار ناواگن باشد، ویژه بردار مربوط  $|\circ\rangle$  به طور منحصر به فرد (با تقریب یک ضریب فاز) توسط (۴۳-۱۱) یا با دستگاه معادل آن یعنی (۴۲-۱۱) تعیین می‌شود. بنابراین، یک ویژه مقدار منفرد  $E(\lambda)$  وابسته به  $H(\lambda)$  وجود دارد که، تا مرتبه اول، برابر است با  $E_n^0 + \lambda \varepsilon_j^1$ ، و این ویژه مقدار ناواگن است. <sup>۱</sup> از طرف دیگر، اگر ویژه مقدار  $\varepsilon_j^1$  متناسب به  $\hat{W}^{(n)}$  بار واگن باشد، (۴۳-۱۱) تنها نشان دهنده این است که  $|\circ\rangle$  به زیرفضای  $q$  بعدی مربوط  $\mathcal{F}_j^{(1)}$ ، تعلق دارد.

در واقع، این ویژگی  $\varepsilon_j^1$  می‌تواند منعکس کننده دو وضعیت بسیار متفاوت باشد. می‌توان با ادامه محاسبه اختلال تا مرتبه‌های بالاتر  $\lambda$ ، و مشاهده اینکه آیا واگنیهای باقیمانده برطرف شده است یا خیر، این دو وضعیت را از یکدیگر تمیز داد. این دو وضعیت به شرح زیرند:

۱. فرض کنید که تنها یک انرژی دقیق  $E(\lambda)$  وجود دارد که، تا مرتبه اول، مساوی با  $E_n^0 + \lambda \varepsilon_j^1$ ، و  $q$  بار واگن است. [مثلاً در شکل ۱، انرژی  $E(\lambda)$  که وقتی  $\lambda \rightarrow 0$ ، به سمت  $E_n^0$  میل می‌کند، به ازاء هر مقدار  $\lambda$ ، دوبار واگن است]. در این صورت،  $\lambda$  هر چه باشد، یک زیرفضای  $q$  بعدی به ویژه مقدار  $E(\lambda)$  مربوط می‌شود، به طوری که واگنی ویژه مقدارهای تقریبی، تا هر مرتبه‌ای از  $\lambda$ ، هرگز برطرف نخواهد شد. در این مورد، ویژه بردار مرتبه صفر  $|\circ\rangle$  وابسته به  $H(\lambda)$  نمی‌تواند به طور کامل مشخص شود، زیرا تنها شرط اعمال شده بر  $|\circ\rangle$  این است که به زیرفضایی متعلق باشد که حد ویژه زیرفضای  $q$  بعدی  $H(\lambda)$  مربوط به  $E(\lambda)$ ، به ازاء  $\lambda \rightarrow 0$ ، باشد. این حد چیزی جز ویژه زیرفضای  $\mathcal{F}_j^{(1)}$  مربوط به  $(\hat{W}^{(n)})$  وابسته به ویژه مقدار انتخابی  $\varepsilon_j^1$  نیست.

این مورد اول وقتی به وقوع می‌پیوندد که  $H$  و  $W$  دارای خواص تقارن مشترکی باشند؛ این به معنای یک واگنی اصلی برای  $H(\lambda)$  است. در این صورت، این واگنی تا تمام مرتبه‌ها در نظریه اختلال باقی می‌ماند.

۲. همچنین ممکن است اتفاق بیفتد که چند انرژی متفاوت  $E(\lambda)$ ، تا مرتبه اول، برابر با  $E_n^0 + \lambda \varepsilon_j^1$  باشند (در این صورت اختلاف بین این انرژیها در محاسبات مرتبه دوم یا بالاتر ظاهر می‌شود). در این مورد،

۱. دلیل این نکته مشابه دلیلی است که نشان می‌دهد یک تراز ناواگن  $H$  منجر به یک تراز ناواگن  $H(\lambda)$  می‌شود

زیرفضای  $\mathcal{F}_j^{(1)}$  که تا مرتبه اول به دست می‌آید، فقط با مجموع مستقیم حدهای چندین ویژه زیرفضای وابسته به این انرژیهای متفاوت  $E(\lambda)$ ، به‌ازاء  $\lambda \rightarrow 0$  برابر است. به عبارت دیگر، کلیه ویژه بردارهای  $H(\lambda)$  مربوط به این انرژیها، مسلماً به سمت کتهای متعلق به  $\mathcal{F}_j^{(1)}$  میل می‌کند، اما برعکس، یک کت خاص از  $\mathcal{F}_j^{(1)}$ ، لزوماً حد  $|0\rangle$  یک ویژه‌کت متعلق به  $H(\lambda)$  نخواهد بود.

در این وضعیت، ادامه تا جملات مرتبه‌های بالاتر، نه تنها دقت انرژیها را بیشتر می‌کند، بلکه کتهای مرتبه صفر  $|0\rangle$  را نیز تعیین می‌کند. لیکن، در عمل، اطلاعات جزئی موجود در معادله (۱۱-۴۳) کافی به نظر می‌رسد.

### یادداشتها:

۱. وقتی روش اختلال را برای بررسی تمام انرژیهای طیف  $H$  به کار می‌بریم، باید اختلال  $W$  را در داخل هر یک از ویژه زیرفضاهای  $\mathcal{E}_n^0$  مربوط به این انرژیها قطری کنیم. باید در نظر داشت که این مسئله از مسئله اولیه قطری کردن کامل هامیلتونی در تمامی فضای حالت، بسیار ساده تر است. نظریه اختلال، ما را قادر می‌سازد تا از عناصر ماتریسی  $W$  میان بردارهای متعلق به زیرفضاهای متفاوت  $\mathcal{E}_n^0$ ، به طور کامل صرف نظر کنیم. بنابراین، به جای اینکه مجبور باشیم یک ماتریس عموماً نامتناهی را قطری کنیم، فقط برای هر یک از انرژیهای  $E_n^0$  مورد نظرمان، یک ماتریس با ابعاد کوچکتر را، که عموماً متناهی است، قطری می‌کنیم.

۲. واضح است که ماتریس  $(\bar{W}^{(n)})$  به پایه  $\{|\varphi_n^i\rangle\}$  که ابتدا در این زیرفضای  $\mathcal{E}_n^0$  انتخاب شده است بستگی دارد (هر چند مسلم است که ویژه مقادارها و ویژه کتهای  $\bar{W}^{(n)}$  به آن بستگی ندارند). بنابراین، قبل از شروع به محاسبه اختلال، بهتر است پایه‌ای را پیدا کنیم که تا حد ممکن شکل  $(W^{(n)})$  را برای این زیرفضا، و در نتیجه، یافتن ویژه مقادارها و ویژه بردارهای آن را ساده تر کند (مسلماً، ساده ترین وضعیت آن است که این ماتریس مستقیماً به صورت قطری به دست بیاید). برای یافتن چنین پایه‌ای، اغلب از مشاهده پذیرهایی استفاده می‌کنیم که هم با  $H_0$  و هم با  $W$  جابه‌جا می‌شوند.<sup>۲</sup> فرض کنید، مشاهده پذیر  $A$  با  $H_0$  و  $W$  جابه‌جا شود. چون  $H_0$  و  $A$  جابه‌جا می‌شوند، می‌توانیم ویژه حالت‌های مشترک  $H_0$  و  $A$  را به عنوان بردارهای پایه  $|\varphi_n^i\rangle$  انتخاب کنیم. به علاوه، چون  $W$  با  $A$  جابه‌جا می‌شود، عناصر ماتریسی آن بین ویژه بردارهای  $A$  که وابسته به ویژه مقادارهای متفاوتی باشند، صفر است، در این صورت، ماتریس  $(W^{(n)})$  شامل صفرهای متعددی است که قطری کردن آن را ساده می‌کند.

۳. درست مانند ترازهای ناواگن (یادداشت ۲-۱-ب)، روش مشروحه در این بخش، تنها زمانی

۱. اختلال یک حالت ناواگن، که در بخش ۲-۱۱ بررسی شد، می‌تواند به عنوان یک مورد خاص از یک حالت واگن در نظر گرفته شود.

۲. یادآور می‌شویم که این بدان معنی نیست که  $H_0$  و  $W$  جابه‌جا می‌شوند.

معتبر است که عناصر ماتریسی اختلال  $W$  از اختلافهای بین انرژی تراز مورد مطالعه و سایر ترازها، بسیار کوچکتر باشند (اگر تصحیحات مرتبه بالاتر را محاسبه کرده بودیم، این استنتاج بدیهی می‌بود. با این حال، ممکن است که این روش را به مورد یک گروه تراز ناواگن خیلی نزدیک به هم، (و در عین حال متمایز از یکدیگر) که از سایر ترازهای سیستم مورد بررسی بسیار دورند، تعمیم داد. مسلماً، این بدان معنی است که عناصر ماتریسی اختلال  $W$  از همان مرتبه بزرگی اختلاف انرژیهای داخل گروه‌اند، ولی در مقایسه با فاصله جدایی بین یک تراز داخل گروه و یک تراز خارج گروه، قابل اغماض‌اند. به این ترتیب، می‌توانیم تأثیر اختلال  $W$  را با قطری کردن ماتریس معرف  $H = H_0 + W$  در داخل این گروه ترازها، به‌طور تقریبی تعیین کنیم. با اتکاء به این نوع تقریب است که می‌توانیم، در بعضی موارد، بررسی یک مسئله فیزیکی را به مطالعه یک سیستم دوترازی، مانند آنچه که در فصل ۴ (بخش ۳-۴) دیدیم، تقلیل دهیم. ■

### مراجع برای مطالعه بیشتر

برای سایر روشهای اختلال نگاه کنید به سری بریلون-ویگنر (بسطی که برای همه ساده است اما شامل انرژیهای اختلالی در مخرجهای انرژی است)؛ زیمان (۲-۲۶)، بخش ۳-۱. روش تفکیکی (یک روش عملگری که برای محاسبات تصحیحات مرتبه بالاتر تناسب است)؛ مسیا (۱-۱۷)، فصل XVI، بخش III؛ رومن (۲-۳)، بخش ۵-۴، روش دالگرانو ولویس (که جایگزین جمع‌بندی روی حالتها با استفاده از معادله‌های دیفرانسیل می‌شود)؛ برویش (۱-۷)، بخش ۱۴-۵؛ شیف (۱-۱۸)، فصل ۸، بخش ۳۳. مراجع اصلی: (۲-۳۴)، (۲-۳۵)، (۲-۳۶).

For other perturbation methods, see, for example:

Brillouin-Wigner series (an expansion which is simple for all orders but which involves the perturbed energies in the energy denominators):

Ziman (2.26). §3.1.

The resolvent method (an operator method which is well suited to the calculation of higher-order corrections): Messiah (1.17), chap. XVI, §III; Roman (2.3), §4-5-d.

Method of Dalgarno and Lewis (which replaces the summations over the intermediate states by differential equations): Borowitz (1.17), §14-5; Schiff (1.18), chap. 8, §33. Original references: (2.34), (2.35), (2.36).

The W. K. B. method, applicable to quasi-classical situations: Landau

and Lifshitz (1.19), chap. 7; Messiah (1.17), chap. VI, §II; Merzbacher (1.16), chap. VII; Schiff (1.18), § 34; Borowitz (1.17), chaps. 8 and 9. The Hartree and Hartree-Fock methods: Messiah (1.17), chap. XVIII, §II; Slater (1.8), chap. 8 and 9 (Hartree) and 17 (Hartree-Fock); Bethe and Jackiw (1.21), chap. 4. See also references of complement A<sub>XIV</sub> .

۱. یک نوسانگر هماهنگ یک بعدی در یک

پتانسیل اختلال  $x, x^2, x^3$

۱، ۲، ۳، ۴. نمایشهایی از نظریه اختلال مانا با استفاده از مثالهای ساده و مهم.

۱. مطالعه یک نوسانگر هماهنگ یک بعدی که توسط پتانسیلی به شکل  $x, x^2, x^3$  مختل شده است. برای نخستین مطالعه، توصیه می شود. آخرین مثال (پتانسیل مختل  $x^3$ )، مطالعه ناهماهنگی در ارتعاش یک مولکول دواتمی را ممکن می سازد (شکل ساده شده این مدل در مکمل ۱ از فصل ۵ ارائه شده است).

۲. برهم کنش دو قطبهای مغناطیسی دو ذره

با اسپینهای  $1/2$

۲. می توان این مسئله را به عنوان یک مثال حل شده، که نشانگر نظریه اختلال برای حالت های ناواگن و واگن است، تلقی کرد. خواننده را با برهم کنش دو قطبی-دو قطبی بین گشتاورهای مغناطیسی دو ذره با اسپینهای  $1/2$ ، آشنا می سازد. آسان است.

۳. نیروهای وان دروالس

۳. مطالعه نیروهای بلندبرد میان دو اتم خنثی با استفاده از نظریه اختلال (نیروهای وان دروالس). تأکید بر روی تعبیر فیزیکی نتایج است. این مکمل کمی از دو مکمل قبلی مشکلتر است و می توان آن را برای مطالعات بعدی کنار گذاشت.

۴. اثر حجمی: تأثیر گسترش فضایی هسته بر

ترازهای اتمی

۴. مطالعه تأثیر حجم هسته ای بر ترازهای انرژی اتمی هیدروژن مانند. ساده است، و می توان آن را به عنوان ادامه مکمل ۱ از فصل ۷ در نظر گرفت.

۵. روش وردشی

۵. ارائه روش تقریبی دیگری به نام، روش وردشی مهم است، زیرا کاربردهای روش وردشی بی شمارند.

۶. نوارهای انرژی الکترونها در جامدات: یک

مدل ساده

۶، ۷. دو کاربرد مهم از روش وردشی،  
 ۶. با استفاده از تقریب پیوند قوی، مفهوم یک  
 نوار انرژی مجاز برای الکترونها یک جامد را  
 معرفی می‌کند. این مطلب به خاطر کاربردهای  
 بی‌شمارش، اساسی است. نسبتاً مشکل است.  
 تکیه بر تعبیر نتایج است. دیدگاه پذیرفته شده در  
 اینجا با دیدگاه مکمل ۱۵ از فصل ۳، فرق دارد  
 و کمی ساده‌تر است.

۷. یک نمونهٔ ساده از پیوند شیمیایی: یون

$H_2^+$

۷. پدیدهٔ پیوند شیمیایی را برای ساده‌ترین مورد  
 ممکن، یعنی مولکول (یونیده)  $H_2^+$ ، بررسی  
 می‌کند. نشان می‌دهد که چگونه مکانیک  
 کوانتومی، نیروهای جاذبه بین دو اتم را که  
 تابع موجها(ی) آنها روی هم می‌افتند، تشریح  
 می‌کند. شامل یک اثبات از قضیهٔ ویریال است.  
 از نقطه نظر شیمی-فیزیک اساسی است. نسبتاً  
 مشکل است.

۸. تمرینات

# مکمل ۱

یک نوسانگر هماهنگ یک بعدی در یک پتانسیل اختلال  $x$ ،  $x^2$ ،  $x^3$

۱. اختلال توسط یک پتانسیل خطی

الف) حل دقیق

ب) بسط اختلال

۲. اختلال توسط یک پتانسیل مربعی

۳. اختلال توسط یک پتانسیل به صورت  $x^2$

الف) نوسانگر ناهماهنگ

ب) بسط اختلال

ج) کاربرد: ناهماهنگی ارتعاشات یک مولکول دواتمی

برای اینکه بررسیهای عمومی فصل ۱۱ را با یک مثال ساده نشان دهیم، از نظریه اختلال مانا برای مطالعه اثر یک پتانسیل اختلال  $x$ ،  $x^2$  یا  $x^3$  بر ترازهای انرژی یک نوسانگر هماهنگ یک بعدی (که هیچ یک از ترازهای آن واگن نیست، فصل ۵) استفاده خواهیم کرد.

دو مورد اول (پتانسیل اختلال  $x$  و  $x^2$ ) دقیقاً قابل حل اند. در نتیجه، می توانیم در این دو مثال ثابت کنیم که بسط اختلال، بر بسط محدود حل دقیق، نسبت به پارامتر مشخص کننده قدرت اختلال، منطبق است. مورد آخر (پتانسیل اختلال  $x^3$ )، به دلیل زیر، در عمل بسیار حائز اهمیت است. یک پتانسیل  $V(x)$  را که در  $x = 0$  دارای یک مینیموم است، در نظر بگیرید. با تقریب اول،  $V(x)$  را می توان با اولین جمله (متناسب با  $x^2$ ) از بسط رشته تیلور آن جایگزین کرد، که در این صورت یک نوسانگر هماهنگ را، که دقیقاً قابل حل است، در نظر گرفته ایم. به این ترتیب، جمله بعدی از بسط  $V(x)$ ، که متناسب با  $x^3$  است، اولین تصحیح این تقریب است. در نتیجه، هرگاه بخواهیم ناهماهنگی ارتعاشات یک سیستم فیزیکی را مطالعه کنیم، محاسبه اثر جمله  $x^3$  ضروری است. این کار، به ما امکان می دهد که، به عنوان مثال، انحرافات طیف ارتعاشی مولکولهای دواتمی را از پیش بینیهای مدل (کاملاً هماهنگ) مکمل ۱ از فصل ۵ تعیین کنیم.

۱. اختلال توسط یک پتانسیل خطی

نمادگذاری فصل ۵ را در اینجا مورد استفاده قرار خواهیم داد. فرض کنید

$$H_0 = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 \quad (1)$$

هامیلتونی یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی با ویژه‌بردارهای  $|\varphi\rangle$  و ویژه‌مقدارهای زیر است<sup>۱</sup>

$$E_n^0 = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (2)$$

به‌این هامیلتونی، اختلال زیر را می‌افزاییم

$$W = \lambda\hbar\omega\hat{X} \quad (3)$$

که در آن  $\lambda$  یک ثابت حقیقی بدون بعد و خیلی کوچکتر از ۱ است، و  $\hat{X}$  توسط فرمول (B-۱) از فصل ۵ داده می‌شود (چون  $\hat{X}$  از مرتبه ۱ است،  $\hbar\omega\hat{X}$  از مرتبه  $H_0$  است و نقش عملگر  $\hat{W}$  در فصل ۱۱ را ایفا می‌کند). مسئله، عبارت است از یافتن ویژه‌حالت‌های  $|\psi_n\rangle$  و ویژه‌مقدارهای  $E_n$  مربوط به هامیلتونی

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

### الف) حل دقیق

قبلاً نمونه‌ای از یک اختلال خطی نسبت به  $X$  را بررسی کردیم: وقتی نوسانگر را، که فرض می‌شود باردار است، در یک میدان الکتریکی یکنواخت  $\mathcal{E}$  قرار بدهیم، باید به  $H_0$ ، هامیلتونی الکتروستاتیک زیر را بیفزاییم

$$W = -q\mathcal{E}X = -q\mathcal{E}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\hat{X} \quad (5)$$

که در آن،  $q$  بار نوسانگر است. اثر چنین جمله‌ای در حالت‌های مانای نوسانگر هماهنگ، به‌طور دقیق در مکمل ۶ از فصل ۵ بررسی شده است. بنابراین با جایگذاری

$$\lambda\hbar\omega \leftrightarrow -q\mathcal{E}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (6)$$

۱. برای اینکه مشخص کنیم هامیلتونی، نامختل مورد نظر ماست، مانند فصل ۱۱، یک شاخص ۰ به ویژه‌مقدار  $H_0$  اضافه می‌کنیم.



می‌توان نتایج مکمل یادشده را برای تعیین ویژه‌حالتها و ویژه‌مقدارهای هامیلتونی  $H$ ، رابطه (۴)، به‌کار برد. به‌این ترتیب از رابطه (۳۹) مکمل ۶ از فصل ۵ بلافاصله خواهیم داشت

$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega - \frac{\lambda^2}{4} \hbar\omega \quad (7)$$

همچنین، از رابطه (۴۰) مکمل ۶ از فصل ۵ ملاحظه می‌کنیم که (بعد از جایگزینی  $P$  برحسب عملگرهای آفرینش و نابودی  $a$  و  $a^\dagger$ )

$$|\psi_n\rangle = e^{-\lambda/\sqrt{2}(a^\dagger - a)} |\varphi_n\rangle \quad (8)$$

آنگاه، با بسط محدود تابع نمایی داریم

$$\begin{aligned} |\psi_n\rangle &= \left[ 1 - \frac{\lambda}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a) + \dots \right] |\varphi_n\rangle \\ &= |\varphi_n\rangle - \lambda \sqrt{\frac{n+1}{2}} |\varphi_{n+1}\rangle + \lambda \sqrt{\frac{n}{2}} |\varphi_{n-1}\rangle + \dots \end{aligned} \quad (9)$$

ب) بسط اختلال

در (۳)،  $\hat{X}$  را با  $1/\sqrt{2}(a^\dagger + a)$  جایگزین می‌کنیم [فرمول (B-۷-۹) از فصل ۵]. داریم

$$W = \lambda \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} (a^\dagger + a) \quad (10)$$

در این صورت،  $W$  حالت  $|\varphi_n\rangle$  را فقط با دو حالت  $|\varphi_{n+1}\rangle$  و  $|\varphi_{n-1}\rangle$  مخلوط می‌کند. در نتیجه، تنها عناصر ماتریسی غیرصفر  $W$  عبارت‌اند از

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{n+1} | W | \varphi_n \rangle &= \lambda \sqrt{\frac{n+1}{2}} \hbar\omega \\ \langle \varphi_{n-1} | W | \varphi_n \rangle &= \lambda \sqrt{\frac{n}{2}} \hbar\omega \end{aligned} \quad (11)$$

طبق رابطه کلی (۳۲-۱۱) از فصل ۱۱، داریم

$$E_n = E_n^0 + \langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle + \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle \varphi_{n'} | W | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^0 - E_{n'}^0} + \dots \quad (12)$$

با قرار دادن (۱۱) در (۱۲) و جایگزین کردن  $(E_n^0 - E_{n'}^0)$  توسط  $(n - n')\hbar\omega$  داریم

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^0 + 0 - \frac{\lambda^2(n+1)}{2} \hbar\omega + \frac{\lambda^2 n}{2} \hbar\omega + \dots \\ &= \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega - \frac{\lambda^2}{2} \hbar\omega + \dots \end{aligned} \quad (13)$$

این رابطه نشان می‌دهد که بسط اختلال ویژه مقدار تا مرتبه دوم نسبت به  $\lambda$ ، بر جواب دقیق (۷) منطبق است.<sup>۱</sup>

همچنین، فرمول کلی (۱۱-۲۸) از فصل ۱۱

$$|\psi_n\rangle = |\varphi_n\rangle + \sum_{n' \neq n} \frac{\langle \varphi_{n'} | W | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_{n'}^0} |\varphi_{n'}\rangle + \dots \quad (14)$$

در اینجا تبدیل می‌شود به

$$|\psi_n\rangle = |\varphi_n\rangle - \lambda \sqrt{\frac{n+1}{2}} |\varphi_{n+1}\rangle + \lambda \sqrt{\frac{n}{2}} |\varphi_{n-1}\rangle + \dots \quad (15)$$

که با جواب دقیق، رابطه (۹) یکسان است.

## ۲. اختلال توسط یک پتانسیل مربعی

اینک فرض می‌کنیم  $W$  به شکل زیر باشد

$$W = \frac{1}{2} \rho \hbar\omega \hat{X}^2 = \frac{1}{2} \rho m \omega^2 X^2 \quad (16)$$

که در آن  $\rho$  یک پارامتر حقیقی بدون بعد و بسیار کوچکتر از ۱ است. در این صورت  $H$  را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$H = H_0 + W + \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 (1 + \rho) X^2 \quad (17)$$

در این مورد، اثر اختلال این است که ثابت فنر نوسانگر هماهنگ را عوض می‌کند. اگر قرار دهیم

$$\omega'^2 = \omega^2 (1 + \rho) \quad (18)$$

۱. می‌توان نشان داد که تمام جملات مرتبه‌های بالاتر از ۲ در بسط اختلال صفرند.

یک نوسانگر هماهنگ یک بعدی در یک پتانسیل اختلال  $x, x^2, x^3$  ۲۷۹

ملاحظه می‌کنیم که  $H$  هنوز هم هامیلتونی نوسانگر هماهنگی است که بسامد زاویه‌ای آن به  $\omega'$  تبدیل شده است.

در این بخش، مطالعه خود را به بررسی ویژه مقادیرهای  $H$  محدود خواهیم ساخت. بر طبق (۱۷) و (۱۸)، این ویژه مقادیرها را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$E_n = \left(n + \frac{1}{4}\right) \hbar \omega' = \left(n + \frac{1}{4}\right) \hbar \omega \sqrt{1 + \rho} \quad (19)$$

که با بسط رادیکال، خواهیم داشت

$$E_n = \left(n + \frac{1}{4}\right) \hbar \omega \left[1 + \frac{\rho}{2} - \frac{\rho^2}{8} + \dots\right] \quad (20)$$

حال، نتیجه (۲۰) را با استفاده از نظریه اختلال مانا به دست می‌آوریم. رابطه (۱۶) را به صورت زیر نیز می‌توان نوشت

$$\begin{aligned} W &= \frac{1}{4} \rho \hbar \omega (a^\dagger + a)^2 = \frac{1}{4} \rho \hbar \omega (a^{\dagger 2} + a^2 + a a^\dagger + a^\dagger a) \\ &= \frac{1}{4} \rho \hbar \omega [a^{\dagger 2} + a^2 + 2a^\dagger a + 1] \end{aligned} \quad (21)$$

از این رابطه می‌توان دید که تنها عناصر ماتریسی غیر صفر  $W$ ، وابسته به  $|\varphi_n\rangle$ ، عبارت‌اند از

$$\begin{aligned} \langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle &= \frac{1}{4} \rho \left(n + \frac{1}{4}\right) \hbar \omega \\ \langle \varphi_{n+2} | W | \varphi_n \rangle &= \frac{1}{4} \rho [(n+1)(n+2)]^{1/2} \hbar \omega \\ \langle \varphi_{n-2} | W | \varphi_n \rangle &= \frac{1}{4} \rho [n(n-1)]^{1/2} \hbar \omega \end{aligned} \quad (22)$$

وقتی از این نتیجه برای تعیین جملات مختلف (۱۲) استفاده کنیم، خواهیم داشت

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^0 + \frac{\rho}{4} \left(n + \frac{1}{4}\right) \hbar \omega - \frac{\rho^2}{16} (n+1)(n+2) \frac{\hbar \omega}{2} + \frac{\rho^2}{16} n(n-1) \frac{\hbar \omega}{2} + \dots \\ &= E_n^0 + \left(n + \frac{1}{4}\right) \hbar \omega \frac{\rho}{4} - \left(n + \frac{1}{4}\right) \hbar \omega \frac{\rho^2}{8} + \dots \end{aligned}$$

$$= \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \left[1 + \frac{\rho}{2} - \frac{\rho^2}{8} + \dots\right] \quad (23)$$

که در واقع بر بسط (۲۰) منطبق است.

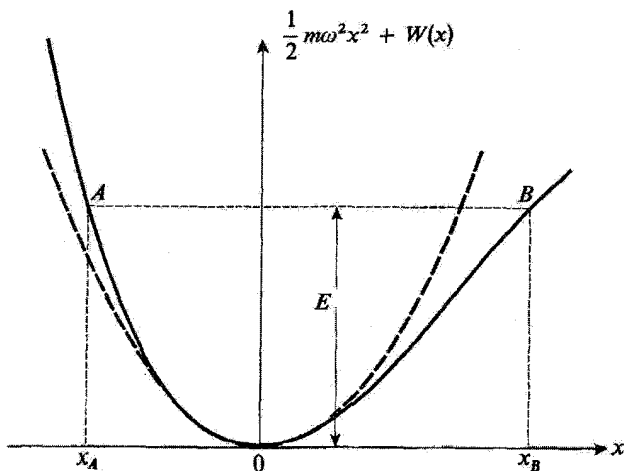
۳. اختلال توسط یک پتانسیل به صورت  $x^2$  حال به هامیلتونی  $H_0$  اختلال زیر را می‌افزاییم

$$W = \sigma \hbar \omega \hat{X}^2 \quad (24)$$

که در آن،  $\sigma$  یک عدد حقیقی بدون بعد و خیلی کوچکتر از ۱ است.

الف) نوسانگر ناهماهنگ

شکل ۱، منحنی تغییرات پتانسیل کل  $\frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + W(x)$  را، که ذره در آن حرکت می‌کند، نسبت به  $x$  نشان می‌دهد. منحنی خط‌چین، پتانسیل سهمی شکل  $\frac{1}{2}m\omega^2 x^2$  ی مربوط به



شکل ۱ تغییر پتانسیل وابسته به یک نوسانگر ناهماهنگ نسبت به  $x$ . اختلاف بین پتانسیل واقعی (خط‌پر) و پتانسیل هماهنگ (خط‌چین) مربوط به هامیلتونی نامختل را به‌عنوان یک اختلال در نظر می‌گیریم  $x_A$  و  $x_B$  عبارت‌اند از حدهای حرکت کلاسیک با انرژی  $E$ .

نوسانگر هماهنگ "نامختل" را می دهد.  $\sigma < 0$  انتخاب شده است، بنابراین، پتانسیل کل (منحنی خطی در شکل) به ازاء  $x > 0$ ، کندتر از  $x < 0$  افزایش می یابد.

وقتی این مسئله را در مکانیک کلاسیک بررسی کنیم، ملاحظه می کنیم که این ذره با انرژی کل  $E$  بین دو نقطه  $x_A$  و  $x_B$  (شکل ۱)، که دیگر نسبت به  $O$  متقارن نیستند، نوسان می کند. این حرکت، هر چند تناوبی باقی می ماند، ولی دیگر سینوسی نیست: در بسط رشته فوریه  $x(t)$  هماهنگهای گوناگونی از بسامد اصلی ظاهر می شوند. به همین دلیل است که چنین سیستمی را "نوسانگر ناهماهنگ" می نامیم. (حرکت آن دیگر هماهنگ نیست). بالاخره، متذکر می شویم که برخلاف نوسانگر هماهنگ، تناوب حرکت، دیگر مستقل از انرژی  $E$  نیست.

### ب) بسط اختلال

۱. عناصر ماتریسی اختلال  $W$  در رابطه (۲۴)،  $\hat{X}$  را توسط  $1/\sqrt{2}(a^\dagger + a)$  جایگزین می کنیم. با استفاده از روابط (B-۹) و (B-۱۷) فصل ۵، پس از یک محاسبه ساده، به دست می آوریم

$$W = \frac{\sigma \hbar \omega}{2^{3/2}} [a^{\dagger 3} + a^3 + 3Na^\dagger + 3(N+1)a] \quad (25)$$

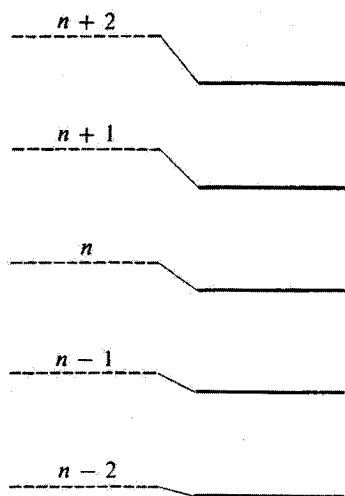
که  $N = a^\dagger a$  در فصل ۵ [فرمول (B-۱۳)] تعریف شده است.

از این رابطه، می توان تنها عناصر ماتریسی غیر صفری  $W$  وابسته به  $|\varphi_n\rangle$  را استخراج کرد

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{n+2} | W | \varphi_n \rangle &= \sigma \left[ \frac{(n+3)(n+2)(n+1)}{8} \right]^{1/2} \hbar \omega \\ \langle \varphi_{n-2} | W | \varphi_n \rangle &= \sigma \left[ \frac{n(n-1)(n-2)}{8} \right]^{1/2} \hbar \omega \\ \langle \varphi_{n+1} | W | \varphi_n \rangle &= 3\sigma \left( \frac{n+1}{2} \right)^{2/2} \hbar \omega \\ \langle \varphi_{n-1} | W | \varphi_n \rangle &= 3\sigma \left( \frac{n}{2} \right)^{2/2} \hbar \omega \end{aligned} \quad (26)$$

### ۲. محاسبه انرژیها

نتایج (۲۶) را در بسط اختلال  $E_n$  (فرمول ۱۲) قرار می دهیم. چون عنصر قطری  $W$  صفر است، تصحیح مرتبه اول وجود ندارد. با این همه، چهار عنصر ماتریسی (۲۶) در تصحیح مرتبه دوم وارد می شوند. بنابراین، با یک محاسبه ساده داریم



شکل ۲ ترازهای انرژی  $H_0$  (خط چینها) و  $H$  (خطوط پر)، تحت تأثیر اختلال  $W$ ، هر تراز از  $H_0$  پایینتر رفته و هر چه  $n$  بزرگتر باشد این انتقال بیشتر است.

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega - \frac{15}{4} \sigma^2 \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \hbar\omega - \frac{7}{16} \sigma^4 \hbar\omega + \dots \quad (27)$$

بنابراین، اثر  $W$  این است که ترازها را پایینتر بیاورد (علامت  $\sigma$  هر چه باشد). هر چه  $n$  بزرگتر باشد، این انتقال بیشتر است (شکل ۲). اختلاف بین دو تراز مجاور برابر است با

$$E_n - E_{n-1} = \hbar\omega \left[ 1 - \frac{15}{2} \sigma^2 n \right] \quad (28)$$

که برخلاف مورد نوسانگر هماهنگ، مستقل از  $n$  نیست. ترازهای انرژی دیگر هم فاصله نیستند و با افزایش  $n$  به یکدیگر نزدیکتر می‌شوند.

۳. محاسبه ویژه حالتها

با قرار دادن روابط (۲۶) در بسط (۱۴) به سادگی خواهیم داشت

$$\begin{aligned}
 |\psi_n\rangle = & |\varphi_n\rangle - 3\sigma \left(\frac{n+1}{2}\right)^{3/2} |\varphi_{n+1}\rangle + 3\sigma \left(\frac{n}{2}\right)^{3/2} |\varphi_{n-1}\rangle \\
 & - \frac{\sigma}{3} \left[\frac{(n+3)(n+2)(n+1)}{8}\right]^{1/2} |\varphi_{n+3}\rangle \\
 & + \frac{\sigma}{3} \left[\frac{n(n-1)(n-2)}{8}\right]^{1/2} |\varphi_{n-3}\rangle + \dots \quad (29)
 \end{aligned}$$

بنابراین، تحت تأثیر اختلال  $W$ ، حالت  $|\varphi_n\rangle$  با حالت‌های  $|\varphi_{n+1}\rangle, |\varphi_{n-1}\rangle, |\varphi_{n+3}\rangle$  و  $|\varphi_{n-3}\rangle$  مخلوط می‌شود.

### ج) کاربرد: ناهماهنگی ارتعاشات یک مولکول دو اتمی

در مکمل ۱ از فصل ۵ نشان دادیم که یک مولکول دو اتمی غیر قطبی می‌تواند امواج الکترومغناطیسی ای را جذب یا گسیل کند که بسامد آنها بر بسامد ارتعاشی هسته‌های مولکول، حول موضع تعادلیشان، منطبق است. اگر جابه‌جایی  $(r - r_e)$  دو هسته از موضع تعادلیشان (یعنی  $r_e$ ) را به  $x$  نمایش بدهیم، گشتاور دوقطبی الکتریکی مولکول را می‌توانیم به صورت زیر بنویسیم

$$D(x) = d_0 + d_1 x + \dots \quad (30)$$

بنابراین، بسامدهای ارتعاشی این دوقطبی عبارت‌اند از بسامدهای بور که می‌توانند در عبارت  $\langle x \rangle(t)$  ظاهر شوند. برای یک نوسانگر هماهنگ، قواعد گزینشی که  $X$  در آنها صدق می‌کند طوری هستند که تنها یک بسامد بور می‌تواند ظاهر شود، و آن بسامد  $\omega/2\pi$  است (مکمل ۱ از فصل ۵).

وقتی اختلال  $W$  را به حساب بیاوریم، حالت‌های  $|\varphi_n\rangle$  نوسانگر، "مخلوط" می‌شوند [رابطه (۲۹)]، و  $X$  می‌تواند حالت‌های  $|\psi_n\rangle$  و  $|\psi_{n'}\rangle$  را، که در آن  $n' - n \neq \pm 1$  است، به هم متصل کند: بنابراین بسامدهای جدیدی می‌تواند توسط مولکول جذب یا گسیل شوند.

برای تجزیه و تحلیل دقیق‌تر این پدیده، فرض خواهیم کرد که مولکول ابتدا در حالت پایه ارتعاشی  $|\psi_0\rangle$  خود باشد (عملاً در دماهای معمولی  $T$  همواره این چنین است، زیرا، عموماً،  $\hbar\omega \gg kT$  است). با استفاده از رابطه (۲۹) می‌توانیم عناصر ماتریس  $\hat{X}$  بین حالت  $|\psi_0\rangle$  و حالت دلخواه  $|\psi_n\rangle$  را تا تقریب مرتبه اول نسبت به  $\sigma$  محاسبه کنیم.<sup>۱</sup> یک محاسبه ساده، عناصر ماتریسی زیر

۱. صحیح نخواهد بود که جملات مرتبه بالاتر از ۱ را در محاسبه نگاه داریم، زیرا رابطه (۲۹) تنها تا مرتبه اول نسبت به  $\sigma$  معتبر است.

را به دست می دهد (سایر عناصر تا مرتبه اول نسبت به  $\sigma$  صفرند)

$$\langle \psi_1 | \hat{X} | \psi_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (\text{الف } ۳۱)$$

$$\langle \psi_2 | \hat{X} | \psi_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sigma \quad (\text{ب } ۳۱)$$

$$\langle \psi_0 | \hat{X} | \psi_0 \rangle = -\frac{3}{4} \sigma \quad (\text{ج } ۳۱)$$

از این مطلب، می توانیم بسامدهای انتقالی قابل مشاهده در طیف جذبی حالت پایه را پیدا کنیم. طبیعتاً بسامد

$$\nu_1 = \frac{E_1 - E_0}{h} \quad (\text{الف } ۳۲)$$

را به دست می آوریم که دارای بیشترین شدت است، زیرا بنابر (الف ۳۱)،  $\langle \psi_1 | \hat{X} | \psi_0 \rangle$  نسبت به  $\sigma$  از مرتبه صفر است. سپس، بسامد

$$\nu_2 = \frac{E_2 - E_0}{h} \quad (\text{ب } ۳۲)$$

با شدت خیلی ضعیفتر به دست می آید [فرمول (ب ۳۱)]، که اغلب اوقات، هماهنگ ۲ نامیده می شود (هر چند دقیقاً دو برابر  $\nu_1$  نیست).

یادداشت:

نتیجه (ج ۳۱) به این معنی است که مقدار متوسط  $\hat{X}$  در حالت پایه صفر نیست. این مطلب به سادگی از شکل ۱ فهمیده می شود، زیرا حرکت نوسانی دیگر نسبت به  $O$  متقارن نیست. اگر  $\sigma$  منفی باشد (حالتی که در شکل ۱ نشان داده شده است)، نوسانگر، در ناحیه  $x > 0$  زمان بیشتری نسبت به ناحیه  $x < 0$  می گذراند، و در نتیجه، مقدار متوسط  $X$  باید مثبت باشد. بنابراین علامت ظاهر شده در (ج ۳۱) برای ما قابل فهم است. ■

به این ترتیب، محاسبه قبلی تنها یک خط جدید در طیف جذبی آشکار می سازد. در واقع می توان با احتساب جملات مرتبه های بالاتر از بسط (۳۰)ی گشتاور دوقطبی  $D(x)$ ، و همچنین جملات مرتبه  $x^4$ ،  $x^5$ ، و ... در بسط پتانسیل در مجاورت  $x = 0$ ، محاسبه اختلال را تا مرتبه های



بالاتر نسبت به  $\sigma$  ادامه داد. در این صورت ملاحظه می شود که تمام بسامدهای

$$\nu_n = \frac{E_n - E_0}{h} \quad (۳۳)$$

با  $n = 3, 4, 5, \dots$  (با شدتهایی که سریعاً با  $n$  کاهش می یابند)، در طیف جذبی مولکول ظاهر می شوند. سرانجام، این رابطه، برای این طیف، نمودار شکل ۳ را خواهد داد. این همان چیزی است که در واقع مشاهده شده است. توجه کنید که خطوط طیفی مختلف شکل ۳ هم فاصله نیستند، زیرا بنابر فرمول (۲۸)

$$\nu_1 - \nu_0 = \frac{E_1 - E_0}{h} = \frac{\omega}{2\pi} \left( 1 - \frac{15}{4}\sigma^2 \right) \quad (۳۴)$$

$$\nu_2 - \nu_1 = \frac{E_2 - E_1}{h} = \frac{\omega}{2\pi} \left( 1 - 15\sigma^2 \right) \quad (۳۵)$$

$$\nu_3 - \nu_2 = \frac{E_3 - E_2}{h} = \frac{\omega}{2\pi} \left( 1 - \frac{45}{2}\sigma^2 \right) \quad (۳۶)$$

که از آنها رابطه زیر به دست می آید

$$(\nu_2 - \nu_1) - \nu_1 = (\nu_3 - \nu_2) - (\nu_2 - \nu_1) = -\frac{15\omega}{4\pi}\sigma^2 \quad (۳۷)$$

از این رو ملاحظه می کنیم که مطالعه مکانهای دقیق خطوط طیف جذبی، یافتن پارامتر  $\sigma$  را ممکن می سازد.

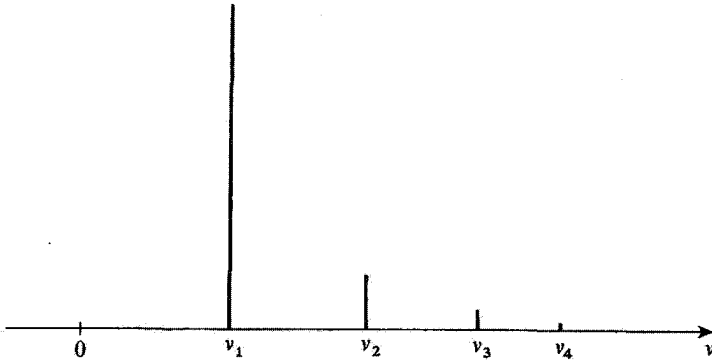
یادداشتها:

۱. ثابت  $\xi$  را، که در فرمول (۵۲) از مکمل ۶ از فصل ۷ آمده است، می توانیم با استفاده از فرمول (۲۷) این مکمل تعیین کنیم. با مقایسه این دو رابطه و نشان دادن  $\nu$  به جای  $n$  در (۲۷)، داریم

$$\xi = -\frac{15}{4}\sigma^2 \quad (۳۸)$$

حال، پتانسیل اختلال در مکمل ۶ از فصل ۷ برابر با  $-gx^3$  است، در حالی که در اینجا آن را برابر با  $\sigma\hbar\omega x^3$ ، یعنی، برابر با

$$\sigma \left( \frac{m^2\omega^5}{\hbar} \right)^{1/2} x^3 \quad (۳۹)$$



شکل ۳ شکل طیف ارتعاشی یک مولکول دواتمی غیرقطبی. به خاطر ناهماهنگی پتانسیل و جملات مرتبه بالاتر در بسط گشتاور دوقطبی مولکولی  $D(x)$  نسبت به  $x$ ، علاوه بر بسامد اصلی  $\nu_1$ ، یک دسته از بسامدهای "همانگ"  $\nu_2, \nu_3, \nu_4, \dots, \nu_n, \dots$  ظاهر می‌شود. توجه کنید که فاصله خطوط مربوطه کاملاً مساوی نیست و شدت آنها سریعاً با افزایش  $n$  کاهش می‌یابد.

انتخاب کرده‌ایم. بنابراین، داریم

$$\sigma = -g \left( \frac{\hbar}{m^2 \omega^5} \right)^{1/2} \quad (40)$$

که بالاخره با قرار دادن آن در (۳۸) حاصل می‌شود

$$\xi = -\frac{15}{4} \frac{g^2 \hbar}{m^2 \omega^5} \quad (41)$$

۲. در بسط پتانسیل در مجاورت  $x = 0$ ، جمله  $x^4$  به مراتب از جمله  $x^3$  کوچکتر است اما انرژیها را تا مرتبه اول تصحیح می‌کند، در حالی که جمله  $x^3$  تنها در مرتبه دوم ظاهر می‌شود (بخش ۳-ب-۲). از این رو، اگر بخواهیم طیف شکل ۳ را دقیقتر بررسی کنیم لازم است این دو تصحیح را به طور همزمان تعیین کنیم (ممکن است در حدود هم باشند).

مراجع برای مطالعه بیشتر

ناهماهنگی ارتعاشات یک مولکول دواتمی:

Anharmonicity of the vibrations of a diatomic molecule: Herzberg (12.4), vol. I, chap. III, §2.

## مکمل ۲

برهم‌کنش بین دو قطبیهای مغناطیسی دو ذره با اسپینهای  $1/2$

۱. هامیلتونی برهم‌کنش  $W$

الف) شکل هامیلتونی  $W$ . تعبیر فیزیکی

ب) یک عبارت معادل برای  $W$

ج) قواعد‌گزینش

۲. آثار برهم‌کنش دو قطبی-دو قطبی روی زیرترازهای زمین دو ذره ثابت

الف) موردی که دو ذره دارای گشتاورهای مغناطیسی متفاوت‌اند

ب) موردی که دو ذره دارای گشتاورهای مغناطیسی برابرند

ج) مثال: طیف تشدید مغناطیسی گج

۳. آثار برهم‌کنش در یک حالت مقید

در این مکمل، می‌خواهیم از نظریه اختلال مانا برای مطالعه ترازهای انرژی یک سیستم متشکل از دو ذره با اسپینهای  $1/2$  را که در یک میدان استاتیک  $B_0$  قرار دارند و توسط یک برهم‌کنش دو قطبی-دو قطبی مغناطیسی به هم چفت شده‌اند، استفاده کنیم.

چنین سیستمهایی وجود دارند. به عنوان مثال، در یک تک‌پلورگج  $(CaSO_4 \cdot 2H_2O)$ ، دو پروتون هر مولکول آب تبلور، مکانهای ثابتی را اشغال می‌کنند، و برهم‌کنش دو قطبی-دو قطبی بین آنها منجر به یک ساختار ریز در طیف تشدید مغناطیسی هسته‌ای می‌شود.

در اتم هیدروژن، یک برهم‌کنش دو قطبی-دو قطبی بین اسپین الکترون و اسپین پروتون نیز وجود دارد. اما در این مورد، دو ذره نسبت به یکدیگر در حال حرکت‌اند، و خواهیم دید که اثر برهم‌کنش دو قطبی-دو قطبی به خاطر تقارن حالت پایه  $1s$ ، صفر می‌شود. از این رو، ساختار فوق‌ریز مشاهده‌شده در این حالت، ناشی از سایر برهم‌کنشهاست (برهم‌کنش تماسی؛ فصل ۱۲، بخشهای ۱۲-۲ و ۱۲-۴-۲ و مکمل ۱ از فصل ۱۲).

۱. هامیلتونی برهم‌کنش  $W$

الف) شکل هامیلتونی  $W$ . تعبیر فیزیکی

اسپینهای ذرات (۱) و (۲) را  $S_1$  و  $S_2$ ، و گشتاورهای مغناطیسی مربوط به آنها را  $M_1$  و  $M_2$

بگیرید

$$M_1 = \gamma_1 S_1$$

$$M_2 = \gamma_2 S_2 \quad (1)$$

که در آنها  $\gamma_1$  و  $\gamma_2$  نسبت‌های زیرومغناطیسی ذرات (۱) و (۲) هستند.

برهم‌کنش گشتاور مغناطیسی  $M_2$  با میدان ناشی از  $M_1$  در (۲) را  $W$  می‌نامیم. اگر بردار یکه خط واصل بین دو ذره را به  $\mathbf{n}$ ، و فاصله بین دو ذره را به  $r$  نمایش بدهیم (شکل ۱)،  $W$  را می‌توانیم به صورت زیر بنویسیم

$$W = \frac{\mu_0}{4\pi} \gamma_1 \gamma_2 \frac{1}{r^3} [S_1 \cdot S_2 - 3(S_1 \cdot \mathbf{n})(S_2 \cdot \mathbf{n})] \quad (2)$$

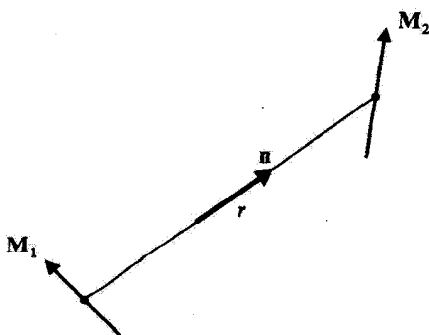
محاسبه‌ای که رابطه (۲) را به دست می‌دهد، از تمام جهات شبیه محاسبه‌ای است که در مکمل ۳ از فصل ۱۱ برای بیان رابطه برهم‌کنش بین دو دوقطبی الکتریکی، ارائه خواهد شد. (صفحه ۳۱۲)

ب) یک عبارت معادل برای  $W$

زوایای قطبی  $\mathbf{n}$  را  $\theta$  و  $\varphi$  اختیار کنید. اگر قرار دهیم

$$\xi(r) = -\frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\gamma_1 \gamma_2}{r^3} \quad (3)$$

به دست می‌آوریم



شکل ۱ وضعیت نسبی گشتاورهای مغناطیسی  $M_1$  و  $M_2$  ذرات (۱) و (۲) (فاصله بین دو ذره است و  $\mathbf{n}$  بردار یکه خط راست بین آنهاست).

$$\begin{aligned}
 W &= \xi(r) \{ \mathfrak{r} [S_{1z} \cos \theta + \sin \theta (S_{1x} \cos \varphi + S_{1y} \sin \varphi)] \\
 &\quad \times [S_{rz} \cos \theta + \sin \theta (S_{rx} \cos \varphi + S_{ry} \sin \varphi)] - \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_r \} \\
 &= \xi(r) \left\{ \mathfrak{r} \left[ S_{1z} \cos \theta + \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta (S_{1+} e^{-i\varphi} + S_{1-} e^{i\varphi}) \right] \right. \\
 &\quad \left. \times \left[ S_{rz} \cos \theta + \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta (S_{r+} e^{-i\varphi} + S_{r-} e^{i\varphi}) \right] - \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_r \right\} \quad (4)
 \end{aligned}$$

یعنی

$$W = \xi(r) [T_0 + T'_0 + T_1 + T_{-1} + T_r + T_{-r}] \quad (5)$$

که

$$\left\{ \begin{aligned}
 T_0 &= (\mathfrak{r} \cos^2 \theta - 1) S_{1z} S_{rz} \\
 T'_0 &= -\frac{1}{\sqrt{2}} (\mathfrak{r} \cos^2 \theta - 1) (S_{1+} S_{r-} + S_{1-} S_{r+}) \\
 T_1 &= \frac{\mathfrak{r}}{\sqrt{2}} \sin \theta \cos \theta e^{-i\varphi} (S_{1z} S_{r+} + S_{1+} S_{rz}) \\
 T_{-1} &= \frac{\mathfrak{r}}{\sqrt{2}} \sin \theta \cos \theta e^{i\varphi} (S_{1z} S_{r-} + S_{1-} S_{rz}) \\
 T_r &= \frac{\mathfrak{r}}{\sqrt{2}} \sin^2 \theta e^{-i\varphi} S_{1+} S_{r+} \\
 T_{-r} &= \frac{\mathfrak{r}}{\sqrt{2}} \sin^2 \theta e^{i\varphi} S_{1-} S_{r-}
 \end{aligned} \right. \quad (6)$$

هر یک از جملات  $T_q$  (یا  $T'_q$ ) که در (۵) ظاهر شده است، بنابر (۶)، برابر است با حاصلضرب تابعی از  $\theta$  و  $\varphi$  که با هماهنگ‌کردن مرتبهٔ دوم  $Y_2^q$  متناسب است و عملگری که تنها روی درجات آزادی اسپین عمل می‌کند [عملگر فضایی و اسپینی در (۶)، تانسورهای درجهٔ دوم‌اند، به همین دلیل است که غالباً،  $W$  را "برهم‌کنش تانسوری" می‌نامیم].

### ج) قواعد گزینش

$r, \theta, \varphi$  عبارت‌اند از مختصات کروی ذرهٔ نسبی وابسته به سیستم دو ذره (۱) و (۲). عملگر  $W$  تنها روی این متغیرها و درجات آزادی اسپین دو ذره عمل می‌کند. فرض کنید  $\{|\varphi_{n,l,m}\rangle\}$  یک

پایه متعارف در فضای حالت  $\mathcal{E}_r$  ذره نسبی، و  $\{|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle\}$  پایه ویژه بردارهای مشترک  $S_{1z}$  و  $S_{2z}$  در فضای حالت اسپین  $(\varepsilon_1 = \pm, \varepsilon_2 = \pm)$  باشند. فضای حالتی که  $W$  در آن عمل می‌کند توسط پایه  $\{|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle\} \otimes \{|\varphi_{n,l,m}\rangle\}$  پدید می‌آید، که در آن، به سادگی می‌توان با استفاده از روابط (۵) و (۶)، قواعد گزینشی را پیدا کرد که عناصر ماتریسی  $W$  در آنها صدق کنند.

### ۱. درجات آزادی اسپین

—  $T_0$ ، نه  $\varepsilon_1$  را تغییر می‌دهد و نه  $\varepsilon_2$ .

—  $T'_0$  هر دو اسپین را "معلق" می‌سازد

$$|+, -\rangle \rightarrow |-, +\rangle \quad \text{و} \quad |-, +\rangle \rightarrow |+, -\rangle$$

—  $T_1$  یکی از دو اسپین را به سوی بالا معلق می‌کند

$$|-, \varepsilon_2\rangle \rightarrow |+, \varepsilon_2\rangle \quad \text{یا} \quad |\varepsilon_1, -\rangle \rightarrow |\varepsilon_1, +\rangle$$

— به طور مشابه،  $T_{-1}$  یکی از دو اسپین را به سوی پایین معلق می‌کند

$$|+, \varepsilon_2\rangle \rightarrow |-, \varepsilon_2\rangle \quad \text{یا} \quad |\varepsilon_1, +\rangle \rightarrow |\varepsilon_1, -\rangle$$

— بالاخره،  $T_2$  و  $T_{-2}$  به ترتیب هر دو اسپین را به سوی بالا و پایین معلق می‌کنند

$$|-, -\rangle \rightarrow |+, +\rangle \quad \text{و} \quad |+, +\rangle \rightarrow |-, -\rangle$$

### ۲. درجات آزادی مداری

وقتی عنصر ماتریسی  $\xi(r)T_q$  بین حالت  $|\varphi_{n,l,m}\rangle$  و حالت  $|\varphi_{n',l',m'}\rangle$  را محاسبه کنیم انتگرال زاویه‌ای زیر ظاهر می‌شود

$$\int Y_{l',m'}^{m'*}(\theta, \varphi) Y_l^q(\theta, \varphi) Y_{l,m}^m(\theta, \varphi) d\Omega \quad (7)$$

که، بر طبق نتایج مکمل ۳ از فصل ۱۰، تنها زمانی مخالف صفر است که داشته باشیم

$$l' = l, l - 2, l + 2 \quad (الف)$$

$$m' = m + q \quad (ب)$$

توجه کنید که مورد  $l = l' = 0$ ، هر چند با (۸) در تضاد نیست ولی کنار گذاشته می‌شود زیرا باید همواره بتوان با  $l, l'$  و ۲ یک مثلث تشکیل داد و این عمل برای  $l = l' = 0$  ممکن نیست. پس باید داشته باشیم

$$l, l' \geq 1 \quad (۸ج)$$

## ۲. آثار برهم‌کنش دو قطبی-دوقطبی روی زیرترازهای زمین دو ذره ثابت

در این بخش، فرض می‌کنیم که دو ذره در فضا ثابت باشند. از این رو فقط درجات آزادی اسپینی را کوانتومی خواهیم کرد، و کمیت‌های  $r, \theta$  و  $\varphi$  را به عنوان پارامترهای داده شده در نظر خواهیم گرفت. این دو ذره، در یک میدان استاتیک  $B_0$  موازی با  $Oz$  قرار داده شده‌اند. به این ترتیب، هامیلتونی زمین  $H_0$ ، معرف برهم‌کنش دو گشتاور مغناطیسی اسپین با  $B_0$ ، را می‌توانیم به صورت زیر بنویسیم

$$H_0 = \omega_1 S_{1z} + \omega_2 S_{2z} \quad (۹)$$

که در آن

$$\omega_1 = -\gamma_1 B_0$$

$$\omega_2 = -\gamma_2 B_0 \quad (۱۰)$$

در حضور برهم‌کنش دو قطبی-دوقطبی  $W$ ، هامیلتونی کل  $H$  سیستم برابر است با

$$H = H_0 + W \quad (۱۱)$$

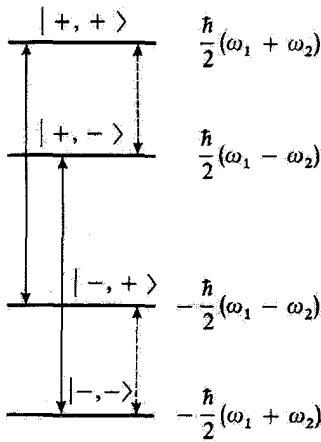
فرض خواهیم کرد میدان  $B_0$  آن قدر بزرگ باشد که بتوانیم  $W$  را مانند یک اختلال در نظر بگیریم.

الف) موردی که دو ذره دارای گشتاورهای مغناطیسی متفاوت‌اند

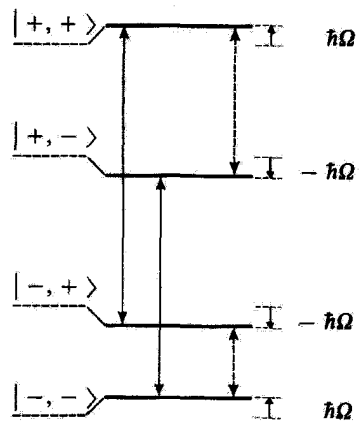
۱. ترازهای زمین و طیف شدید مغناطیسی در غیاب برهم‌کنش

بنابر (۹)، داریم

$$H_0 |\epsilon_1, \epsilon_2\rangle = \frac{\hbar}{\gamma} (\epsilon_1 \omega_1 + \epsilon_2 \omega_2) |\epsilon_1, \epsilon_2\rangle \quad (۱۲)$$



(الف)



(ب)

شکل ۲ ترازهای انرژی دو ذره با اسپین  $1/2$ ، که در یک میدان استاتیک  $B_0$  موازی  $Oz$  قرار داده شده‌اند. دو بسامد زاویه‌ای لارمور  $\omega_1 = -\gamma_1 B_0$  و  $\omega_2 = -\gamma_2 B_0$  متفاوت فرض شده‌اند.

برای شکل الف، ترازهای انرژی، بدون احتساب برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی  $W$  بین دو اسپین، محاسبه شده‌اند. برای شکل ب، این برهم‌کنش را منظور کرده‌ایم. ترازها، دستخوش انتقالی می‌شوند که مقدار تقریبی آن، با تقریب مرتبه اول نسبت به  $W$ ، در سمت راست شکل نشان داده شده است. پیکانهای خطی، ترازهایی را که بین آنها  $S_{1z}$  دارای یک عنصر ماتریسی غیرصفر است، و پیکانهای خطچین، آنهایی را که بین آنها  $S_{2z}$  دارای یک عنصر ماتریسی غیرصفر است، به هم متصل می‌کنند.

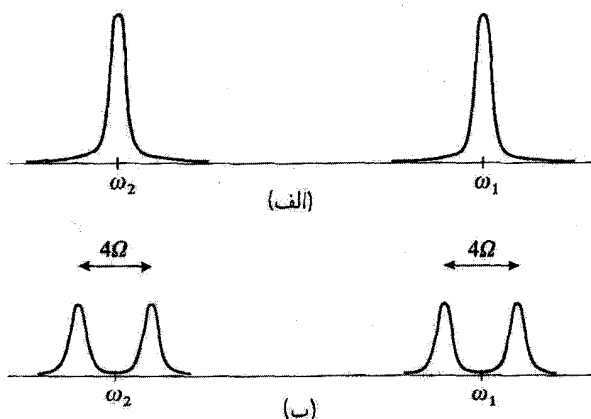
شکل ۲ الف، ترازهای انرژی سیستم دواسپینی را در غیاب برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی نشان می‌دهد (فرض کرده‌ایم که  $\omega_1 > \omega_2 > 0$ ). چون  $\omega_1 \neq \omega_2$  است، همه ترازها ناواکن‌اند.

اگر یک میدان بسامد رادیویی  $B_1 \cos \omega t$  به موازات  $Ox$  اعمال کنیم، یک رشته خطوط تشدید مغناطیسی به دست خواهیم آورد. بسامدهای این تشدیدها با بسامدهای مختلف بور که می‌توانند در تحول  $(\gamma_1 S_{1z} + \gamma_2 S_{2z})$  ظاهر شوند، متناظرند (میدان بسامد رادیویی، با مؤلفه گشتاور مغناطیسی کل روی  $Ox$  برهم‌کنش می‌کند). پیکانهای خطی (خطچین) در شکل ۲ الف، ترازهایی را به هم وصل می‌کنند که بین آنها  $S_{1z} S_{2z}$  دارای یک عنصر ماتریسی غیرصفر است. بنابراین، مشاهده می‌کنیم که دو بسامد زاویه‌ای متمایز بور، برابر با  $\omega_1$  و  $\omega_2$  (شکل ۳ الف)، وجود دارند، که به تشدیدهای هر یک از اسپینهای (۱) و (۲) مربوط‌اند.

۲. تغییرهای ناشی از برهم‌کنش

چون تمام ترازهای شکل (۲ الف) ناواکن هستند، اثر  $W$  تا مرتبه اول را می‌توانیم با محاسبه عناصر قطر اصلی  $W$ ،  $\langle \epsilon_1, \epsilon_2 | W | \epsilon_1, \epsilon_2 \rangle$ ، به دست بیاوریم. از روابط (۵) و (۶) به وضوح مشاهده





شکل ۳ بسامدهای بور که در تحول  $\langle S_{1z} \rangle$  و  $\langle S_{2z} \rangle$  ظاهر می‌شوند، مکانهای خطوط تشدید مغناطیسی را که می‌توانند در سیستم دو اسپینی مشاهده شوند (انتقالهای مربوط به پیکانهای شکل ۲)، به دست می‌دهند. در غیاب برهم‌کنش دو قطبی-دوقطبی، دو تشدید به دست می‌آید که هر یک از آنها مربوط به یکی از دو اسپین است (شکل الف). برهم‌کنش دو قطبی-دوقطبی، توسط یک شکافتگی در هر یک از دو خط قبلی بیان می‌شود (شکل ب).

می‌شود که فقط جمله  $T_0$  در این عنصر ماتریسی، سهم غیر صفر دارد، که برابر است با

$$\langle \varepsilon_1, \varepsilon_2 | W | \varepsilon_1, \varepsilon_2 \rangle = \xi(\tau) (3 \cos^2 \theta - 1) \frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2 \hbar^2}{4} = \varepsilon_1 \varepsilon_2 \hbar \Omega \quad (13)$$

که در آن

$$\Omega = \frac{\hbar}{4} \xi(\tau) (3 \cos^2 \theta - 1) = \frac{-\hbar \mu_0}{16\pi} \frac{\gamma_1 \gamma_2}{r^3} (3 \cos^2 \theta - 1) \quad (14)$$

چون  $W$  خیلی کوچکتر از  $H_0$  است داریم

$$\Omega \ll \omega_1 - \omega_2 \quad (15)$$

از اینجا می‌توانیم بلافاصله انتقال ترازها را تا مرتبه اول نسبت به  $W$  به دست بیاوریم: برای  $(+, +)$  و  $(-, -)$  مقدار  $\hbar \Omega$  و برای  $(+, -)$  و  $(-, +)$  مقدار  $-\hbar \Omega$  (شکل ۲ ب). حال، برای طیف تشدید مغناطیسی شکل (۳ الف) چه اتفاقی می‌افتد؟ اگر فقط خطوطی که شدت آنها نسبت به  $W$  از مرتبه صفر است (یعنی، خطوطی که وقتی  $W$  به سمت صفر میل کند،

به خطوط شکل (۲الف) میل کنند) مورد نظر ما باشند. در این صورت، برای محاسبه بسامدهای بور که در  $\langle S_{1z} \rangle$  و  $\langle S_{2z} \rangle$  ظاهر می‌شوند، عبارتهای مرتبه صفر مربوط به ویژه‌بردارها را به‌کار می‌بریم.<sup>۱</sup> در این صورت، همان انتقالها هستند که دخالت می‌کنند (پیکانه‌های (۲الف) و (۲ب) را با هم مقایسه کنید). با این همه، مشاهده می‌کنیم که دو خطی که در غیاب جفت‌شدگی، به بسامد  $\omega_1$  مربوط بودند (پیکانه‌های خط‌پر) اینک دارای بسامدهای متفاوت  $\omega_1 + 2\Omega$  و  $\omega_1 - 2\Omega$  هستند. همچنین، دو خط مربوط به  $\omega_2$  (پیکانه‌های خط‌چین)، اکنون دارای بسامدهای  $\omega_2 + 2\Omega$  و  $\omega_2 - 2\Omega$  هستند. از این رو، طیف تشدید مغناطیسی اکنون از دو "دوتایی" متمرکز در  $\omega_1$  و  $\omega_2$  ترکیب یافته است، و فاصله بین دو مؤلفه هر دوتایی برابر با  $4\Omega$  است (شکل ۳ب).

بنابراین، برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی، منجر به یک ساختار ریز در طیف تشدید مغناطیسی می‌شود، که برای آن می‌توان یک تعبیر فیزیکی ساده ارائه کرد. گشتاور مغناطیسی  $M_1$  وابسته به  $S_1$  در محل ذره (۲) یک "میدان موضعی"  $b$  ایجاد می‌کند. چون  $B_0$  را خیلی بزرگ فرض می‌کنیم،  $S_1$  سریعاً حول  $Oz$  حرکت تقدیمی انجام می‌دهد، بنابراین می‌توانیم فقط مؤلفه  $S_{1z}$  را در نظر بگیریم (میدان موضعی ناشی از سایر مؤلفه‌ها، آن قدر سریع نوسان می‌کند که اثر قابل توجهی ندارد). از این رو، میدان موضعی  $b$  بسته به اینکه اسپین در حالت  $\langle + \rangle$  باشد یا در حالت  $\langle - \rangle$ ، یعنی، بسته به اینکه به سمت بالا باشد یا پایین، جهت‌های متفاوتی خواهد داشت. در نتیجه، میدان کل "دیده‌شده" توسط ذره (۲)، که برابر با مجموع  $B_0$  و  $b$  است، دو مقدار ممکن می‌تواند اختیار کند.<sup>۲</sup> این نکته، پیدا شدن دو بسامد تشدید برای اسپین (۲) را توجیه می‌کند. مسلماً، همین استدلال ما را قادر به فهم منشأ دوگانه متمرکز در  $\omega_1$  خواهد کرد.

(ب) موردی که دو ذره دارای گشتاورهای مغناطیسی برابرند

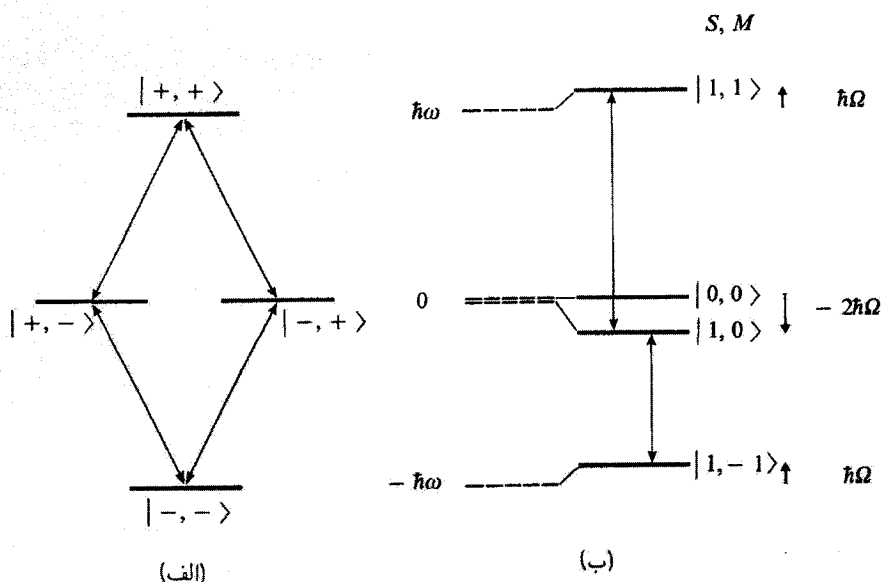
۱. لایه‌های زمین و طیف تشدید مغناطیسی در غیاب برهم‌کنش  
اگر  $\omega_1$  و  $\omega_2$  را مساوی هم اختیار کنیم، فرمول (۱۲) معتبر باقی می‌ماند. از این رو، قرار می‌دهیم

$$\omega_1 = \omega_2 = \omega = -\gamma B_0. \quad (16)$$

ترازهای انرژی در شکل (۴الف) نشان داده شده‌اند. تراز بالایی،  $\langle +, + \rangle$  و تراز پایینی،  $\langle -, - \rangle$ ، مربوط به انرژیهای  $\hbar\omega$  و  $-\hbar\omega$ ، ناواگن‌اند. از طرف دیگر، تراز میانی، مربوط به انرژی  $0$ ، دو‌بار واگن است: دو ویژه‌حالت  $\langle +, - \rangle$  و  $\langle -, + \rangle$  به آن مربوط‌اند.

۱. اگر عبارات مرتبه بالاتر را برای ویژه‌بردارها به‌کار می‌بریم، ملاحظه می‌کردیم که خطوط دیگری با شدت کمتر ظاهر می‌شوند (وقتی  $0 \rightarrow W$  این خطوط محو می‌گردند).

۲. در واقع، چون  $|b| \gg |B_0|$ ، تنها مؤلفه  $b$  روی  $B_0$  است که دخالت دارد.



شکل ۴ فرض شده است که دو ذره با اسپینهای ۱/۲ دارای گشتاورهای مغناطیسی یکسان، و در نتیجه دارای بسامد زاویه‌ای لارمور یکسان  $\omega = -\gamma B_0$  باشند.

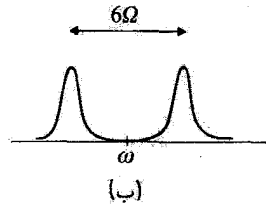
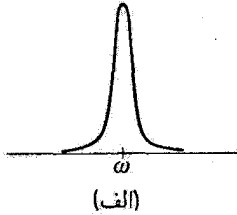
در غیاب برهم‌کنش دو قطبی-دوقطبی، سه تراز به دست می‌آوریم که یکی از آنها دوبار واگن است (شکل الف). تحت تأثیر برهم‌کنش دو قطبی-دوقطبی (شکل ب)، در این ترازها انتقال‌هایی صورت می‌گیرد که مقادیر تقریبی آنها (تا مرتبه اول نسبت به  $W$ ) در سمت راست شکل نشان داده شده است. تا مرتبه صفر نسبت به  $W$ ، حالت‌های مانا عبارت‌اند از ویژه‌حالت‌های  $|S, M\rangle$  اسپین کل. پیکانها، ترازهایی را به هم وصل می‌کنند که  $S_{1z} + S_{2z}$  بین آنها دارای یک عنصر ماتریسی غیرصفر است.

بسامدهای خطوط تشدید مغناطیسی را می‌توان با پیدا کردن بسامدهای بور مؤثر در تحول  $\langle S_{1z} + S_{2z} \rangle$  به دست آورد (اکنون گشتاور مغناطیسی کل با اسپین کل  $S = S_1 + S_2$  متناسب است). چهار انتقال نشان داده شده توسط پیکانهای شکل (۴الف) را که مربوط به یک بسامد زاویه‌ای منفرد  $\omega$  هستند، به سادگی به دست می‌آوریم. با این کار، بالاخره طیف شکل (۵الف) حاصل می‌شود.

۲. تغییرات ناشی از برهم‌کنش

انتقال‌های ترازهای ناواگن  $|+, +\rangle$  و  $|-, -\rangle$  را می‌توانیم مانند گذشته به دست بیاوریم. مقدار انتقال برای هر دو تراز برابر با  $\hbar\Omega$  است [با این همه، باید در رابطه (۱۴) برای  $\Omega$ ،  $\gamma_1$  و  $\gamma_2$  را با  $\gamma$  جایگزین کنیم].

چون تراز میانی دوبار واگن است، اثر  $W$  را روی این تراز می‌توان با قطری کردن ماتریس



شکل ۵. طیف تشدید مغناطیسی که می‌تواند برای یک سیستم متشکل از دو ذره با اسپینهای ۱/۲ و با نسبت زیرمغناطیسی یکسان که در یک میدان استاتیک  $B_0$  قرار داده شده‌اند، مشاهده شود.

در غیاب برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی، یک تشدید منفرد مشاهده می‌کنیم (شکل الف). در حضور برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی (شکل ب) این خط تجزیه می‌شود. فاصله  $6\Omega$  بین دو مؤلفه دوتایی متناسب است با  $1 - 3 \cos^2 \theta$ . که  $\theta$  زاویه بین میدان استاتیک  $B_0$  و خط مستقیم واصل بین دو ذره است.

معرف  $W$  به زیرفضای  $\{|+, -\}, \{-, +\}$ ، به دست آورد. محاسبه عناصر قطری مانند بالا انجام و نتیجه می‌شود

$$\langle +, - | W | +, - \rangle = \langle -, + | W | -, + \rangle = -\hbar\Omega \quad (17)$$

برای عنصر غیرقطری  $\langle +, - | W | -, + \rangle$ ، به سادگی از روابط (۵) و (۶) ملاحظه می‌کنیم که فقط جمله  $T'$  در آن دخالت دارد

$$\begin{aligned} \langle +, - | W | -, + \rangle &= -\frac{\xi(r)}{r} (3 \cos^2 \theta - 1) \\ &\times \langle +, - | (S_{1+} S_{2-} + S_{1-} S_{2+}) | -, + \rangle \\ &= -\xi(r) \frac{\hbar^2}{r} (3 \cos^2 \theta - 1) = -\hbar\Omega \end{aligned} \quad (18)$$

در این صورت باید ماتریس

$$-\hbar\Omega \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (19)$$

را که ویژه‌مقدارهای آن  $2\hbar\Omega$  و  $0$ ، به ترتیب، وابسته به ویژه‌بردارهای

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+, -\rangle + |-, +\rangle) \quad \text{و} \quad |\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+, -\rangle - |-, +\rangle)$$

هستند، قطری کنیم.

شکل (۴ب)، نشان‌دهنده ترازهای انرژی سیستم متشکل از دو اسپین جفت‌شده است. انرژیها، تا مرتبه اول نسبت به  $W$ ، توسط ویژه‌حالت‌های تا مرتبه صفر داده می‌شوند. توجه کنید که این ویژه‌حالت‌ها، چیزی جز ویژه‌حالت‌های  $(S, M)$  مشترک میان  $S^2$  و  $S_z$  نیستند، که در آن  $S = S_1 + S_2$  اسپین کل است. چون عملگر  $S_z$  با  $S^2$  جابه‌جا می‌شود، فقط می‌تواند حالت‌های سه‌تایی را جفت کند، یعنی  $(1, 0)$  را به  $(1, 1)$  و  $(1, 0)$  را به  $(1, -1)$ . این مطلب، دو انتقالی را می‌دهد که در شکل ۴ب توسط پیکان‌ها نشان داده شده، و بسامدهای بور  $3\Omega + \omega$  و  $3\Omega - \omega$  به آنها مربوط می‌شوند. بنابراین، طیف تشدید مغناطیسی از یک دوتایی متمرکز در  $\omega$  ترکیب یافته است، و فاصله بین دو مؤلفه این دوتایی برابر با  $6\Omega$  است (شکل ۴ب).

### ج) مثال: طیف تشدید مغناطیسی گچ

موردی که در بخش ب بالا بررسی کردیم، مربوط است به دو پروتون یک مولکول آب تبلور در یک تک‌بلور گچ ( $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ). این دو پروتون، گشتاورهای مغناطیسی یکسانی دارند و می‌توانیم فرض کنیم که مکان‌های ثابتی را در بلور اشغال می‌کنند. به علاوه، این دو پروتون به هم خیلی نزدیک‌ترند تا به سایر پروتون‌ها (متعلق به سایر مولکول‌های آب). چون برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی، خیلی سریع با فاصله کاهش می‌یابد. (قانون  $1/r^3$ )، می‌توانیم از برهم‌کنش‌های میان پروتون‌های متعلق به سایر مولکول‌های آب صرف‌نظر کنیم.

در واقع مشاهده شده است که طیف تشدید مغناطیسی شامل یک دوتایی است<sup>۱</sup> که فاصله جدایی آن به زاویه  $\theta$ ی بین میدان  $B_0$  و خط واصل بین دو پروتون بستگی دارد. اگر بلور را نسبت به میدان  $B_0$  دوران بدهیم، این زاویه  $\theta$  تغییر پیدا کرده و فاصله بین دو مؤلفه دوتایی تغییر می‌کند. بنابراین، با بررسی تغییرات این فاصله جدایی، می‌توانیم مکان‌های مولکول‌های آب را نسبت به محورهای بلور تعیین کنیم.

وقتی نمونه مورد مطالعه، به جای یک تک‌بلور، به صورت پودر متشکل از تک‌بلورهای کوچک با جهت‌های کتره‌ای باشد،  $\theta$  تمام مقادیر ممکن را اختیار می‌کند. در این صورت، یک نوار پهن مشاهده می‌شود که از برهم‌نهمش دوتایی‌هایی با فواصل جدایی مختلف ناشی شده است.

### ۳. آثار برهم‌کنش در یک حالت مقید

اینک فرض می‌کنیم که دو ذره (۱) و (۲) ثابت نباشند، بلکه بتوانند نسبت به یکدیگر حرکت کنند.

۱. در واقع در یک تک‌بلور گچ، دو جهت متفاوت برای مولکول‌های آب وجود دارد، در نتیجه دو دوتایی مربوط به دو مقدار ممکن  $\theta$  خواهیم داشت.

به عنوان مثال، یک اتم هیدروژن را در نظر بگیرید (یک پروتون و یک الکترون). وقتی فقط نیروهای الکتروستاتیکی را به حساب بیاوریم، حالت پایه این اتم (در دستگاه مختصات مرکز جرم) توسط کت  $|\varphi_{1,0,0}\rangle$  که با اعداد کوانتومی  $l = 0, m = 0$  برچسب می خورد، بیان می شود (فصل ۷). پروتون و الکترون، ذرات با اسپین  $1/2$  هستند. از این رو، حالت پایه، چهار بار واگن است، و یک پایه ممکن در زیرفضای مربوط از چهار بردار زیر تشکیل می شود

$$\{|\varphi_{1,0,0}\rangle \otimes |\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle\} \quad (20)$$

که در آن  $\varepsilon_1$  و  $\varepsilon_2$ ، که برابر با  $+$  یا  $-$  هستند، به ترتیب معرف ویژه مقادیرهای  $S_z$  و  $I_z$  اند (S و I اسپینهای الکترون و پروتون اند).

اثر برهم کنش دوقطبی-دوقطبی میان S و I در این حالت پایه چیست؟ عناصر ماتریسی W به مراتب از اختلاف انرژی بین تراز ۱s و ترازهای برانگیخته کوچکترند به طوری که می توان اثر W را توسط نظریه اختلال بررسی کرد. تا مرتبه اول، می توان آن را با قطری کردن ماتریس  $4 \times 4$  با عناصر  $\langle \varphi_{1,0,0}, \varepsilon_1 \varepsilon_2 | W | \varphi_{1,0,0}, \varepsilon_1' \varepsilon_2' \rangle$  تعیین کرد. محاسبه این عناصر ماتریسی، طبق (5) و (6)، شامل انتگرالهای زاویه ای از نوع

$$\int Y_l^{m'*}(\theta, \varphi) Y_l^q(\theta, \varphi) Y_l^m(\theta, \varphi) d\Omega \quad (21)$$

است که بنابر قواعد گزینش مندرج در بخش ۱ج، برابر با صفرند [در این مورد خاص، به سادگی می توان نشان داد که انتگرال (21) برابر با صفر است: چون  $Y_l^0$  مقدار ثابتی است، عبارت (21) با حاصلضرب اسکالر  $Y_l^q$  و  $Y_l^m$  متناسب است که این حاصلضرب به خاطر روابط تعامد هماهنگهای گروهی مساوی صفر است].

برهم کنش دوقطبی-دوقطبی، انرژی حالت پایه را تا مرتبه اول تغییر نمی دهد؛ اما، در ساختار (فوق ریز) ترازهای برانگیخته با  $l \geq 1$ ، وارد می شود. در این صورت، باید عناصر ماتریسی  $\langle \varphi_{n,l,m}, \varepsilon_1 \varepsilon_2 | W | \varphi_{n,l,m}, \varepsilon_1' \varepsilon_2' \rangle$ ، یعنی، انتگرالهای

$$\int Y_l^{m'*}(\theta, \varphi) Y_l^q(\theta, \varphi) Y_l^m(\theta, \varphi) d\Omega$$

را محاسبه کنیم، که بنابر (۸-ج)، وقتی  $l \geq 1$  باشد، غیر صفر می شوند.

## مراجع برای مطالعه بیشتر

Evidence in nuclear magnetic resonance experiments of the magnetic dipole interactions between two spins in a rigid lattice: Abragam (14.1), chap. IV, §II and chap. VII, §IA; Slichter (14.2), chap. 3; Pake (14.6).

## مکمل ۳

### نیروهای وان دروالس

۱. هامیلتونی برهم‌کنش الکتروستاتیکی برای دو اتم هیدروژن

(الف) نمادگذاری

(ب) محاسبه انرژی برهم‌کنش الکتروستاتیکی

۲. نیروهای وان دروالس بین دو اتم هیدروژن در حالت پایه  $1s$

(الف) وجود یک پتانسیل جاذبه  $-C/R^6$

(ب) محاسبه تقریبی ثابت  $C$

(ج) بحث

۳. نیروهای وان دروالس بین یک اتم هیدروژن در حالت  $1s$  و یک اتم هیدروژن در حالت  $2p$

(الف) انرژیهای حالت‌های مانای سیستم دو اتمی - اثر شدید

(ب) انتقال برانگیختگی از یک اتم به دیگر

۴. برهم‌کنش یک اتم هیدروژن در حالت پایه با یک دیوار رسانا

ویژگی نیروهای میان دو اتم خنثی، با مرتبه بزرگی فاصله  $R$  بین دو اتم تغییر می‌کند.

به‌عنوان مثال، دو اتم هیدروژن را در نظر بگیرید. اگر  $R$  از مرتبه ابعاد اتمی (یعنی، از مرتبه شعاع بور  $a_0$ )، باشد تابع‌موجهای الکترونی روی هم می‌افتند و دو اتم یکدیگر را جذب می‌کنند، زیرا آنها متمایل به تشکیل یک مولکول  $H_2$  هستند. انرژی پتانسیل سیستم برای یک مقدار معین از فاصله  $R$  بین آنها، که آن را به  $R_e$  نشان می‌دهیم، دارای یک مینیموم<sup>۱</sup> است. منشأ فیزیکی این جذب (و در نتیجه پیوند شیمیایی) بر این واقعیت استوار است که الکترون‌ها می‌توانند بین دو اتم نوسان کنند (بخشهای ۴-۳-۲، ج و ۴-۳-۳، د از فصل ۴). تابع‌موجهای مانای دو الکترون، دیگر تنها در اطراف یکی از هسته‌ها متمرکز نیستند؛ و این، انرژی حالت پایه را پایین می‌آورد (مکمل ۷ از فصل ۱۱).

در فواصل زیادتر، پدیده‌ها کاملاً تغییر می‌کنند. الکترون‌ها، دیگر نمی‌توانند از یک اتم به اتم دیگر بروند، زیرا دامنه احتمال یک چنین فرایندی با کاهش روی هم‌افتادگی تابع‌موجها، کاهش می‌یابد، یعنی به‌طور نمایی با فاصله کاهش پیدا می‌کند. در این صورت اثر غالب، همان برهم‌کنش الکتروستاتیکی بین گشتاورهای دوقطبی الکتریکی دو اتم خنثی است. این، منجر به انرژی کلی

۱. در فواصل بسیار کوتاه، نیروهای دافعه بین هسته‌ها همواره غلبه می‌کنند.



می‌شود که جاذبه است، و کاهش پیدا می‌کند ولی نه به‌طور نمایی بلکه به صورت  $\propto 1/R^6$ . این مطلب منشأ نیروهای وان دروالس است که می‌خواهیم در این مکمل آن‌را با استفاده از نظریه اختلال مانا بررسی کنیم (برای سهولت، مطالعه خود را به‌مورد دو اتم هیدروژن محدود می‌کنیم). باید متذکر شویم که ماهیت اساسی نیروهای وان دروالس با ماهیت نیروهایی که مسئول پیوند شیمیایی هستند، یکی است: در هر دو مورد، هامیلتونی اصلی الکتروستاتیکی است. فقط، تغییر انرژیهای حالت‌های مانای کوانتومی سیستم دواتمی نسبت به  $R$ ، به‌ما اجازه تعریف و تمایز بین این دو نوع نیرو را می‌دهد.

نیروهای وان دروالس در شیمی فیزیک، بخصوص وقتی که دو اتم مورد بررسی دارای هیچ الکترون والانس نیستند (نیروهای بین اتمهای گازهای کمیاب، مولکولهای پایدار و غیره) نقش مهمی ایفا می‌کنند. این نیروها تا اندازه‌ای مسئول تفاوت‌های بین رفتار یک گاز حقیقی و یک گاز کامل هستند. بالاخره، همان‌طور که قبلاً گفته‌ایم، این نیروها، نیروهایی بلندبردند و از این‌رو در پایداری کلوئیدها دخالت دارند.

بررسی خود را با تعیین عبارتی برای هامیلتونی برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی بین دو اتم هیدروژن خنثی شروع می‌کنیم (بخش ۱). آنگاه می‌توانیم نیروهای وان دروالس بین دو اتم در حالت ۱s (بخش ۲)، یا بین یک اتم در حالت  $2p$  و یک اتم در حالت ۱s (بخش ۳)، را مطالعه کنیم. بالاخره، نشان خواهیم داد (بخش ۴) که یک اتم هیدروژن در حالت ۱s، توسط تصویر آینه‌ای الکتریکی خود در یک دیوار کاملاً رسانا، جذب می‌شود.

## ۱. هامیلتونی برهم‌کنش الکتروستاتیکی برای دو اتم هیدروژن الف) نمادگذاری

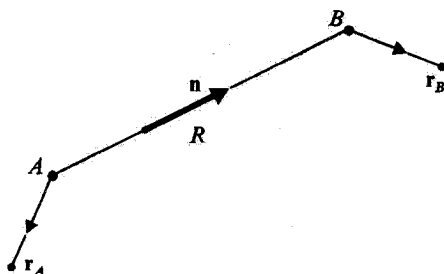
فرض می‌کنیم که دو پروتون متعلق به دو اتم هیدروژن در نقاط  $A$  و  $B$  بدون حرکت باقی بمانند (شکل ۱). قرار خواهیم داد

$$\mathbf{R} = \mathbf{OB} - \mathbf{OA} \quad (1)$$

$$R = |\mathbf{R}| \quad (2)$$

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{R}}{R} \quad (3)$$

$R$  فاصله بین دو اتم، و  $\mathbf{n}$  بردار یکه در راستای خط واصل بین آنهاست. فرض کنید  $r_A$  بردار مکان الکترون متصل به اتم  $(A)$  نسبت به نقطه  $A$  باشد، و  $r_B$  بردار مکان الکترون متصل به اتم



شکل ۱ محل نسبی دو اتم هیدروژن.  $R$  فاصله بین دو پروتون واقع در  $A$  و  $B$  است، و  $n$  عبارت است از برداری که روی خط واصل بین آنها،  $r_B$  و  $r_A$  به ترتیب عبارتند از بردارهای مکانی دو الکترون نسبت به نقاط  $B$  و  $A$ .

$B$  نسبت به نقطه  $B$  کمیتهای

$$\mathcal{D}_A = q r_A \quad (۴)$$

$$\mathcal{D}_B = q r_B \quad (۵)$$

را گشتاورهای دو قطبی الکتریکی دو اتم می نمایم ( $q$  بار الکترون است). در طول این فرض خواهیم کرد

$$R \gg |r_A|, |r_B| \quad (۶)$$

گرچه الکترونهاى دو اتم یکسان اند ولی کاملاً از یکدیگر جدا هستند و تابع موجهای آنها روی هم نمی افتند. از این رو ضرورتی ندارد که اصل موضوع متقارن سازی (فصل ۱۴، بخش ۱۴-۴-۲-ب) را اعمال کنیم.

ب) محاسبه انرژی برهم کنش الکتروستاتیکی

اتم  $(A)$  در  $(B)$  یک پتانسیل الکتروستاتیکی  $U$  به وجود می آورد که با بارهای  $(B)$  برهم کنش انجام می دهد. این، منجر به یک انرژی برهم کنش  $\mathcal{W}$  می شود.

در مکمل ۵ از فصل ۱۰ دیدیم که  $U$  را می توانیم برحسب  $R$ ،  $n$  و گشتاورهای چند قطبی  $(A)$  محاسبه کنیم. چون  $(A)$  خنثی است، مهمترین سهم در  $U$  مربوط به گشتاور دو قطبی الکتریکی  $\mathcal{D}_A$  است. همچنین، چون  $(B)$  خنثی است، مهمترین جمله در  $\mathcal{W}$ ، از برهم کنش بین گشتاور دو قطبی  $\mathcal{D}_B$  می مربوط به  $(B)$  و میدان الکتریکی  $\mathbf{E} = -\nabla U$  که اساساً توسط  $\mathcal{D}_A$  ایجاد

می شود، حاصل می گردد. این مطلب، دلیل اینکه، نام "برهم کنش دوقطبی-دوقطبی" به جمله غالب  $\mathcal{W}$  داده می شود، را بیان می کند. البته جملات کوچکتری نیز وجود دارند (دوقطبی-چهارقطبی، چهارقطبی-چهارقطبی، و غیره) در نتیجه  $\mathcal{W}$  به صورت زیر نوشته می شود

$$\mathcal{W} = \mathcal{W}_{dd} + \mathcal{W}_{dq} + \mathcal{W}_{qd} + \mathcal{W}_{qq} + \dots \quad (7)$$

برای محاسبه  $\mathcal{W}_{dd}$ ، ابتدا پتانسیل الکتروستاتیکی ناشی از  $\mathcal{D}_A$  در  $(B)$  را می نویسیم

$$U(\mathbf{R}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathcal{D}_A \cdot \mathbf{R}}{R^2} \quad (8)$$

که از آن داریم

$$\mathbf{E} = -\nabla_{\mathbf{R}} U = -\frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{R^2} [\mathbf{r}_A - 2(\mathbf{r}_A \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}] \quad (9)$$

و در نتیجه

$$\mathcal{W}_{dd} = -\mathbf{E} \cdot \mathcal{D}_B = \frac{e^2}{R^2} [\mathbf{r}_A \cdot \mathbf{r}_B - 2(\mathbf{r}_A \cdot \mathbf{n})(\mathbf{r}_B \cdot \mathbf{n})] \quad (10)$$

که در آن قرار داده ایم  $e^2 = q/4\pi\epsilon_0$  و برای  $\mathcal{D}_B$  و  $\mathcal{D}_A$  به ترتیب از روابط (۴) و (۵) استفاده کرده ایم. در این مکمل، محور  $Oz$  را به موازات  $\mathbf{n}$  انتخاب خواهیم کرد که در این صورت (۱۰) را می توانیم به صورت زیر بنویسیم

$$\mathcal{W}_{dd} = \frac{e^2}{R^2} (x_A x_B + y_A y_B - 2z_A z_B) \quad (11)$$

در مکانیک کوانتومی،  $\mathcal{W}_{dd}$  به عملگر  $\mathcal{W}_{dd}$  تبدیل می شود، که برای به دست آوردن آن می توان در (۱۱)، به جای  $x_A, y_A, z_B, \dots$  با مشاهده پذیرهای مربوط به آنها یعنی  $X_A, Y_A, X_B, \dots, Z_B$  را که در فضاهای حالت  $\mathcal{E}_A$  و  $\mathcal{E}_B$  دو اتم هیدروژن عمل می کنند، قرار داد<sup>۱</sup>

$$W_{dd} = \frac{e^2}{R^2} (X_A X_B + Y_A Y_B - 2Z_A Z_B) \quad (12)$$

۱. درجات آزادی خارجی انتقالی دو اتم هیدروژن کوانتیده نیستند: برای سهولت فرض می کنیم که دو پروتون، بینهایت سنگین و بدون حرکت اند. بنابراین، در رابطه (۱۲)،  $R$  یک پارامتر است و نه یک مشاهده پذیر.

۲. نیروهای وان دروالس بین دو اتم هیدروژن در حالت پایه  $1s$  الف) وجود یک پتانسیل جاذبه  $-C/R^6$

۱. اصل محاسبه

هامیلتونی سیستم عبارت است از

$$H = H_{\circ A} + H_{\circ B} + W_{dd} \quad (13)$$

که در آن  $H_{\circ A}$  و  $H_{\circ B}$  عبارتند از انرژیهای اتمهای (A) و (B) وقتی که این اتمها منزوی باشند.

در غیاب  $W_{dd}$ ، ویژه حالت‌های  $H$  توسط معادله زیر داده می‌شوند

$$(H_{\circ A} + H_{\circ B})|\varphi_{n,l,m}^A; \varphi_{n',l',m'}^B\rangle = (E_n + E_{n'})|\varphi_{n,l,m}^A; \varphi_{n',l',m'}^B\rangle \quad (14)$$

که  $|\varphi_{n,l,m}\rangle$  و  $E_n$  در بخش C از فصل ۷ محاسبه شده‌اند. بخصوص، حالت پایه  $H_{\circ A} + H_{\circ B}$  عبارت است از  $|\varphi_{1,0,0}^A; \varphi_{1,0,0}^B\rangle$  با انرژی  $-2E_I$ . این حالت، ناواکن است (اسپینها را منظور نکرده‌ایم).

مسئله این است که انتقال ناشی از  $W_{dd}$  در این حالت پایه، و بخصوص بستگی آن را به  $R$  تعیین کنیم. این انتقال، نشان‌دهنده انرژی پتانسیل برهم‌کنش دو اتم در حالت پایه است. چون  $W_{dd}$  بسیار کوچکتر از  $H_{\circ A}$  و  $H_{\circ B}$  است، می‌توانیم این اثر را توسط نظریه اختلال مانا محاسبه کنیم.

۲. اثر مرتبه اول برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی  
حال، نشان می‌دهیم که تصحیح مرتبه اول

$$\varepsilon_1 = \langle \varphi_{1,0,0}^A; \varphi_{1,0,0}^B | W_{dd} | \varphi_{1,0,0}^A; \varphi_{1,0,0}^B \rangle \quad (15)$$

صفر است. بنابر رابطه (۱۲) برای  $W_{dd}$ ،  $\varepsilon_1$  شامل حاصلضربهایی است به شکل:  $\langle \varphi_{1,0,0}^B | X_B | \varphi_{1,0,0}^B \rangle \langle \varphi_{1,0,0}^A | X_A | \varphi_{1,0,0}^A \rangle$  (و کمیت‌های مشابهی که در آنها  $X_A$  توسط  $Z_A, Y_A$  و  $X_B$  توسط  $Z_B, Y_B$  جایگزین شده باشد)، که مقدارشان صفر است، زیرا در یک حالت مانای اتم، مقادیر متوسط مؤلفه‌های عملگر مکانی صفرند.

یادداشت:

سایر جملات،  $W_{qq}, W_{qd}, W_{dq}, \dots$  در بسط (۷) شامل حاصلضربهایی از دوگشتاور چندقطبی هستند که یکی نسبت به (A) و دیگری نسبت به (B) است و دست کم یکی از آنها از مرتبه‌ای بالاتر از ۱ است. سهمهای آنها نیز تا مرتبه اول صفر است: بر حسب سهمها، مقادیر متوسط عملگرهای چندقطبی مرتبه ۱ یا بالاتر، در حالت پایه، بیان می‌شوند، و می‌دانیم که (مکمل ۵ از فصل ۱۰، بخش ۲-ج) این مقادیر متوسط در حالت  $l = 0$ ، صفرند. (قاعده مثلثی ضرایب کلبش گوردن). بنابراین، باید اثر مرتبه دوم  $W_{dd}$  را پیدا کنیم، که در این صورت، مهمترین تصحیح انرژی خواهد بود. ■

۳. اثر مرتبه دوم برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی

بنابر نتایج فصل ۱۱، تصحیح مرتبه دوم انرژی را می‌توانیم به صورت زیر بنویسیم

$$\varepsilon_2 = \sum'_{\substack{nlm \\ n'l'm'}} \frac{|\langle \varphi_{n,l,m}^A; \varphi_{n',l',m'}^B | W_{dd} | \varphi_{1,0,0}^A; \varphi_{1,0,0}^B \rangle|^2}{-2E_I - E_n - E_{n'}} \quad (16)$$

که در آن، نمادگذاری  $\sum'$  به این معنی است که حالت  $|\varphi_{1,0,0}^A; \varphi_{1,0,0}^B\rangle$  از جمع‌بندی مستثنی شده است.<sup>۱</sup>

چون  $W_{dd}$  متناسب با  $1/R^2$  است،  $\varepsilon_2$  با  $1/R^6$  متناسب خواهد بود. از طرفی، تمام مخرجها منفی هستند، زیرا از حالت پایه شروع می‌کنیم. بنابراین، برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی، منجر به یک انرژی منفی متناسب با  $1/R^6$  می‌شود

$$\varepsilon_2 = -\frac{C}{R^6} \quad (17)$$

بنابراین، نیروهای وان دروالس از نوع جاذبه‌اند و به صورت  $1/R^V$  تغییر می‌کنند.

بالاخره، بسط حالت پایه را تا مرتبه اول نسبت به  $W_{dd}$  محاسبه می‌کنیم. بنابر فرمول (۱۱-۲۸) از فصل ۱۱، داریم

۱. این جمع‌بندی نه تنها روی حالت‌های مقید، بلکه روی طیف پیوسته  $H_{0,A} + H_{0,B}$  نیز انجام می‌شود.

$$\begin{aligned}
 |\psi_0\rangle &= |\varphi_{1,0,0}^A; \varphi_{1,0,0}^B\rangle \\
 &+ \sum'_{\substack{nlm \\ n'l'm'}} |\varphi_{n,l,m}^A; \varphi_{n',l',m'}^B\rangle \frac{\langle \varphi_{n,l,m}^A; \varphi_{n',l',m'}^B | W_{dd} | \varphi_{1,0,0}^A; \varphi_{1,0,0}^B \rangle}{-2E_I - E_n - E_{n'}} \\
 &+ \dots
 \end{aligned} \tag{۱۸}$$

یادداشت:

عناصر ماتریسی موجود در روابط (۱۶) و (۱۸) شامل کمیتهایی هستند به شکل  $\langle \varphi_{n,l,m}^A; X_A | \varphi_{1,0,0}^A \rangle$  و  $\langle \varphi_{n',l',m'}^B; X_B | \varphi_{1,0,0}^B \rangle$  توسط  $X_B$  و  $X_A$  در آنها مشابهی که در آنها  $Y_B$  و  $Y_A$  یا  $Z_B$  و  $Z_A$  جایگزین شده باشند که تنها وقتی مخالف صفرند که داشته باشیم  $l = 1$  و  $l' = 1$ . این کمیتهای در واقع متناسب با حاصلضربهای انتگرالهای زاویه‌ای

$$\left[ \int Y_l^{m*}(\Omega_A) Y_l^q(\Omega_A) Y_0^0(\Omega_A) d\Omega_A \right] \times \left[ \int Y_{l'}^{m'*}(\Omega_B) Y_{l'}^q(\Omega_B) Y_0^0(\Omega_B) d\Omega_B \right]$$

هستند، که بنابر نتایج مکمل ۳ از فصل ۱۰ در صورتی که  $l \neq 1$  یا  $l' \neq 1$  باشد، صفرند. از این رو می‌توانیم در (۱۶) و (۱۸)  $l$  و  $l'$  را با ۱ جایگزین کنیم.

(ب) محاسبه تقریبی ثابت  $C$

بنابر (۱۶) و (۱۲)، ثابت  $C$ ، در رابطه (۱۷)، با رابطه زیر داده می‌شود

$$C = e^f \sum'_{\substack{nlm \\ n'l'm'}} \frac{|\langle \varphi_{n,l,m}^A; \varphi_{n',l',m'}^B | (X_A X_B + Y_A Y_B - 2Z_A Z_B) | \varphi_{1,0,0}^A; \varphi_{1,0,0}^B \rangle|^2}{2E_I + E_n + E_{n'}} \tag{۱۹}$$

باید داشته باشیم  $n \geq 2$  و  $n' \geq 2$  برای حالت‌های مقید،  $|E_n| = E_I/n^2$  از  $E_I$  کوچکتر است و اگر در (۱۹)،  $E_n$  و  $E_{n'}$  را صفر قرار بدهیم، خطای حاصل قابل ملاحظه نخواهد بود. برای حالت‌های واقع در طیف پیوسته،  $E_n$  بین  $0$  و  $+\infty$  تغییر می‌کند. اما به محض اینکه اندازه  $E_n$  قابل ملاحظه شود، عناصر ماتریسی صورت، کوچک می‌شوند، زیرا در این صورت، نوسانات فضایی تابع موج در ناحیه‌ای که در آن  $\varphi_{1,0,0}(\mathbf{r})$  غیر صفر است، زیاد خواهند بود.

بنابراین، برای اینکه یک دید کلی از مرتبه بزرگی  $C$  داشته باشیم، می‌توانیم تمام انرژیهای مخرجهای (۱۹) را با  $2E_I$  جایگزین کنیم. سپس، با استفاده از رابطه بستاری و این حقیقت که

عنصر قطری  $W_{dd}$  صفر است (بخش ۲-الف-۲) خواهیم داشت

$$C \simeq \frac{e^2}{2E_I} \langle \varphi_{1,0,0}^A; \varphi_{1,0,0}^B | (X_A X_B + Y_A Y_B - 2Z_A Z_B)^2 | \varphi_{1,0,0}^A; \varphi_{1,0,0}^B \rangle \quad (20)$$

محاسبه این عبارت آسان است: به خاطر تقارن کروی حالت  $1s$ ، مقادیر متوسط جملات ضربدری از نوع  $X_B Y_B$ ،  $X_A Y_A$ ، ... صفر است. به علاوه، به همین دلیل، کمیت‌های مختلف

$$\langle \varphi_{1,0,0}^A | X_A^2 | \varphi_{1,0,0}^A \rangle, \langle \varphi_{1,0,0}^A | Y_A^2 | \varphi_{1,0,0}^A \rangle, \dots, \langle \varphi_{1,0,0}^B | Z_B^2 | \varphi_{1,0,0}^B \rangle$$

برابری با یک سوم مقدار متوسط  $\mathbf{R}_A^2 = X_A^2 + Y_A^2 + Z_A^2$  بنا بر این، نهایتاً با استفاده از رابطه تابع موج  $\varphi_{1,0,0}(r)$  به دست می‌آوریم

$$C \simeq \frac{e^2}{2E_I} \times 6 \left| \langle \varphi_{1,0,0}^A | \frac{\mathbf{R}_A^2}{3} | \varphi_{1,0,0}^A \rangle \right|^2 = 6e^2 a_0^5 \quad (21)$$

(که  $a_0$  شعاع بور است) و در نتیجه

$$\varepsilon_2 \simeq -6e^2 \frac{a_0^5}{R^6} = -6 \frac{e^2}{R} \left( \frac{a_0}{R} \right)^5 \quad (22)$$

این محاسبه، فقط به شرطی معتبر است که  $R \gg a_0$  (تابع موجها روی هم افتادگی نداشته باشند). بنابراین ملاحظه می‌کنیم که  $\varepsilon_2$  از مرتبهٔ برهم‌کنش الکتروستاتیکی بین دو بار  $q$  و  $-q$ ، ضربدر ضریب تقلیل  $1 \ll (a_0/R)^5$  است.

### ج) بحث

#### ۱. تعبیر "دینامیکی" نیروهای وان دروالس

مقدار متوسط، گشتاور دوقطبی الکتریکی اتم (که به طور ساده‌تر آن را دوقطبی خواهیم نامید) در هر لحظه در حالت پایه  $|\varphi_{1,0,0}^A\rangle$  یا  $|\varphi_{1,0,0}^B\rangle$  صفر است. این، یعنی که هر اندازه‌گیری جداگانه از یک مؤلفه این دوقطبی، نتیجه صفر خواهد داد. اگر یک چنین اندازه‌گیری‌ای را انجام بدهیم، عموماً یک مقدار غیرصفر به دست خواهیم آورد. اما با همان احتمال، مقدار قرینهٔ آن به دست می‌آید. لذا، دوقطبی یک اتم هیدروژن در حالت پایه، دائماً دستخوش افت‌وخیزهای کتره‌ای می‌شود.

ابتدا از تأثیر یک دوقطبی بر حرکت دوقطبی دیگر، چشم‌پوشی می‌کنیم. چون در این صورت دو دوقطبی به‌طور کتره‌ای و مستقل از هم افت‌وخیز می‌کنند، کنش متوسط آنها صفر است: این مطلب بیان‌کننده این حقیقت است که  $W_{dd}$  دارای اثر مرتبه اول نیست.

اما، دو دوقطبی واقعاً مستقل از هم نیستند. میدان الکتروستاتیکی ناشی از دوقطبی ( $A$ ) در ( $B$ ) را در نظر بگیرید. این میدان، افت‌وخیزهای دوقطبی ( $A$ ) را دنبال می‌کند. بنابراین، دوقطبی‌ای که این میدان در ( $B$ ) القاء می‌کند با دوقطبی ( $A$ ) همبسته است، به‌طوری که میدان الکتروستاتیکی‌ای که به ( $A$ ) "برمی‌گردد" دیگر با حرکت دوقطبی ( $A$ ) ناهمبسته نیست. بنابراین، اگرچه حرکت دوقطبی ( $A$ ) کتره‌ای است، ولی برهم‌کنش آن با میدان خودش، که توسط ( $B$ ) به آن "متعکس" می‌شود، دارای یک مقدار متوسط صفر نیست. این مطلب، تعبیر فیزیکی اثر مرتبه دوم  $W_{dd}$  است.

بنابراین، جنبهٔ دینامیکی برای فهم منشأ نیروهای وان‌دروالس مفید است. اگر این دو اتم هیدروژن در حالت پایه را به‌صورت دو ابرکروی و "استاتیک" با الکتروسیستهٔ منفی (با یک بار نقطه‌ای مثبت در مرکز هر یک از آنها) تصور می‌کردیم، به یک انرژی برهم‌کنشی دقیقاً صفر می‌رسیدیم.

## ۲. همبستگی‌های بین دو گشتاور دوقطبی

حال به‌طور دقیق‌تر نشان می‌دهیم که یک همبستگی بین دو دوقطبی وجود دارد. وقتی  $W_{dd}$  را منظور کنیم، حالت پایهٔ سیستم دیگر  $(\varphi_{1,0,0}^A; \varphi_{1,0,0}^B)$  نیست بلکه  $(\psi_0)$  است [رابطه (۱۸)]. سپس با یک محاسبه ساده، تا مرتبهٔ اول نسبت به  $W_{dd}$ ، داریم

$$\langle \psi_0 | X_A | \psi_0 \rangle = \dots = \langle \psi_0 | Z_B | \psi_0 \rangle = 0 \quad (23)$$

به‌عنوان مثال،  $\langle \psi_0 | X_A | \psi_0 \rangle$  را در نظر بگیرید. جملهٔ مرتبهٔ صفر،

$$\langle \varphi_{1,0,0}^A; \varphi_{1,0,0}^B | X_A | \varphi_{1,0,0}^A; \varphi_{1,0,0}^B \rangle$$

صفر است، زیرا برابر است با مقدار متوسط  $X_A$  در حالت پایهٔ  $(\varphi_{1,0,0}^A)$ . برای محاسبه تا مرتبهٔ اول، جمع‌بندی آمده در فرمول (۱۸) باید منظور شود. چون  $W_{dd}$  تنها شامل حاصلضربهایی از نوع  $X_A X_B$  است، ضرایب کتهای  $(\varphi_{1,0,0}^A; \varphi_{n',l',m'}^B)$  و  $(\varphi_{n,l,m}^A; \varphi_{1,0,0}^B)$  در این جمع‌بندی صفر خواهند بود. بنابراین، جملات مرتبهٔ اول که می‌توانند مخالف صفر باشند متناسب‌اند با

$$\langle \varphi_{n,l,m}^A; \varphi_{n',l',m'}^B | X_A | \varphi_{1,0,0}^A; \varphi_{1,0,0}^B \rangle \quad \text{با} \quad (l \neq 0 \text{ و } l' \neq 0)$$

تمام این جملات صفرند، زیرا  $X_A$  روی  $(\varphi_{1,0,0}^A)$  عمل می‌کند و برای  $l' \neq 0$  داریم:  $\langle \varphi_{n',l',m'}^B | \varphi_{1,0,0}^B \rangle = 0$



بنابراین، حتی در حضور یک برهم‌کنش، مقادیر متوسط مؤلفه‌های هر دوقطبی صفرند. این مطلب شگفت‌آور نیست: در تعبیر بخش ۲-ج-۱، دوقطبی القاء شده در  $(B)$  توسط میدان دوقطبی  $(A)$ ، مانند این میدان به‌طور کتره‌ای افت‌وخیزی می‌کند، و در نتیجه دارای یک مقدار متوسط صفر است.

حال، از طرف دیگر، با محاسبه مقدار متوسط یک حاصلضرب از دو مؤلفه، یکی نسبت به دوقطبی  $(A)$  و دیگری نسبت به دوقطبی  $(B)$ ، نشان می‌دهیم که دو دوقطبی با یکدیگر همبسته‌اند. به‌عنوان مثال،  $\langle X_A X_B + Y_A Y_B - 2Z_A Z_B | \psi_0 \rangle$ ،  $\psi_0$  را، که بنابر (۱۲) چیزی جز  $R^2/e^2 \langle \psi_0 | W_{ad} | \psi_0 \rangle$  نیست، محاسبه خواهیم کرد. با استفاده از (۱۸) و در نظر گرفتن (۱۵) و (۱۶)، بلافاصله داریم

$$\langle \psi_0 | (X_A X_B + Y_A Y_B - 2Z_A Z_B) | \psi_0 \rangle = 2\epsilon_1 \frac{R^2}{e^2} \neq 0 \quad (24)$$

بنابراین، مقادیر متوسط حاصلضربهای  $X_A X_B$ ،  $Y_A Y_B$  و  $Z_A Z_B$ ، از آنجا که بنابر (۲۳) عبارت‌اند از حاصلضرب مقادیر متوسط  $\langle X_A \rangle \langle X_B \rangle$ ،  $\langle Y_A \rangle \langle Y_B \rangle$  و  $\langle Z_A \rangle \langle Z_B \rangle$ ، صفر نیستند. این امر، وجود یک همبستگی بین دو دوقطبی را ثابت می‌کند.

### ۳. تغییرات بلندبرد نیروهای وان دروالس

از مطالب بخش ۲-ج-۱ به‌این نتیجه می‌رسیم که اگر دو اتم، خیلی دور از یکدیگر باشند، محاسبات اخیر دیگر معتبر نخواهند بود. میدان ناشی از  $(A)$  و "متعکس" شده توسط  $(B)$ ، با یک تأخیر زمانی ناشی از انتشار  $(A) \rightarrow (B) \rightarrow (A)$ ، به  $(A)$  برمی‌گردد، و حال آنکه، ما در بحثهای پیش، برهم‌کنشها را لحظه‌ای فرض کرده‌ایم.

هنگامی که این زمان انتشار از مرتبه زمانهای مشخصه تحول اتم باشد، یعنی، از مرتبه  $2\pi/\omega_{n_1}$ ، که در آن  $\omega_{n_1} = (E_n - E_1)/\hbar$  معرف یک پسامد زاویه‌ای بور است، دیگر نمی‌توان از آن صرف‌نظر کرد. به‌عبارت دیگر، در محاسبات انجام‌شده در این مکمل، فرض شده است که فاصله  $R$  بین دو اتم، به‌مراتب کوچکتر از طول‌موجهای  $2\pi c/\omega_{n_1}$  طیف این اتمها (در حدود  $1000 \text{ \AA}$ ) است.

محاسبه‌ای که آثار انتشار را در نظر می‌گیرد، به یک انرژی برهم‌کنشی می‌رسد که در فواصل دور، به‌صورت  $1/R^7$  کاهش می‌یابد. لذا، قانون  $1/R^6$ ، که قبلاً پیدا کردیم، در مورد فواصل میان‌برد، نه خیلی زیاد (به‌خاطر تأخیر زمانی) و نه خیلی کم (برای جلوگیری از روی هم‌افتادگی تابع موجها)، قابل کاربرد است.

۳. نیروهای وان دروالس بین یک اتم هیدروژن در حالت  $1s$  و یک اتم هیدروژن در حالت  $2p$

(الف) انرژیهای حالت‌های مانای سیستم دو اتمی- اثر تشدید

اولین تراز برانگیخته هامیلتونی ناممکن  $H_{0A} + H_{0B}$ ، هشت بار واگن است. ویژه‌ی فضای وابسته به آن، از هشت حالت  $\{|\varphi_{1,0,0}^A; \varphi_{2,1,m}^B\rangle; |\varphi_{2,1,m}^A; \varphi_{1,0,0}^B\rangle; |\varphi_{1,0,0}^A; \varphi_{1,0,0}^B\rangle\}$  با  $m = -1, 0, +1$ ؛  $\{m' = -1, 0, +1\}$ ، که مربوط به وضعیتی هستند که در آن یکی از دو اتم در حالت پایه قرار داشته و دیگری در حالتی از تراز  $n = 2$  است، به وجود آمده است.

بنابر نظریهٔ اختلال برای یک حالت واگن، باید برای به دست آوردن اثر مرتبهٔ اول  $W_{dd}$ ، ماتریس  $8 \times 8$  معرف محدود بودن  $W_{dd}$  به ویژه‌ی فضای قطری کنیم. نشان خواهیم داد که تنها عناصر ماتریسی غیر صفر  $W_{dd}$  آنهایی هستند که یک حالت  $(|\varphi_{1,0,0}^A; \varphi_{2,1,m}^B\rangle)$  را به حالت  $(|\varphi_{2,1,m}^A; \varphi_{1,0,0}^B\rangle)$  مربوط می‌کنند. عملگرهای  $X_A, Y_A, Z_A$  که در عبارت  $W_{dd}$  وجود دارند، فردند و از این رو می‌توانند  $(|\varphi_{1,0,0}^A\rangle)$  را فقط به یکی از حالت‌های  $(|\varphi_{2,1,m}^A\rangle)$  جفت کنند؛ استدلال مشابهی در مورد  $Z_B, Y_B, X_B$  صادق است. بالاخره، برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی، تحت دوران دو اتم حول محور  $Oz$  که آنها را به هم متصل می‌کند، ناورد است؛ لذا  $W_{dd}$  با  $L_{Az} + L_{Bz}$  جابه‌جا می‌شود، و در این صورت، تنها می‌تواند دو حالتی را به هم متصل کند که برای آنها مجموع ویژه‌مقدارهای  $L_{Bz}$  و  $L_{Az}$  یکسان باشند.

از این رو، ماتریس  $8 \times 8$  فوق می‌تواند به چهار ماتریس  $2 \times 2$  تقسیم شود. یکی از آنها کلاً صفر است (ماتریسی که مربوط به حالت‌های  $2s$  است)، و سه‌تای دیگر به صورت زیر هستند

$$\begin{pmatrix} 0 & k_m/R^2 \\ k_m/R^2 & 0 \end{pmatrix} \quad (25)$$

که در آن قرار داده‌ایم

$$\langle \varphi_{1,0,0}^A; \varphi_{2,1,m}^B | W_{dd} | \varphi_{2,1,m}^A; \varphi_{1,0,0}^B \rangle = \frac{k_m}{R^2} \quad (26)$$

$k_m$  یک ثابت قابل محاسبه، از مرتبهٔ  $e^2 a_0^2$  است که در اینجا آن را بررسی نخواهیم کرد. می‌توانیم بلافاصله ماتریس (۲۵) را قطری کنیم و ویژه‌مقدارهای  $+k_m/R^2$  و  $-k_m/R^2$

که، به ترتیب وابسته به ویژه حالت‌های

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\varphi_{1,0,0}^A; \varphi_{1,1,m}^B\rangle + |\varphi_{1,1,m}^A; \varphi_{1,0,0}^B\rangle)$$

و

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\varphi_{1,0,0}^A; \varphi_{1,1,m}^B\rangle - |\varphi_{1,1,m}^A; \varphi_{1,0,0}^B\rangle)$$

هستند، را به دست بیاوریم. از آن، نتایج مهم زیر حاصل می‌شود:

— انرژی برهم‌کنش، به جای  $1/R^6$  به صورت  $1/R^3$  تغییر می‌کند، زیرا اکنون  $W_{dd}$ ، انرژیها را تا مرتبه اول تغییر می‌دهد. بنابراین، نیروهای وان دروالس در این مورد از نیروهای وان دروالس میان دو اتم هیدروژن واقع در حالت ۱s اهمیت بیشتری دارند (اثر تشدید بین دو حالت مختلف سیستم کل با انرژی نامختل یکسان).

— علامت برهم‌کنش می‌تواند مثبت یا منفی باشد (ویژه مقدرهای  $+k_m/R^2$  و  $-k_m/R^2$ ).  
بنابراین، برای حالت‌هایی از سیستم دواتمی، جذب، و برای حالت‌هایی دفع وجود دارد.

(ب) انتقال برانگیختگی از یک اتم به اتم دیگر

دو حالت  $|\varphi_{1,0,0}^A; \varphi_{1,1,m}^B\rangle$  و  $|\varphi_{1,1,m}^A; \varphi_{1,0,0}^B\rangle$  دارای انرژیهای نامختل یکسان‌اند و توسط یک اختلال غیرقطری به هم جفت شده‌اند. بنابر نتایج کلی بخش ۳-۴ از فصل ۴ (سیستم دوترازی، می‌دانیم که سیستم از یک تراز به تراز دیگر، با بسامدی متناسب با جفت‌شدگی، نوسان می‌کند.

بنابراین، اگر سیستم در  $t = 0$ ، از حالت  $|\varphi_{1,0,0}^A; \varphi_{1,1,m}^B\rangle$  شروع کند. پس از یک زمان معین (هرچه  $R$  بزرگتر باشد، این مدت زمان طولانی‌تر است) به حالت  $|\varphi_{1,1,m}^A; \varphi_{1,0,0}^B\rangle$  می‌رسد. بنابراین، برانگیختگی از (B) به (A) می‌رود، سپس به (B) برمی‌گردد و الی‌آخر.

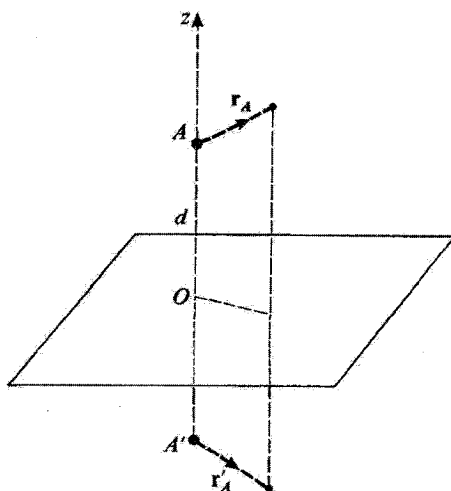
یادداشت:

اگر دو اتم ثابت نباشند و مثلاً به هم برخورد کنند،  $R$  با زمان تغییر می‌کند و دیگر عبور برانگیختگی از یک اتم به اتم دیگر، تلاوبی نخواهد بود. این برخوردها، که برخوردهای تشدید می‌شوند، در پهن‌ساختن خطوط طیفی نقش مهمی ایفا می‌کنند.

## ۴. برهم‌کنش یک اتم هیدروژن در حالت پایه با یک دیوار رسانا

اینک یک تک‌اتم هیدروژن ( $A$ ) واقع در فاصله  $d$  از یک دیوار پنا به فرض کاملاً رسانا را در نظر می‌گیریم. خط عمود بر دیوار را که از  $A$  می‌گذرد، محور  $Oz$  انتخاب می‌کنیم (شکل ۲). فرض بر این است که فاصله  $d$  خیلی بزرگتر از ابعاد اتمی باشد، به طوری که بتوان از ساختار اتمی دیوار صرف‌نظر کرد، و می‌توانیم فرض کنیم که اتم با تصویر الکتریکی خود در آن طرف دیوار (یعنی، با یک اتم متقارن با بارهای مخالف) برهم‌کنش می‌کند. انرژی برهم‌کنش دوقطبی بین اتم و دیوار را می‌توانیم با جایگزینیهای

$$\begin{cases} e^{\pm} \rightarrow -e^{\pm} \\ R \rightarrow 2d \\ X_B \rightarrow X'_A = X_A \\ Y_B \rightarrow Y'_A = Y_A \\ Z_B \rightarrow Z'_A = -Z_A \end{cases} \quad (27)$$



شکل ۲ برای محاسبه انرژی برهم‌کنش یک اتم هیدروژن با یک دیوار کاملاً رسانا، می‌توانیم فرض کنیم که گشتاور دوقطبی الکتریکی  $q r_A$  اتم با تصویر الکتریکی  $-q r'_A$  خود برهم‌کنش می‌کند ( $d$  فاصله بین پروتون  $A$  و دیوار است).

(تغییر  $e^z$  به  $-e^z$  به خاطر اختلاف علامت بارهای تصویری است) در رابطه (۱۲)، به آسانی به دست می‌آوریم. در این صورت خواهیم داشت

$$W = -\frac{e^z}{\lambda d^z} (X_A^z + Y_A^z + z Z_A^z) \quad (28)$$

که معرف انرژی برهم‌کنش اتم با دیوار است [W تنها روی درجات آزادی (A) عمل می‌کند]. اگر اتم در حالت پایه‌اش قرار داشته باشد، در این صورت، تصحیح انرژی تا مرتبه اول نسبت به W برابر است با

$$\epsilon'_1 = \langle \varphi_{1,0,0} | W | \varphi_{1,0,0} \rangle \quad (29)$$

با استفاده از تقارن گروهی حالت ۱s، داریم

$$\epsilon'_1 = -\frac{e^z}{\lambda d^z} \langle \varphi_{1,0,0} | \frac{\mathbf{R}_A^z}{r} | \varphi_{1,0,0} \rangle = -\frac{e^z a_0^z}{z d^z} \quad (30)$$

ملاحظه می‌کنیم که اتم، توسط دیوار جذب می‌شود؛ انرژی جاذبه به صورت  $1/d^z$  تغییر می‌کند، و لذا نیروی جاذبه به صورت  $1/d^z$  تغییر خواهد کرد.

این حقیقت که W، حتی تا مرتبه اول دارای تأثیر است را می‌توان به سادگی از بحث بخش ۲-ج، استنباط کرد. در این مورد، یک همبستگی کامل بین دو دوقطبی وجود دارد، زیرا دوقطبیها تصویرهای یکدیگرند.

مراجع برای مطالعه بیشتر

Kittel (13.2), chap. 3, p. 82; Davydov (1.20); chap. XII, §§124 and 125; Langbein (12.9).

For a discussion of retardation effects, see: Power (2.11), §§ 7.5 and 8.4 (quantum electrodynamic approach); Landau and Lifshitz (7.12), chap. XIII, §90 (electromagnetic fluctuation approach).

See also Derjaguin's article (12.12).

## مکمل ۴

### اثر حجمی: تأثیر گسترش فضایی هسته بر ترازهای اتمی

۱. تصحیح مرتبه اول انرژی

الف) محاسبه تصحیح

ب) بحث

۲. کاربرد در مورد چند سیستم هیدروژن مانند

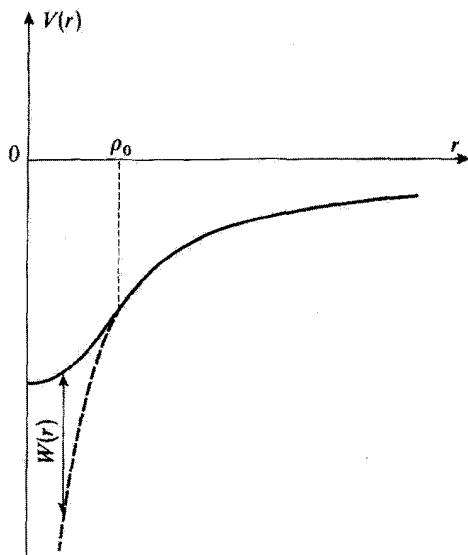
الف) اتم هیدروژن و یونهای هیدروژن مانند

ب) اتمهای میونی

ترازهای انرژی و حالت‌های پایدار اتم هیدروژن در فصل ۷ را، با این فرض بررسی کردیم که پروتون یک ذره نقطه‌ای باردار است که یک پتانسیل الکتروستاتیکی کولنی  $1/r$  ایجاد می‌کند. در واقع، این فرض کاملاً درستی نیست. پروتون، دقیقاً یک بار نقطه‌ای نیست، بار آن، حجم معینی (در حدود  $1$  فرمی [ $10^{-13}$  cm =  $1$  فرمی]) را اشغال می‌کند. وقتی یک الکترون، فوق‌العاده به مرکز پروتون نزدیک باشد، پتانسیلی را "می‌بیند" که تغییر آن دیگر به صورت  $1/r$  نیست و به توزیع فضایی بار وابسته به پروتون بستگی دارد. به علاوه، این مطلب برای تمام اتمها صادق است: پتانسیل الکتروستاتیکی در داخل حجم هسته، به چگونگی توزیع بارها بستگی دارد. بنابراین، انتظار داریم که این توزیع، بر ترازهای انرژی اتمی، که توسط پتانسیلی که الکترونها در تمام نقاط فضا تحت تأثیر آن هستند تعیین می‌گردد، تأثیر گذارد: این همان چیزی است که "اثر حجمی" نامیده می‌شود. بنابراین، مطالعه تجربی و نظری یک چنین اثری حائز اهمیت است، زیرا این بررسی می‌تواند اطلاعاتی در مورد ساختار داخلی هسته‌ها فراهم بیاورد.

در این مکمل، یک بررسی ساده‌شده از اثر حجمی اتمهای هیدروژن مانند را ارائه خواهیم کرد. برای اینکه یک دید کلی از مرتبه بزرگی انتقال انرژیهای حاصل داشته باشیم، مطالعه خود را به مدلی محدود خواهیم کرد که در آن، هسته توسط کره‌ای به شعاع  $\rho_0$  نشان داده می‌شود و در آن، بار  $-Ze$  به طور یکنواخت توزیع شده است. در این مدل، پتانسیلی که توسط هسته ایجاد می‌شود عبارت است از (مکمل ۱ از فصل ۵، بخش ۴-ب)

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{r} & \text{برای } r \geq \rho_0 \\ \frac{Ze^2}{2\rho_0} \left[ \left( \frac{r}{\rho_0} \right)^2 - 3 \right] & \text{برای } r \leq \rho_0 \end{cases} \quad (1)$$



شکل ۱ تغییرات پتانسیل الکتروستاتیکی ایجادشده توسط توزیع بار  $Zq$ -ی هسته، که فرض می‌شود به‌طور یکنواخت در داخل کره‌ای به شعاع  $\rho_0$  توزیع شده باشد، نسبت به  $r$  برای  $r \leq \rho_0$  پتانسیل به شکل سهمی است. برای  $r \geq \rho_0$  پتانسیل، یک پتانسیل کولنی است [ادامه این پتانسیل کولنی به ناحیه  $r \leq \rho_0$  توسط خط چین نشان داده شده است:  $W(r)$  برابر است با تفاضل  $V(r)$  و پتانسیل کولنی].

(قرار داده‌ایم:  $e^2 = q^2/4\pi\epsilon_0$ ). منحنی تغییرات  $V(r)$  نسبت به  $r$  در شکل ۱ نشان داده شده است.

حل دقیق معادله شرودینگر برای الکترونی که تحت تأثیر چنین پتانسیلی قرار دارد، یک مسئله پیچیده است. از این‌رو، به یک حل تقریبی، مبنی بر نظریه اختلال، قناعت خواهیم کرد. در اولین تقریب، پتانسیل را به صورت یک پتانسیل کولنی در نظر خواهیم گرفت [که با قرار دادن  $\rho_0 = \infty$  در (۱) حاصل می‌شود]. در این صورت، ترازهای انرژی اتم هیدروژن همانهایی هستند که در بخش ۷-۳ از فصل ۷ به دست آوردیم. اختلاف  $W(r)$  بین پتانسیل  $V(r)$  در رابطه (۱) و پتانسیل کولنی را به عنوان یک اختلال در نظر می‌گیریم. وقتی  $r$  از شعاع  $\rho_0$  هسته بزرگتر باشد، این اختلاف صفر است. بنابراین معقول به نظر می‌رسد که باعث ایجاد یک انتقال کوچک در ترازهای اتمی شود (تابع‌موجهای مربوط تا ابعادی از مرتبه  $\rho_0 \gg a_0$  گسترده‌اند)، که بررسی توسط نظریه اختلال مرتبه اول را توجیه می‌کند.

۱. تصحیح مرتبه اول انرژی  
الف) محاسبه تصحیح

بنا به تعریف،  $W(r)$  برابر است با

$$W(r) = \begin{cases} \frac{Ze^2}{2\rho_0} \left[ \left( \frac{r}{\rho_0} \right)^2 + \frac{2\rho_0}{r} - 3 \right] & 0 \leq r \leq \rho_0 \\ 0 & r \geq \rho_0 \end{cases} \quad (2)$$

فرض کنید حالت‌های مانای اتم هیدروژن مانند در غیاب اختلال  $W$ ،  $\langle \varphi_{n,l,m} |$  باشد. برای محاسبه اثر  $W$  تا مرتبه اول، باید عناصر ماتریسی زیر را حساب کنیم

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{n,l,m} | W | \varphi_{n,l',m'} \rangle &= \int d\Omega Y_l^{m*}(\Omega) Y_{l'}^{m'}(\Omega) \\ &\times \int_0^\infty r^2 dr R_{n,l}^*(r) R_{n,l'}(r) W(r) \end{aligned} \quad (3)$$

در این رابطه، انتگرال زاویه‌ای برابر است با  $\delta_{ll'} \delta_{mm'}$ . برای ساده کردن انتگرال شعاعی، از تقریب استفاده و فرض می‌کنیم<sup>۱</sup>

$$\rho_0 \ll a_0 \quad (4)$$

یعنی، اینکه ناحیه  $r \leq \rho_0$  که در آن  $W(r)$  صفر نیست، به مراتب از گستردگی فضایی توابع  $R_{n,l}(r)$  کوچکتر باشد. در این صورت، وقتی  $r \leq \rho_0$  باشد، داریم

$$R_{n,l}(r) \simeq R_{n,l}(0) \quad (5)$$

بنابراین، انتگرال شعاعی را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$I = \frac{Ze^2}{2\rho_0} |R_{n,l}(0)|^2 \int_0^{\rho_0} r^2 dr \left[ \left( \frac{r}{\rho_0} \right)^2 + \frac{2\rho_0}{r} - 3 \right] \quad (6)$$

۱. در مورد اتم هیدروژن، مسلماً این چنین است. شرط (۴) را در بخش ۲ دقیقتر بررسی خواهیم کرد.



که از آن نتیجه می‌شود

$$I = \frac{Ze^{\nu}}{\gamma_0} \rho_0^{\nu} |R_{n,l}(\circ)|^2 \quad (7)$$

و

$$\langle \varphi_{n,l,m} | W | \varphi_{n,l',m'} \rangle = \frac{Ze^{\nu}}{\gamma_0} \rho_0^{\nu} |R_{n,l}(\circ)|^2 \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (8)$$

مشاهده می‌کنیم که ماتریس معرف  $W$  در زیر فضای  $\mathcal{E}_n$  متناظر با تراز  $n$  ام هامیلتونی نامختل قطری است. بنابراین، تصحیح مرتبه اول انرژی وابسته به هر حالت  $(\varphi_{n,l,m})$  را می‌توان به سادگی به صورت زیر نوشت

$$\Delta E_{n,l} = \frac{Ze^{\nu}}{\gamma_0} \rho_0^{\nu} |R_{n,l}(\circ)|^2 \quad (9)$$

این تصحیح به  $m$  بستگی ندارد<sup>۱</sup>. به علاوه، چون  $R_{n,l}(\circ)$  جز به ازای  $l = 0$  مساوی صفر است (فصل ۷، بخش ۷-۳-۴-ج، فقط حالت‌های  $s$  (حالت‌های  $l = 0$ ) به اندازه

$$\begin{aligned} \Delta E_{n,0} &= \frac{Ze^{\nu}}{\gamma_0} \rho_0^{\nu} |R_{n,0}(\circ)|^2 \\ &= \frac{2\pi Ze^{\nu}}{\delta} \rho_0^{\nu} |\varphi_{n,0,0}(\circ)|^2 \end{aligned} \quad (10)$$

انتقال پیدا می‌کند (در رابطه بالا از:  $Y_0^0 = 1/\sqrt{4\pi}$  استفاده شده است).

(ب) بحث

$\Delta E_{n,0}$  را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\Delta E_{n,0} = \frac{3}{\gamma_0} w \mathcal{P} \quad (11)$$

که در آن

$$w = \frac{Ze^{\nu}}{\rho_0} \quad (12)$$

۱. انتظار این نتیجه هم می‌رفت، زیرا، اختلال  $W$ ، که تحت دوران ناورد است، یک اسکالر است (مکمل ۲ از فصل ۶، بخش ۵ ب).

عبارت است از انرژی پتانسیل الکترون در فاصله  $\rho_0$  از مرکز هسته، و

$$\mathcal{P} = \frac{4}{3}\pi\rho_0^2 |\varphi_{n,0,0}(0)|^2 \quad (13)$$

احتمال یافتن الکترون در داخل هسته است.  $\mathcal{P}$  و  $w$  به این علت در (۱۱) وارد می‌شوند که اثر اختلال  $W(r)$  فقط در داخل هسته احساس می‌شود.

برای اینکه روش منتهی شده به (۱۰) و (۱۱)، سازگار باشد، تصحیح  $\Delta E_{n,0}$  باید خیلی از اختلاف انرژیهای ترازهای نامختل کوچکتر باشد. چون  $w$  خیلی بزرگ است (وقتی یک الکترون و یک پروتون خیلی به هم نزدیک باشند یکدیگر را قویاً جذب می‌کنند)، بنابراین  $\mathcal{P}$  باید فوق‌العاده کوچک باشد. قبل از اینکه به محاسبه دقیقتر بخش ۲ پردازیم، مرتبه بزرگی این کمیتها را ارزیابی خواهیم کرد. فرض کنید

$$a_0(Z) = \frac{\hbar^2}{Zme^2} \quad (14)$$

شعاع بور برای وقتی باشد که بار کل هسته  $-Zq$  است. اگر  $n$  خیلی بزرگ نباشد، تابع موجهای  $\varphi_{n,0,0}(r)$  عملاً در داخل ناحیه‌ای از فضا که حجم آن تقریباً  $[a_0(Z)]^3$  است، جایگزیده خواهند بود. برای هسته، حجم آن از مرتبه  $\rho_0^3$  است، به طوری که

$$\mathcal{P} \approx \left[ \frac{\rho_0}{a_0(Z)} \right]^2 \quad (15)$$

در این صورت از رابطه (۱۱) داریم

$$\begin{aligned} \Delta E_{n,0} &\approx \frac{Ze^2}{\rho_0} \left[ \frac{\rho_0}{a_0(Z)} \right]^2 \\ &= \frac{Ze^2}{a_0(Z)} \left[ \frac{\rho_0}{a_0(Z)} \right]^2 \end{aligned} \quad (16)$$

$Ze^2/a_0(Z)$  عبارت است از مرتبه بزرگی انرژی بستگی  $E_I(Z)$  اتم نامختل. لذا مقدار نسبی تصحیح برابر است با

$$\frac{\Delta E_{n,0}}{E_I(Z)} \approx \left[ \frac{\rho_0}{a_0(Z)} \right]^2 \quad (17)$$

اثر جمعی: تأثیر گسترش فضایی هسته بر ترازهای اتمی ۳۱۹

اگر شرط (۴) برقرار باشد، این تصحیح مسلماً خیلی کوچک خواهد بود. اینک برای چند مورد خاص آن را دقیق‌تر محاسبه خواهیم کرد.

۲. کاربرد در مورد چند سیستم هیدروژن مانند

الف) اتم هیدروژن و یونهای هیدروژن مانند

برای حالت پایه اتم هیدروژن، داریم [فصل ۷، رابطه ۹-۳۹-C]

$$R_{1,0}(r) = 2(a_0)^{-3/2} e^{-r/a_0} \quad (18)$$

که  $a_0$  از قرار دادن  $Z = 1$  در (۱۴) به دست می‌آید. در این صورت از فرمول (۱۰) داریم

$$\Delta E_{1,0} = \frac{2}{5} \frac{e^2}{a_0} \left( \frac{\rho_0}{a_0} \right)^2 = \frac{4}{5} E_I \left( \frac{\rho_0}{a_0} \right)^2 \quad (19)$$

حال، می‌دانیم که برای اتم هیدروژن

$$a_0 \simeq 0.53 \text{ \AA} = 5.3 \times 10^{-11} \text{ m} \quad (20)$$

به علاوه، شعاع  $\rho_0$  پروتون در حدود

$$\rho_0 (\text{پروتون}) \simeq 1F = 10^{-15} \text{ m} \quad (21)$$

است. اگر این مقادیر عددی را در (۱۹) قرار بدهیم، خواهیم داشت

$$\Delta E_{1,0} \simeq 4.5 \times 10^{-10} E_I \simeq 6 \times 10^{-9} \text{ eV} \quad (22)$$

بنابراین، نتیجه بسیار کوچک است.

برای یک یون هیدروژن مانند، هسته دارای بار  $-Zq$  است. پس می‌توانیم رابطه (۱۰) را به کار ببریم، به این ترتیب که در (۱۹)،  $e^2$  را با  $Ze^2$  و  $a_0$  را با  $a_0/Z$  جایگزین کنیم. داریم

$$\Delta E_{1,0}(Z) = \frac{2}{5} \frac{Z^2 e^2}{a_0} \left[ \frac{\rho_0(A, Z)}{a_0} \times Z \right]^2 \quad (23)$$

که در آن  $\rho_0(A, Z)$  عبارت است از شعاع هسته متشکل از  $A$  نوکلئون (پروتون یا نوترون)، که  $Z$  نای آنها پروتون است. در عمل، تعداد نوکلئونهای یک هسته خیلی با  $Z$  اختلاف ندارد؛ به علاوه ویژگی "اشباع چگالی هسته‌ای" توسط رابطه تقریبی زیر بیان می‌شود

$$\rho_0(A, Z) \propto A^{1/3} \propto Z^{1/3} \quad (24)$$

پس، تغییر تصحیح انرژی نسبت به  $Z$  با رابطه زیر داده می‌شود

$$\Delta E_{\nu,0}(Z) \propto Z^{14/3} \quad (25)$$

یا

$$\frac{\Delta E_{\nu,0}(Z)}{E_I(Z)} \propto Z^{8/3} \quad (26)$$

بنابراین،  $\Delta E_{\nu,0}(Z)$  تحت اثر چند عامل هماهنگ، به سرعت با  $Z$  تغییر می‌کند: وقتی  $Z$  افزایش می‌یابد،  $a$  کاهش و  $\rho_0$  افزایش پیدا می‌کند. از این رو، اثر حجمی برای یونهای هیدروژن مانند سنگین به طور قابل ملاحظه‌ای از اثر حجمی برای هیدروژن بزرگتر است.

یادداشت:

اثر حجمی برای تمامی سایر اتمها نیز وجود دارد. این اثر عامل یک انتقال ایزوتوپی خطوط طیف گسیلی است. برای دو ایزوتوپ متمایز یک عنصر شیمیایی، تعداد  $Z$  پروتونهای دو هسته یکسان، اما تعداد نوترونهای آنها، یعنی  $A - Z$  متفاوت است؛ لذا توزیع فضایی بارهای هسته‌ای برای دو هسته یکسان نیست.

در واقع، برای اتمهای سبک، انتقال ایزوتوپی، در اصل ناشی از اثر جرم متناهی هسته‌ای است. (مکمل ۱ از فصل ۷، بخش ۱-الف-۱). از طرف دیگر، در مورد اتمهای سنگین (که برای آنها تغییر جرم کاهش یافته از یک ایزوتوپ به ایزوتوپ دیگر بسیار کوچک است)، اثر جرم متناهی کوچک است، با این همه اثر حجمی با  $Z$  افزایش پیدا می‌کند و غالب می‌شود. ■

(ب) اتمهای میونی

قبلاً چند ویژگی ساده از اتمهای میونی را مطالعه کردیم (مکمل ۱ از فصل ۵، بخش ۴ و مکمل ۱ از فصل ۷، بخش ۲-الف). مخصوصاً، اشاره کردیم که شعاع بور وابسته به آنها به طور مشخصی از

شعاع بور وابسته به اتمهای معمولی کوچکتر است (این مطلب از آنجا ناشی می‌شود که جرم میون  $\mu^-$  تقریباً ۲۰۷ برابر جرم الکترون است). از این رو، می‌توان با توجه به بحث کیفی بخش ۱-ب برای اتمهای میونی، اثر حجمی مهمی را انتظار داشت. ما این اثر را، با انتخاب دو مورد حدی، ارزیابی خواهیم کرد: یک اتم میونی سبک (هیدروژن) و یک اتم میونی سنگین (سرب).

### ۱. اتم میونی هیدروژن

در این مورد، شعاع بور برابر است با

$$a_0(\mu^-, p^+) \simeq \frac{a_0}{207} \quad (27)$$

یعنی، در حدود ۲۵۰ فرمی. بنابراین در این حالت، شعاع بور به‌طور کاملاً مشخصی بزرگتر از  $\rho_0$  باقی می‌ماند. اگر در (۱۹) به جای  $a_0$  مقدار  $a_0/207$  را قرار بدهیم به‌دست می‌آوریم

$$\Delta E_{\nu_0}(\mu^-, p^+) \simeq 1.9 \times 10^{-5} \times E_I(\mu^-, p^+) \simeq 5 \times 10^{-2} \text{eV} \quad (28)$$

هر چند اثر حجمی برای این اتم از اثر حجمی برای اتم هیدروژن معمولی خیلی بیشتر است، اما در ترازهای انرژی فقط تصحیح کوچکی ایجاد می‌کند.

### ۲. اتم میونی سرب

شعاع بور اتم میونی سرب برابر است با [مکمل ۱ از فصل ۵، رابطه (۲۵)]

$$a_0(\mu^-, \text{Pb}) \simeq 3F = 3 \times 10^{-15} \text{m} \quad (29)$$

اکنون، میون  $\mu^-$  خیلی به هسته سرب نزدیک است؛ از این رو، عملاً تحت تأثیر دافعه الکترونیهای اتمی واقع در فواصل دور قرار نمی‌گیرد. این نکته، ممکن است ما را به این باور برساند که رابطه (۱۰)، که برای اتمها و یونهای هیدروژن مانند ثابت کردیم، مستقیماً در این مورد نیز قابل اعمال است. اما در واقع، چنین نیست، زیرا شعاع هسته سرب برابر است با

$$\rho_0(\text{Pb}) \simeq 1.75F = 1.75 \times 10^{-15} \text{m} \quad (30)$$

که در مقایسه با  $a_0(\mu^-, \text{Pb})$  کوچک نیست. بنابراین، معادله (۱۰) منجر به تصحیحات بزرگتری (چندین MeV)، از همان مرتبه بزرگی انرژی  $E_I(\mu^-, \text{Pb})$  رو می‌شود. لذا، می‌بینیم که، در این

مورد، دیگر نمی‌توان اثر حجمی را به‌عنوان یک اختلال در نظر گرفت (بحث بخش ۴ از مکمل ۱ فصل ۵). برای محاسبه ترازهای انرژی، لازم است که پتانسیل  $V(r)$  را دقیقاً بدانیم و معادله شرودینگر مربوط را حل کنیم.

بنابراین، میون بیشتر در داخل هسته است تا در خارج آن، یعنی، بنا بر (۱)، در ناحیه‌ای که پتانسیل در آن به‌شکل سهمی است. در تقریب اول، می‌توانیم پتانسیل را در همه جا به‌صورت سهمی در نظر بگیریم (کاری که در مکمل ۱ از فصل ۵) و سپس اختلاف میان پتانسیل واقعی و پتانسیل سهمی‌شکل را برای  $r \geq \rho$  به‌صورت یک اختلال تلقی کنیم. لیکن، گسترده‌گی تابع موج مربوط به این پتانسیل، آن‌قدر کوچکتر از  $\rho$  نیست تا چنین تقریبی منجر به نتایج دقیق شود، و تنها روش معتبر عبارت از حل معادله شرودینگر مربوط به پتانسیل واقعی است.

مراجع برای مطالعه بیشتر

اثر حجمی ایزوتوپی:

The isotopic volume effect: Kuhn (11.1), chap. VI, §C-3; Sobel'man (11.12), chap 6, §24.

اتمهای میونی (که بعضی مواقع آنها، فیزیک نامیده می‌شوند):

Cagnac and Pebay-Peyroula (11.2), chap. XIX, §7-C; De Benedetti (11.12); Wiegand (11.22); Weissenberg (16.19), §4-2.

# مکمل ۵

## روش وردشی

### ۱. اصل روش

الف) یک ویژگی از حالت پایه یک سیستم

ب) تعمیم: قضیه ریتز

ج) مورد خاصی که توابع آزمایشی تشکیل یک زیرفضا می دهند

۲. کاربرد در مورد یک مثال ساده

الف) توابع آزمایشی نمایی

ب) توابع آزمایشی گویا

۳. بحث

نظریه اختلال که در فصل ۱۱ بررسی کردیم، تنها روش تقریبی کلی قابل کاربرد در مورد سیستمهای پایستار نیست. در اینجا، به تشریح مختصر یکی دیگر از این روشها، که کاربردهای متعددی، بخصوص در فیزیک اتمی و مولکولی فیزیک هسته‌ای و فیزیک حالت جامد دارد، خواهیم پرداخت. ابتدا، در بخش ۱، اساس روش وردشی را ذکر می‌کنیم. سپس، از مثال ساده نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی برای نشان دادن جنبه‌های اساسی آن (بخش ۲)، که در بخش ۳ به اختصار بحث خواهیم کرد، استفاده می‌کنیم. در مکملهای ۶ و ۷ از فصل ۱۱، روش وردشی را در مورد مدل‌های ساده‌ای که ما را قادر به فهم رفتار الکترون‌ها در یک جامد و پیوند شیمیایی می‌کنند، اعمال می‌کنیم.

### ۱. اصل روش

یک سیستم فیزیکی دلخواه را در نظر بگیرید که هامیلتونی  $H$  آن مستقل از زمان باشد. برای ساده کردن نمادگذاری، فرض خواهیم کرد که طیف  $H$  کلاً گسسته و ناواکن باشد

$$H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle; n = 0, 1, 2, \dots \quad (1)$$

اگرچه هامیلتونی  $H$  معلوم است، اما الزاماً ویژه‌مقدارهای  $E_n$  و ویژه‌حالت‌های مربوط، چنین نیستند. البته، روش وردشی مفیدترین روش در مواردی است که در آنها نمی‌دانیم چگونه  $H$  را دقیقاً قطری کنیم.

الف) یک ویژگی از حالت پایه یک سیستم

یک کت دلخواه  $|\psi\rangle$  از فضای حالت سیستم را در نظر بگیرید. مقدار توسط هامیلتونی  $H$  در حالت  $|\psi\rangle$  طوری است که

$$\langle H \rangle = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0 \quad (2)$$

که  $E_0$  کوچکترین ویژه مقدار  $H$  است. تساوی فقط به شرطی برقرار است که  $|\psi\rangle$  یک ویژه بردار  $H$  با ویژه مقدار  $E_0$  باشد.

برای اثبات نامساوی (۲)، کت  $|\psi\rangle$  را بر حسب ویژه حالت های  $H$  بسط می دهیم

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle \quad (3)$$

آنگاه داریم

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_n |c_n|^2 E_n \geq E_0 \sum_n |c_n|^2 \quad (4)$$

که با توجه به

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_n |c_n|^2 \quad (5)$$

نامساوی (۲) اثبات می شود. شرط لازم و کافی برای تبدیل شدن نامساوی (۴) به یک تساوی، این است که تمام ضرایب  $c_n$ ، به جز  $c_0$ ، صفر شوند؛ در این صورت،  $|\psi\rangle$  یک ویژه بردار  $H$  با ویژه مقدار  $E_0$  است.

این ویژگی، اساس یک روش تعیین تقریبی  $E_0$  است. رشته کتهای  $|\psi(\alpha)\rangle$  را که به تعداد معینی از پارامترها، که آنها را به  $\alpha$  نمایش می دهیم، بستگی دارند، انتخاب می کنیم (از دیدگاه نظری به طور دلخواه، ولی در واقع با استفاده از ضوابط فیزیکی). مقدار متوسط  $\langle H \rangle(\alpha)$  هامیلتونی  $H$  را در این حالتها محاسبه می کنیم، و سپس  $\langle H \rangle(\alpha)$  را نسبت به پارامترهای  $\alpha$  کمینه می سازیم. مقدار کمیتی که به این ترتیب به دست می آید، تقریبی از انرژی  $E_0$  حالت پایه سیستم است. کتهای  $|\psi(\alpha)\rangle$  را، کتهای آزمایشی، و خود روش را، روش وردشی می نامیم.



یادداشت:

استدلال فوق را می‌توان به آسانی به مواردی که در آنها طیف  $H$  واگن، یا شامل یک قسمت پیوسته است، تعمیم داد. ■

ب) تعمیم: قضیهٔ ریتز

نشان خواهیم داد که، به‌طور کلی‌تر، مقدار متوسط هامیلتونی  $H$  در حوالی ویژه‌مقدارهای گسستهٔ آن، ماناست.

مقدار متوسط  $H$  در حالت  $|\psi\rangle$ ، یعنی

$$\langle H \rangle = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (۶)$$

را به صورت تابعی از بردار حالت  $|\psi\rangle$  در نظر بگیرید، و نمو  $\delta\langle H \rangle$  آن را وقتی  $|\psi\rangle$  به  $|\psi\rangle + |\delta\psi\rangle$  تبدیل می‌شود  $|\delta\psi\rangle$  بینهایت کوچک فرض می‌شود، محاسبه کنید. برای انجام این کار، (۶) را به صورت زیر می‌نویسیم

$$\langle H \rangle \langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi | H | \psi \rangle \quad (۷)$$

و از دو طرف این رابطه مشتق می‌گیریم

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi \rangle \delta\langle H \rangle + \langle H \rangle [\langle \psi | \delta\psi \rangle + \langle \delta\psi | \psi \rangle] \\ = \langle \psi | H | \delta\psi \rangle + \langle \delta\psi | H | \psi \rangle \end{aligned} \quad (۸)$$

چون  $\langle H \rangle$  یک عدد است

$$\langle \psi | \psi \rangle \delta\langle H \rangle = \langle \psi | [H - \langle H \rangle] | \delta\psi \rangle + \langle \delta\psi | [H - \langle H \rangle] | \psi \rangle \quad (۹)$$

مقدار متوسط  $\langle H \rangle$  وقتی مانا خواهد بود که داشته باشیم

$$\delta\langle H \rangle = 0 \quad (۱۰)$$

که بر طبق (۹)، به این معنی است که

$$\langle \psi | [H - \langle H \rangle] | \delta\psi \rangle + \langle \delta\psi | [H - \langle H \rangle] | \psi \rangle = 0 \quad (۱۱)$$

قرار می‌دهیم

$$|\varphi\rangle = [H - \langle H \rangle]|\psi\rangle \quad (12)$$

آنگاه، رابطه (۱۱) را می‌توانیم به صورت زیر بنویسیم

$$\langle \varphi | \delta \psi \rangle + \langle \delta \psi | \varphi \rangle = 0 \quad (13)$$

رابطه اخیر باید برای هرکت بینهایت کوچک  $|\delta \psi\rangle$  برقرار باشد. بخصوص اگر انتخاب کنیم

$$|\delta \psi\rangle = \delta \lambda |\varphi\rangle \quad (14)$$

(که در آن  $\delta \lambda$  یک عدد حقیقی بینهایت کوچک است)، رابطه (۱۳) خواهد شد

$$2\langle \varphi | \varphi \rangle \delta \lambda = 0 \quad (15)$$

بنابراین هیچ کت  $|\varphi\rangle$  صفر است و در نتیجه  $|\varphi\rangle$  باید صفر باشد. با در نظر گرفتن تعریف (۱۲)، این بدان معنی است که

$$H|\psi\rangle = \langle H \rangle |\psi\rangle \quad (16)$$

در نتیجه، مقدار متوسط  $\langle H \rangle$  تنها فقط در صورتی ماناست که بردار حالت  $|\psi\rangle$  که این مقدار متوسط متناسب به آن است که یک ویژه بردار  $H$  باشد، و مقادیر مانای  $\langle H \rangle$ ، ویژه مقدارهای هامیلتونی باشند.

از این رو، روش وردشی را می‌توانیم تعمیم بدهیم و برای تعیین تقریبی ویژه مقدارهای هامیلتونی  $H$  به کار ببریم. اگر تابع  $\langle H \rangle(\alpha)$  به دست آمده از کتهای آزمایشی  $|\psi(\alpha)\rangle$ ، دارای چند فرینه باشد، این فرینه‌ها مقادیر تقریبی بعضی از انرژیهای  $E_n$  آن را به دست می‌دهند (تمرین ۱۰ از مکمل ۸ فصل ۱۱).

ج) مورد خاصی که توابع آزمایشی تشکیل یک زیرفضا می‌دهند

فرض کنید مجموعه کتهای متعلق به یک زیرفضای برداری  $\mathcal{F}$  از فضای  $\mathcal{E}$  را به عنوان کتهای آزمایشی انتخاب کنیم. در این صورت، روش وردشی به حل معادله ویژه مقدار هامیلتونی  $H$  در داخل  $\mathcal{F}$  تقلیل می‌یابد، و نه دیگر در تمام  $\mathcal{E}$ .

برای مشاهده این نکته، استدلال بخش ۱-ب را، با محدود کردن آن به کتهای  $\langle \psi |$  از زیرفضای  $\mathcal{F}$ ، اعمال می‌کنیم. ماکزیموما و مینیموما  $\langle H \rangle$ ، که با  $\delta \langle H \rangle = 0$  مشخص می‌شوند، وقتی به دست می‌آیند که  $\langle \psi |$  یک ویژه‌بردار  $H$  در  $\mathcal{F}$  باشد. ویژه‌مقدارهای مربوط، روش تقریبی وردشی را برای ویژه‌مقدارهای واقعی  $H$  در  $\mathcal{E}$ ، تشکیل می‌دهند.

بر این واقعیت تأکید می‌کنیم که محدود بودن معادله ویژه‌مقدار  $H$  به زیرفضای  $\mathcal{F}$  از فضای حالت  $\mathcal{E}$ ، می‌تواند حل آن را به‌طور قابل‌ملاحظه‌ای آسان کند. با وجود این، اگر  $\mathcal{F}$  بد انتخاب شود، می‌تواند منجر به نتایجی شود که با ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای واقعی  $H$  در  $\mathcal{E}$  (بخش ۳) اختلاف زیادی داشته باشند. از این رو، زیرفضای  $\mathcal{F}$  را باید طوری انتخاب کنیم که مسئله را آن قدر ساده کند که قابل حل گردد، بدون اینکه در ماهیت فیزیکی مسئله تغییرات زیادی ایجاد کند. در بعضی موارد، امکان دارد که بتوان بررسی یک سیستم پیچیده را به بررسی یک سیستم دو ترازوی (فصل ۴)، یا حداقل به بررسی یک سیستم با تعداد ترازهای محدود، تقلیل داد. یک مثال مهم دیگر از این رویه، روش ترکیب خطی اوربیتالهای اتمی است که در فیزیک مولکولی به‌طور وسیعی به‌کار می‌رود. این روش اساساً مشتمل است بر (مکمل ۷ از فصل ۱۱) تعیین تابع‌موجهای الکترونیهای یک مولکول به‌صورت ترکیبهای خطی از ویژه‌تابع وابسته به اتمهای مختلف تشکیل‌دهنده مولکول که به‌صورت منزوی در نظر گرفته می‌شوند. لذا، این روش، جستجو برای حالت‌های مولکولی را به زیرفضایی که بر اساس معیارهای فیزیکی انتخاب می‌شود محدود می‌کند. همچنین، در مکمل ۶ از فصل ۱۱، یک ترکیب خطی از اوربیتالهای اتمی نسبت به یونهای مختلف تشکیل‌دهنده یک جامد را به‌عنوان یک تابع‌موج آزمایشی برای یک الکترون در این جامد، انتخاب خواهیم کرد.

یادداشت:

توجه کنید که نظریه اختلال مرتبه اول با این مورد خاص از روش وردشی مطابقت دارد: در این صورت  $\mathcal{F}$  یک ویژه‌زیرفضای هامیلتونی نامختل  $H_0$  است. ■

## ۲. کاربرد در مورد یک مثال ساده

برای نشان دادن بحث بخش ۱ و ارائه یک دید کلی از اعتبار تقریبهای به‌دست آمده از روش وردشی، این روش را در مورد نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی، که ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای آن معلوم‌اند (فصل ۵)، اعمال می‌کنیم. هامیلتونی

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (17)$$

را در نظر می‌گیریم و معادله ویژه‌مقدار آن را با محاسبات وردشی، به‌طور تقریبی حل می‌کنیم.

## الف) توابع آزمایشی نمایی

چون هامیلتونی (۱۷) زوج است، به سادگی می توان نشان داد که حالت پایه آن الزاماً توسط یک تابع موج زوج بیان خواهد شد. لذا، برای تعیین ویژگیهای این حالت پایه، توابع آزمایشی زوج انتخاب خواهیم کرد. به عنوان مثال، دسته توابع یک پارامتری زیر را در نظر می گیریم

$$\psi_{\alpha}(x) = e^{-\alpha x^2}; \quad \alpha > 0 \quad (18)$$

مربع هنج کت  $|\psi_{\alpha}\rangle$  برابر است با

$$\langle \psi_{\alpha} | \psi_{\alpha} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-2\alpha x^2} \quad (19)$$

و به دست می آوریم

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\alpha} | H | \psi_{\alpha} \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\alpha x^2} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right] e^{-\alpha x^2} \\ &= \left[ \frac{\hbar^2}{2m} \alpha + \frac{1}{2} m \omega^2 \frac{1}{\alpha} \right] \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-2\alpha x^2} \end{aligned} \quad (20)$$

بنابراین

$$\langle H \rangle(\alpha) = \frac{\hbar^2}{2m} \alpha + \frac{1}{2} m \omega^2 \frac{1}{\alpha} \quad (21)$$

مشتق تابع  $\langle H \rangle(\alpha)$  به ازاء

$$\alpha = \alpha_0 = \frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} \quad (22)$$

صفر می شود و در این صورت داریم

$$\langle H \rangle(\alpha_0) = \frac{1}{2} \hbar \omega \quad (23)$$

بنابراین مینیموم مقدار  $\langle H \rangle(\alpha)$  دقیقاً برابر با انرژی حالت پایه نوسانگر هماهنگ است. این نتیجه، ناشی از سادگی مسئله مورد مطالعه است: تابع موج حالت پایه اتفاقاً، یکی از توابع دسته آزمایشی

(۱۸) است، تابعی که به مقداری از پارامتر  $\alpha$  که با رابطه (۲۲) داده شده است مربوط می‌شود. روش وردشی، در این مورد، جواب دقیق مسئله را به دست می‌دهد (این امر، قضیه اثبات شده در بخش ۱-الف را نشان می‌دهد).

اگر بخواهیم اولین حالت برانگیخته  $E_1$  هامیلتونی (۱۷) را محاسبه کنیم (با تقریب، از جنبه نظری)، باید توابع آزمایشی‌ای را انتخاب کنیم که با تابع موج حالت پایه متعامد باشند. این مطلب از بحث بخش ۱-الف نتیجه می‌شود، که نشان می‌دهد اگر ضریب  $c_0$  صفر باشد، حد پایینی  $\langle H \rangle$  دیگر  $E_0$  نیست بلکه  $E_1$  است. بنابراین دسته توابع فرد آزمایشی زیر را انتخاب می‌کنیم

$$\psi_\alpha(x) = x e^{-\alpha x^2} \quad (24)$$

در این صورت

$$\langle \psi_\alpha | \psi_\alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 e^{-2\alpha x^2} \quad (25)$$

و

$$\langle \psi_\alpha | H | \psi_\alpha \rangle = \left[ \frac{\hbar^2}{2m} \times 3\alpha + \frac{1}{2} m \omega^2 \times \frac{3}{4\alpha} \right] \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 e^{-2\alpha x^2} \quad (26)$$

که از آن به دست می‌آید

$$\langle H \rangle(\alpha) = \frac{3\hbar^2}{2m} \alpha + \frac{3}{8} m \omega^2 \frac{1}{\alpha} \quad (27)$$

این تابع، به‌ازاء همان مقدار  $\alpha_0$  فوق [فرمول (۲۲)] دارای مینیمومی برابر با

$$\langle H \rangle(\alpha_0) = \frac{3}{4} \hbar \omega \quad (28)$$

است. در اینجا بار دیگر، دقیقاً انرژی  $E_1$  و ویژه‌حالت وابسته به آن را به دست آوردیم زیرا دسته توابع آزمایشی شامل تابع موج واقعی است.

ب) توابع آزمایشی گویا

محاسبات بخش ۲-الف، ما را با روش وردشی آشنا کرد، اما در حقیقت این محاسبات به ما اجازه نمی‌دهد تا درباره مؤثر بودن آن به‌عنوان یک روش تقریبی قضاوت کنیم، زیرا دسته توابع

انتخاب شده همواره شامل تابع موج دقیق بودند. از این رو اینک توابع آزمایشی ای را انتخاب می‌کنیم که از نوع کاملاً متفاوتی باشند. به عنوان مثال<sup>۱</sup>

$$\psi_a(x) = \frac{1}{x^2 + a}; \quad a > 0 \quad (29)$$

با یک محاسبه ساده نتیجه می‌شود

$$\langle \psi_a | \psi_a \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{(x^2 + a)^2} = \frac{\pi}{2a\sqrt{a}} \quad (30)$$

و بالاخره

$$\langle H \rangle(a) = \frac{\hbar^2}{4m} \frac{1}{a} + \frac{1}{2} m \omega^2 a \quad (31)$$

مقدار مینیموم این تابع به‌ازاء

$$a = a_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar}{m\omega} \quad (32)$$

به‌دست می‌آید و برابر است با

$$\langle H \rangle(a_0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \hbar\omega \quad (33)$$

لذا، این مقدار مینیموم  $\sqrt{2}$  برابر انرژی دقیق حالت پایه ( $\hbar\omega/2$ ) است. برای سنجش خطای مرتکب شده، می‌توانیم نسبت  $[\langle H \rangle(a_0) - \hbar\omega/2]$  بر کوانتوم انرژی  $\hbar\omega$  را محاسبه کنیم

$$\frac{\langle H \rangle(a_0) - \frac{1}{2} \hbar\omega}{\hbar\omega} = \frac{\sqrt{2} - 1}{2} \approx \%20 \quad (34)$$

### ۳. بحث

مثال بخش ۲-الف نشان می‌دهد که به‌آسانی می‌توان با شروع از کتهای آزمایشی انتخابی دلخواه، انرژی حالت پایه یک سیستم را، بدون خطای قابل ملاحظه‌ای، به‌دست آورد. این یکی از امتیازات

۱. علت این انتخاب این است که می‌خواهیم انتگرالهای مورد نیاز به‌طور تحلیلی قابل محاسبه باشند. البته، در اکثر موارد واقعی، به انتگرال‌گیری عددی متوسل می‌شویم.

عمده روش وردشی است. چون ویژه مقدار دقیق عبارت است از یک مینیموم مقدار متوسط  $\langle H \rangle$ ، شگفت‌انگیز نخواهد اگر که  $\langle H \rangle$  در نزدیکی این مینیموم تغییر بسیار زیادی نکند.

از طرف دیگر، با همین استدلال می‌توان نشان داد که، حالت "تقریبی" می‌تواند تا اندازه‌ای با ویژه حالت واقعی، اختلاف داشته باشد. بنابراین، در مثال بخش ۲-ب، تابع موج  $1/(x^2 + a_0)$  [که در آن  $a_0$  توسط فرمول (۳۲) داده می‌شود] برای مقادیر کوچک  $x$  خیلی به سرعت کاهش می‌یابد و هنگامی که  $x$  بزرگ می‌شود، خیلی به‌کندی کاهش می‌یابد. جدول ۱، به‌طور کمی مطلب کیفی بالا را تأیید می‌کند. این جدول، به‌ازاء مقادیر مختلف  $x^2$ ، مقادیر دقیق ویژه تابع بهنجار

$$\psi_0(x) = \left(\frac{2\alpha_0}{\pi}\right)^{1/2} e^{-\alpha_0 x^2}$$

[که در (۲۲) تعریف شده است] و مقادیر تقریبی ویژه تابع بهنجار

$$\sqrt{\frac{2}{\pi}}(a_0)^{3/2} \psi_0(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{(a_0)^{3/2}}{x^2 + a_0} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} (2\sqrt{2}\alpha_0)^{1/2} \frac{1}{1 + 2\sqrt{2}\alpha_0 x^2} \quad (35)$$

را می‌دهد.

به این ترتیب، هنگامی که ویژگیهای فیزیکی سیستم سوای انرژی آن‌را با استفاده، از حالت

جدول ۱

$x\sqrt{\alpha_0}$	$\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} e^{-\alpha_0 x^2}$	$\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{(2\sqrt{2})^{1/2}}{1 + 2\sqrt{2}\alpha_0 x^2}$
۰	۰٫۸۹۳	۱٫۰۳۴
$\frac{1}{2}$	۰٫۶۹۶	۰٫۶۰۵
۱	۰٫۳۲۹	۰٫۲۷۰
$\frac{3}{2}$	۰٫۰۹۴	۰٫۱۴۰
۲	۰٫۰۱۶	۰٫۰۸۳
$\frac{5}{2}$	۰٫۰۰۲	۰٫۰۵۵
۳	۰٫۰۰۰۱	۰٫۰۳۹

تقریبی به دست آمده از روش وردشی محاسبه می‌کنیم، باید خیلی با احتیاط عمل کنیم. اعتبار نتیجه به دست آمده، بسته به اینکه کمیت فیزیکی مورد نظر چه باشد، شدیداً تغییر می‌کند. به عنوان مثال، در مسئله خاصی که در اینجا بررسی می‌کنیم، ملاحظه می‌شود که مقدار متوسط تقریبی عملگر  $X^2$

$$\frac{\langle \psi_{\alpha_0} | X^2 | \psi_{\alpha_0} \rangle}{\langle \psi_{\alpha_0} | \psi_{\alpha_0} \rangle} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar}{m\omega} \quad (36)$$

با مقدار متوسط دقیق آن که  $\hbar/2m\omega$  است، تفاوت چندانی ندارد. از طرف دیگر، مقدار متوسط  $X^2$  برای تابع موج (۳۵) نامتناهی است، در حالی که، مسلماً برای تابع موج واقعی مقداری متناهی است. به طور کلی، جدول ۱ نشان می‌دهد که این تقریب برای تمام آن خواصی که قویاً به رفتار تابع موج در  $x \gtrsim 2/\sqrt{\alpha_0}$  بستگی دارند، خیلی نامناسب است.

اشکالی که الان ذکر کردیم جدیترین مشکل است زیرا اگر غیرممکن نباشد بسیار مشکل است که بتوان در یک محاسبه وردشی، خطا را بدون دانستن جواب دقیق مسئله حساب کرد (و مسلماً، اگر از روش وردشی استفاده می‌کنیم به این علت است که این جواب دقیق را نمی‌دانیم).

بنابراین روش وردشی یک روش تقریبی بسیار قابل انعطاف است که می‌توان آن را به وضعیتهای گوناگونی وفق داد، و نیز روشی است که مجال زیادی به پیش فیزیکی برای انتخاب کنه‌های آزمایشی می‌دهد. این روش، نسبتاً به آسانی، مقادیر خوبی برای انرژی می‌دهد، اما بردار حالت‌های تقریبی ممکن است بعضی جنبه‌های کاملاً نادرست غیرقابل پیش‌بینی به وجود آورند، و ما نمی‌توانیم این خطاها را برآورد کنیم. این روش، وقتی که بحث‌های فیزیکی، یک دید کلی از شکل کیفی یا نیمه کمی جوابها بدهند، از ارزش خاصی برخوردار است.

### مراجع برای مطالعه بیشتر

روش هارتری-فوک که غالباً در فیزیک مورد استفاده قرار می‌گیرد، کاربرد از روش وردشی است. رک، مراجع فصل ۶.

The Hartree-Fock method, often used in physics, is an application of the variational method. See references of chapter XI.

روش وردشی در فیزیک مولکولی دارای اهمیت اساسی است. مراجع مکمل ۶.



The variational method is of fundamental importance in molecular physics. See references of complement G<sub>XI</sub>.

برای ارائه ساده‌ای از کاربرد روش وردشی در فیزیک، به کتاب زیر رجوع کنید:

For a simple presentation of the use of variational principles in physics, see Feynman II (7.2), chap. 19.

## نوارهای انرژی الکترونها در جامدات: یک مدل ساده

۱. بررسی اولیه مسئله: بحث کیفی
  ۲. بررسی دقیقتر با استفاده از یک مدل ساده
- الف) محاسبه انرژیها و حالتهای مانا
۱. تشریح مدل؛ فرضیههای سادهکننده
  ۲. انرژیهای ممکن؛ مفهوم نوار انرژی
  ۳. حالتهای مانا؛ توابع بلاخ
  ۴. شرایط مرزی تناوبی

ب) بحث

یک بلور تشکیل یافته است از اتمهایی که به طور یکنواخت در فضا توزیع شده‌اند تا یک شبکه سه‌بعدی تناوبی تشکیل دهند. مطالعه نظری خواص یک بلور، که تعداد فوق‌العاده زیادی از ذرات (هسته‌ها و الکترونها) را در بر می‌گیرد، مسئله پیچیده‌ای را مطرح می‌کند که بررسی دقیق آن غیرعملی است. از این رو بایستی به روشهای تقریبی متوسل شویم.

اولین نمونه این روشهای تقریبی، تقریبی است از نوع تقریب بورن-اپنهایمر (که در بخش ۱ از مکمل ۱ فصل ۵ ملاحظه کردیم). این روش، قبل از هر چیز، مشتمل است بر ثابت فرض کردن محل هسته‌ها، که ما را قادر می‌سازد تا حالتهای مانای الکترونها را تحت تأثیر پتانسیل ایجادشده توسط هسته‌ها بررسی کنیم. حرکت هسته‌ها را تا مدتی بعد، پس از مطالعه انرژیهای الکترونی، بررسی نخواهیم کرد.<sup>۱</sup> در این مکمل، مطالعه خود را فقط به اولین مرحله این محاسبه محدود کرده، و فرض می‌کنیم هسته‌ها در محل گره‌های شبکه بلوری، بدون حرکت باشند.

اما، این مسئله هنوز هم فوق‌العاده پیچیده است. لازم است که انرژیهای یک سیستم الکترون را که تحت تأثیر یک پتانسیل تناوبی قرار دارند و با یکدیگر برهم‌کنش می‌کنند، محاسبه کنیم. سپس یک تقریب دوم به‌کار می‌بریم: فرض می‌کنیم که هر الکترون، در مکان  $\mathbf{r}_i$  تحت تأثیر یک پتانسیل  $V(\mathbf{r}_i)$  شامل جاذبه ناشی از هسته‌ها و اثر میانگین دافعه تمام الکترونها دیگر، است.<sup>۲</sup> بنابراین، مسئله خلاصه می‌شود به وضعیتی که در آن، ذرات مستقل در پتانسیلی با همان تناوب شبکه بلوری حرکت می‌کنند.

۱. به‌خاطر بیاورید که بررسی حرکت هسته‌ها منجر به معرفی مدهای ارتعاشی متعارف بلور می‌شود: فونونها (مکمل ۱۰ از فصل ۵).

۲. این تقریب از همان نوع تقریب "میدان مرکزی" برای اتمهای منزوی است (مکمل ۱ از فصل ۱۴، بخش ۱).

بنابراین مشخصه‌های فیزیکی یک بلور، در تقریب مرتبه اول، بستگی دارد به رفتار الکترونها مستقلی که تحت تأثیر یک پتانسیل تناوبی هستند، ممکن بود فکر کنیم که، مانند اتمهای منزوی، هر الکترون در قید یک هسته معین باقی می‌ماند. ولی خواهیم دید که، در واقع، وضعیت کاملاً متفاوت است، حتی اگر یک الکترون ابتدا در حوالی یک هسته خاص باشد، می‌تواند توسط اثر تونل به حوزه جاذبه هسته مجاور و سپس به حوزه جاذبه هسته بعدی حرکت کند، و الی آخر. در واقع، حالت‌های مانای الکترونها، در حوالی هیچ‌یک از هسته‌ها جایگزیده نیستند، بلکه کاملاً ناجایگزیده‌اند: چگالی احتمال وابسته به حالت‌های مانا به‌طور یکنواخت روی تمام هسته‌ها توزیع شده است.<sup>۱</sup> بنابراین، خواص الکترونی که در یک پتانسیل تناوبی قرار دارد بیشتر به خواص الکترونی که آزادانه در داخل بلور حرکت می‌کند شباهت دارد تا به خواص الکترون مقید به یک اتم خاص. یک چنین پدیده‌ای نمی‌تواند در مکانیک کلاسیک وجود داشته باشد: جهت ذره‌ای که در داخل بلور حرکت می‌کند در اثر تغییرات پتانسیل (مثلاً، در اثر برخورد با یک یون) مرتباً تغییر خواهد کرد. در مکانیک کوانتومی، تداخل امواج پراکنده شده توسط هسته‌های مختلف، امکان انتشار الکترون در داخل هسته را می‌دهد.

در بخش ۱، به‌طور بسیار کیفی، بررسی خواهیم کرد که وقتی اتمهای منزوی را به تدریج به یکدیگر نزدیک می‌کنیم تا تشکیل یک زنجیر خطی بدهند، چگونه ترازهای انرژی آنها تغییر می‌کنند. پس از آن، در بخش ۲، که باز برای سادگی، مطالعه خود را به مورد یک زنجیر خطی محدود خواهیم کرد، انرژیها و تابع موجها(ی) حالت‌های مانا را کمی دقیقتر محاسبه خواهیم کرد. محاسبه را در "تقریب پیوند قوی" انجام خواهیم داد: وقتی الکترون در یک مکان قرار دارد، می‌تواند از طریق اثر تونل به یکی از دو مکان مجاور خود برود. تقریب پیوند قوی، معادل این است که فرض کنیم احتمال تونل زنی آن کوچک است. با این روش، نتایجی به دست خواهیم آورد (ناجایگزیدگی حالت‌های مانا، پیدایش نوارهای انرژی مجاز و متنوع، و شکل توابع بلوخ) که در مدل‌های واقع‌بینانه‌تر (بلورهای سه‌بعدی، پیوندهای با قدرت دلخواه) معتبر باقی می‌مانند.

بررسی مبتنی بر روش "اختلال" که در اینجا به‌کار خواهیم برد، حالت‌های مانای الکترونها را از تابع موجها(ی) اتمی جایگزیده حول یونهای مختلف، به دست می‌دهد. مزیت این روش این است که نشان می‌دهد چگونه در یک جامد، ترازهای اتمی به تدریج به نوارهای انرژی تبدیل می‌شوند. معذک، توجه داشته باشید که وجود نوارهای انرژی را می‌توان مستقیماً از طبیعت تناوبی ساختاری که الکترون در آن قرار دارد نیز اثبات کرد (به‌عنوان مثال، مکمل ۱۵ از فصل ۳، که در آن کوانتایی

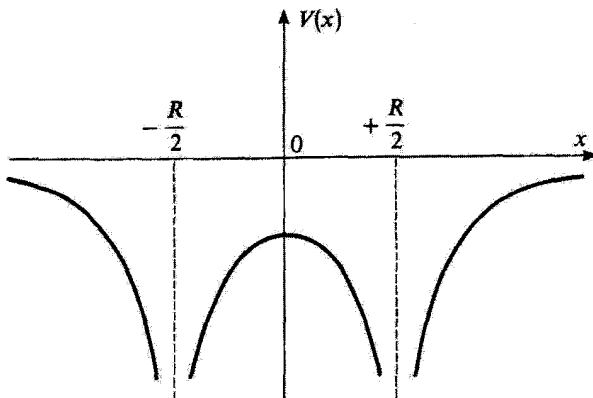
۱. این پدیده مشابه پدیده‌ای است که در بررسی مولکول آمونیاک (مکمل ۷ از فصل ۴) با آن مواجه شدیم. در آنجا، چون اتم آمونیاک می‌تواند، توسط اثر تونل، از یک طرف صفحه اتمهای هیدروژن به طرف دیگر برود، حالت‌های مانا، برای یافتن آن در هر یک از دو محل مربوطه احتمال‌های مساوی می‌دهند.

بودن ترازهای انرژی در یک پتانسیل تناوبی یک بعدی بررسی می شود).  
 بالاخره، بر این واقعیت تأکید می کنیم که در اینجا فقط به خواص تک تک حالت های مانای الکترونها توجه داریم. برای ساختن حالت مانای یک سیستم  $N$  الکترونی، از این حالتها، لازم است که اصل موضوع مقارن سازی (فصل ۱۴) را به کار ببریم، زیرا با سیستمی از ذرات یکسان روبه رو هستیم. بار دیگر این مسئله را در مکمل ۳ از فصل ۱۴، وقتی که نتایج فوق العاده جالب اصل طرد پاولی را در رفتار فیزیکی الکترونها در یک جامد تشریح می کنیم، بررسی خواهیم کرد.

### ۱. بررسی اولیه مسئله: بحث کیفی

باز می گردیم به مثال مولکول یونیده  $\text{H}_2^+$ ، که در بخشهای ۳-۲-ج و ۳-۳-د فصل ۴ بررسی کردیم. بنابراین، دو پروتون  $P_1$  و  $P_2$ ، با محل های ثابت، و یک الکترون تحت تأثیر جاذبه الکتروستاتیکی آنها را در نظر بگیرید. این الکترون مواجهه است با پتانسیل  $V(x)$ ، که در شکل ۱ نشان داده شده است. انرژیهای ممکن و حالت های مانای مربوط بر حسب فاصله  $R$  میان  $P_1$  و  $P_2$  (که به عنوان یک پارامتر در نظر گرفته می شود) کدام اند؟

پاسخ به سؤال فوق را با در نظر گرفتن مورد حدی  $R \gg a_0$  شروع می کنیم (  $a_0$  شعاع بور اتم هیدروژن است). در این صورت، حالت پایه، دوبار واگن است: الکترون می تواند با یکی از دو

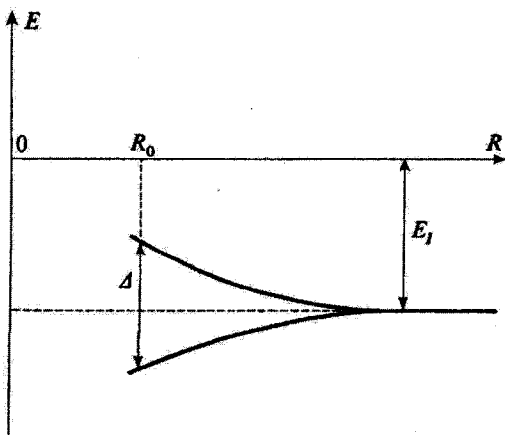


شکل ۱ پتانسیلی که الکترون مولکول یونیده  $\text{H}_2^+$  هنگام حرکت در طول محور  $Ox$ ، که توسط دو پروتون تعریف می شود، می بیند. دو چاه که توسط یک سد از هم جدا شده اند به دست می آوریم. اگر، در هر لحظه، الکترون در یکی از دو چاه قرار داشته باشد، می تواند از طریق اثر تونل به چاه دیگر برود.

پروتون  $P_1$  و  $P_2$  تشکیل یک اتم هیدروژن بدهد؛ الکترون، عملاً تحت تأثیر پروتون دیگر، که خیلی دور است، واقع نمی‌شود. به عبارت دیگر، جفت‌شدگی بین حالت‌های  $(\varphi_1)$  و  $(\varphi_2)$  که در فصل ۴ در نظر گرفتیم (حالت‌های جایگزیده در مجاورت  $P_1$  یا  $P_2$ ؛ شکل ۱۳ از فصل ۴) در اینجا قابل اغماض است، بنابراین  $(\varphi_1)$  و  $(\varphi_2)$  عملاً حالت‌های مانا هستند.

حال اگر برای  $R$  مقداری در حدود  $a$  انتخاب کنیم، دیگر نمی‌توان از جاذبه پروتون دیگر صرف‌نظر کرد. اگر در زمان  $t = 0$ ، الکترون در مجاورت یکی از پروتون‌ها قرار داشته باشد، و حتی اگر انرژی آن پایینتر از ارتفاع سد پتانسیل میان  $P_1$  و  $P_2$  (شکل ۱) باشد، می‌تواند توسط اثر تونل به سمت پروتون دیگر برود. در فصل ۴، اثر جفت‌شدگی حالت‌های  $(\varphi_1)$  و  $(\varphi_2)$  را بررسی کردیم، و نشان دادیم که این جفت‌شدگی باعث نوسان سیستم بین این دو حالت می‌شود (جنبه دینامیک). همچنین دیدیم (جنبه استاتیک) که این جفت‌شدگی، واگنی حالت پایه را برطرف می‌کند و حالت‌های مانای مربوط آنها "ناجایگزیده" هستند (برای این حالت‌ها، احتمال یافتن الکترون در مجاورت  $P_1$  یا  $P_2$  یکسان است). شکل ۲، چگونگی تغییرات انرژی‌های ممکن سیستم را برحسب  $R$  نشان می‌دهد.<sup>۱</sup>

وقتی فاصله  $R$  بین  $P_1$  و  $P_2$  را کاهش دهیم، دو اثر ظاهر می‌شود. از یک طرف، وقتی  $R$  را کاهش دهیم، انرژی مربوط به  $R = \infty$  به دو انرژی متمایز از هم تجزیه می‌شود (وقتی



شکل ۲ تغییرات انرژی حالت‌های مانای الکترون برحسب فاصله  $R$  بین دو پروتون یون  $H_1^+$  وقتی  $R$  بزرگ است، عملاً دو حالت واگن با انرژی  $-E_I$  وجود دارد. وقتی  $R$  کاهش پیدا کند، این واگنی برطرف می‌شود. هرچه  $R$  کوچکتر باشد، این شکاف بیشتر است.

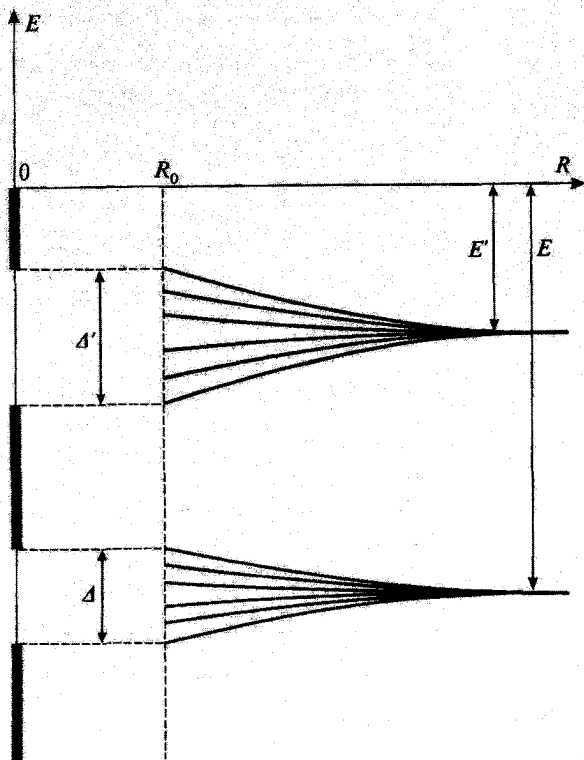
۱. بررسی دقیق یون  $H_1^+$  در مکمل ۷ از فصل ۱۱ انجام شده است.

فاصله  $R$  در مقدار معین  $R_0$  ثابت نگه داشته شود، هر چه جفت‌شدگی بین حالت‌های  $(\varphi_1)$  و  $(\varphi_2)$  قویتر باشد، فاصله بین این دو انرژی بیشتر است. از طرف دیگر، حالت‌های مانا، جایگزیده هستند.

به‌سادگی می‌توان تصور کرد که اگر الکترون تحت تأثیر سه ذره یکسان جاذب (پروتون یا یون مثبت)، که مثلاً روی یک خط مستقیم به فاصله‌های  $R$  از یکدیگر واقع‌اند، قرار گیرد چه اتفاقی خواهد افتاد. وقتی  $R$  بسیار بزرگ باشد، ترازهای انرژی سه‌بار واگن‌اند، و حالت‌های مانای الکترون می‌توانند طوری انتخاب شوند که در مجاورت هر یک از ذرات ثابت، جایگزیده باشند. اگر  $R$  کاهش یابد، هر انرژی، به سه انرژی، که عموماً از یکدیگر متمایزند، تجزیه می‌شود و، در یک حالت مانا، احتمال یافتن الکترون در سه چاه، در حدود هم می‌باشد، به‌علاوه، اگر، در لحظه اولیه، الکترون، به‌عنوان مثال، در چاه سمت راست جایگزیده باشد، در حین تحول بعدی خود به سایر چاهها می‌رود.<sup>۱</sup>

همین مطالب، برای یک زنجیر متشکل از تعداد دلخواه  $N$  یون که یک الکترون را جذب می‌کنند نیز معتبر است. در این صورت، پتانسیلی که توسط الکترون دیده می‌شود از  $N$  چاه یکسان با فواصل منظم تشکیل یافته است (در حد  $\infty \rightarrow N$ ، این پتانسیل، یک پتانسیل تناوبی است). وقتی فاصله  $R$  بین یونها بزرگ باشد، ترازهای انرژی،  $N$  بار واگن خواهد بود. اگر یونها را به یکدیگر نزدیک کنیم، این واگنی از بین می‌رود: هر تراز به ترازهای متمایز تجزیه می‌شود، که مانند شکل ۳، در یک فاصله انرژی به‌پهنای  $\Delta$  توزیع می‌گردند. حال اگر مقدار  $N$  بسیار بزرگ باشد چه رخ می‌دهد؟ در هر یک از فواصل  $\Delta$ ، انرژی‌های ممکن آن قدر به یکدیگر نزدیک‌اند که عملاً یک پیوستار به‌وجود می‌آورند: "نوارهای انرژی مجاز" که به‌این ترتیب به‌دست می‌آیند توسط "نوارهای ممنوع" از یکدیگر جدا می‌شوند. هر نوار مجاز شامل  $N$  تراز است (در واقع اگر اسپین الکترون را به حساب آوریم  $2N$  تراز وجود خواهد داشت). هر چه جفت‌شدگی عامل رفتن الکترون از یک چاه به چاه بعدی قویتر باشد، پهنای نوار بیشتر خواهد بود. (در نتیجه، انتظار داریم که پایینترین نوارهای انرژی، باریکترین نوارها باشند زیرا وقتی انرژی کمتر باشد، احتمال اثر تونل که مسئول این عبور است کمتر است). حالت‌های مانای الکترون، همگی ناچایگزیده هستند. مانسته شکل ۳ی مکمل  $M_{III}$  در اینجا، شکل ۴ است، که ترازهای انرژی را نشان داده و یک دید کلی از گسترش فضایی تابع موجها(ی) وابسته را به‌دست می‌دهد.

بالاخره، توجه کنید که اگر، در  $t = 0$ ، الکترون در یکی از دو سر غیرواقع باشد، در خلال تحول بعدی خود، در طول زنجیر انتشار می‌یابد.

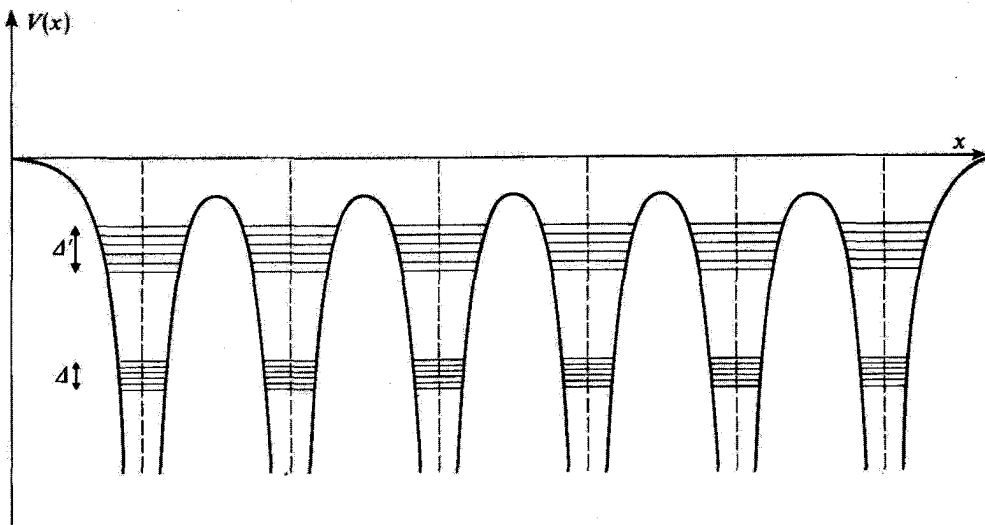


شکل ۳ لایه‌های انرژی یک الکترون تحت عمل  $\mathcal{N}$  یون یکسان که به فواصل منظم از یکدیگر قرار دارند. وقتی  $R$  خیلی بزرگ است، تابع موجها (ی) در حول یونها مختلف جایگزیده‌اند، و ترازهای انرژی، ترازهای اتمی‌اند و  $\mathcal{N}$  بار واگن‌اند (الکترون می‌تواند با هر یک از یونها تشکیل یک اتم بدهد). در شکل، دو تا از این ترازها، با انرژیهای  $E$  و  $E'$  نشان داده شده‌اند. وقتی  $R$  کاهش پیدا کند، الکترون می‌تواند از یک یون توسط اثر تونل، به یون دیگر برود، و واگنی ترازها برطرف می‌شود. هر چه  $R$  کوچکتر باشد، شکافتگی لایه‌ها بیشتر است. از این رو، به‌ازاء مقدار  $R_0$  برای  $R$ ، در یک بلور مشاهده می‌شود که هر یک از دو تراز اتمی اولیه به  $\mathcal{N}$  تراز بسیار نزدیک به هم تبدیل می‌گردد. اگر  $\mathcal{N}$  بسیار بزرگ باشد. این ترازها آن قدر به هم نزدیکند که نوارهای انرژی‌ای، با پهناهای  $\Delta$  و  $\Delta'$ ، ایجاد می‌کنند که توسط یک نوار ممنوع از هم جدا می‌شوند.

## ۲. بررسی دقیقتر با استفاده از یک مدل ساده

الف) محاسبه انرژیها و حالت‌های مانا

برای اینکه ملاحظات کیفی بخش گذشته را کامل کنیم، مسئله را، با استفاده از یک مدل ساده، دقیقتر مورد بحث قرار می‌دهیم. محاسباتی مشابه محاسبات بخش ۴-۳ از فصل ۴ انجام خواهیم



شکل ۴ سطوح انرژی برای پتانسیلی که از چند چاه با فواصل منظم تشکیل یافته است. در این شکل، دو نوار نشان داده شده است، یکی به پهنای  $\Delta$  و دیگری به پهنای  $\Delta'$ . هر چه نوار پهنتر باشد، نازکتر است زیرا در این صورت عبور از سد توسط اثر تونل مشکلتر است.

داد، ولی این بار در موردی که در آن، سیستم تحت مطالعه، شامل تعدادی نامتناهی یون (به جای دو یون) است. که به فواصل منظم از یکدیگر، بر روی یک زنجیر خطی قرار دارند.

۱. تشریح مدل؛ فرضیه‌های ساده‌کننده

یک زنجیر خطی نامتناهی از یونهای مثبت که به فواصل منظم از یکدیگر قرار دارند، در نظر بگیرید. مانند فصل ۴، فرض خواهیم کرد که الکترون، وقتی به یک یون معین مقید است، دارای فقط یک حالت ممکن است؛ حالت الکترون را وقتی با یون  $n$ ام زنجیر تشکیل یک اتم می‌دهد به  $|v_n\rangle$  نشان می‌دهیم. برای سهولت، از روی هم افتادگی متقابل تابع موجها (ی)  $v_n(x)$  وابسته به اتمهای مجاور صرف نظر کرده و فرض می‌کنیم پایه  $\{|v_n\rangle\}$  راست‌هنجار باشد

$$\langle v_n | v_p \rangle = \delta_{np} \quad (1)$$

علاوه بر این، مطالعه خود را به زیرفضایی از فضای حالت که از کتهای  $|v_n\rangle$  تشکیل شده است محدود خواهیم کرد. واضح است که با محدود کردن فضای حالت قابل حصول برای الکترون به این طریق، مرتکب یک عمل تقریبی می‌شویم این تقریب را می‌توان با استفاده از روش وردشی



(مکمل ۵ از فصل ۱۱)، توجیه کرد: با قطری کردن هامیلتونی  $H$ ، نه در فضای کل، بلکه در فضایی که توسط  $|v_n\rangle$  به وجود می آید، می توان نشان داد که برای انرژیهای واقعی الکترون، تقریب خوبی به دست می آوریم.

اکنون ماتریس معرف هامیلتونی  $H$  در پایه  $\{|v_n\rangle\}$  را می نویسیم. چون تمام یونها دارای نقش یکسانی هستند، عناصر ماتریسی  $\langle v_n|H|v_n\rangle$  الزاماً همگی برابر با انرژی  $E_0$  اند. ماتریس  $H$ ، علاوه بر این عناصر قطری، دارای عناصر غیرقطری  $\langle v_n|H|v_p\rangle$  (جفت شدگی بین حالت‌های مختلف  $|v_n\rangle$ )، که امکان حرکت یک الکترون را از یک یون به یون دیگر بیان می کند) نیز هست. این جفت شدگی برای یونهای دور مسلماً ضعیف است؛ به این دلیل است که ما فقط عناصر ماتریسی  $\langle v_n|H|v_{n\pm 1}\rangle$  را، که برابر با یک مقدار ثابت حقیقی  $-A$  انتخاب می کنیم، به حساب می آوریم. تحت این شرایط، ماتریس (نامتناهی) معرف  $H$  را می توان به صورت زیر نوشت

$$(H) = \begin{pmatrix} \ddots & & & & \\ & E_0 & -A & 0 & 0 \\ & -A & E_0 & -A & 0 \\ & 0 & -A & E_0 & -A \\ & 0 & 0 & -A & E_0 \\ & & & & \ddots \end{pmatrix} \quad (2)$$

برای به دست آوردن انرژیهای ممکن و حالت‌های مانای مربوط، باید این ماتریس را قطری کنیم.

۲. انرژیهای ممکن؛ مفهوم نوار انرژی

فرض کنید  $|\varphi\rangle$  یک ویژه بردار  $H$  باشد؛ آن را به صورت زیر می نویسیم

$$|\varphi\rangle = \sum_{q=-\infty}^{+\infty} c_q |v_q\rangle \quad (3)$$

با استفاده از (۲)، با تصویر کردن معادله ویژه مقدار

$$H|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle \quad (4)$$

بر روی  $|v_q\rangle$  داریم

$$E_0 c_q - A c_{q+1} - A c_{q-1} = E c_q \quad (5)$$

بنابراین، وقتی  $q$  تمام اعداد صحیح منفی یا مثبت را اختیار کند، یک دستگاه نامتناهی از معادلات خطی جفت شده، به دست می آوریم که از بعضی جهات یادآور معادلات جفت شده (۵) از مکمل ۱۰ فصل ۵ است. مانند مکمل مذکور، در جستجوی جوابهای ساده از نوع زیر خواهیم بود

$$c_q = e^{ikql} \quad (۶)$$

که در آن  $l$  فاصله دو یون مجاور، و  $k$  مقدار ثابتی است که بعد آن، بعد عکس طول است. شرط می کنیم که  $k$  متعلق به "اولین منطقه بریلوئن" باشد، یعنی در رابطه زیر صدق کند

$$-\frac{\pi}{l} \leq k < +\frac{\pi}{l} \quad (۷)$$

این همواره ممکن است، زیرا دو مقدار  $k$  که به اندازه  $2\pi/l$  اختلاف داشته باشند برای تمام ضرایب  $c_q$ ، یک مقدار مساوی می دهند. با قرار دادن (۶) در (۵) به دست می آوریم

$$E_0 e^{ikql} - A[e^{ik(q+1)l} + e^{ik(q-1)l}] = E e^{ikql} \quad (۸)$$

یعنی، با تقسیم طرفین بر  $e^{ikql}$

$$E = E(k) = E_0 - 2A \cos kl \quad (۹)$$

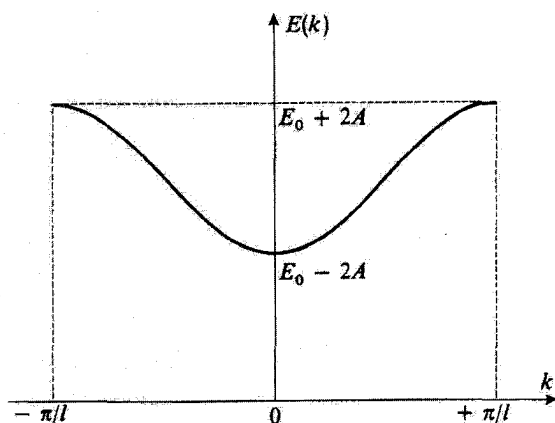
اگر این شرط برقرار باشد، کت  $|\varphi\rangle$  که با (۳) و (۶) داده می شود، یک ویژه کت  $H$  خواهد بود و انرژی آن همان طور که در رابطه (۹) نشان داده شده است، به پارامتر  $k$  بستگی دارد.

شکل ۵ تغییرات  $E$  نسبت به  $k$  را نشان می دهد. این شکل، نشان می دهد که انرژیهای ممکن در فاصله  $[E_0 - 2A$  و  $E_0 + 2A]$  قرار دارند. لذا، یک نوار انرژی مجاور به دست می آوریم، که عرض آن،  $4A$ ، با قدرت جفت شدگی متناسب است.

۳. حالتهای مانا؛ توابع بلاخ

حال تابع موج  $\langle x|\varphi_k\rangle = \varphi_k(x)$  وابسته به حالت مانای  $|\varphi_k\rangle$  یا انرژی  $E(k)$  را محاسبه می کنیم. از روابط (۳) و (۶) داریم

$$|\varphi_k\rangle = \sum_{q=-\infty}^{+\infty} e^{ikql} |v_q\rangle \quad (۱۰ الف)$$



شکل ۵ انرژیهای ممکن الکترون برحسب پارامتر  $k$  در محدوده اولین منطقه بریلوئن تغییر می‌کنند. بنابراین، یک نوار انرژی، با پهنای  $4A$  که متناسب است با جفت‌شدگی بین انتهای مجاور، ظاهر می‌گردد.

یعنی

$$\varphi_k(x) = \sum_{q=-\infty}^{+\infty} e^{ikql} v_q(x) \quad (10)$$

که در آن

$$v_q(x) = \langle x | v_q \rangle \quad (11)$$

تابع موج وابسته به حالت  $|v_q\rangle$  است. چون حالت  $|v_q\rangle$  می‌تواند از حالت  $|v_0\rangle$  با یک انتقال  $ql$  به دست بیاید، داریم

$$v_q(x) = v_0(x - ql) \quad (12)$$

بنابراین (۱۰) را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\varphi_k(x) = \sum_{q=-\infty}^{+\infty} e^{ikql} v_0(x - ql) \quad (13)$$

حال  $\varphi_k(x+l)$  را محاسبه می‌کنیم

$$\begin{aligned}\varphi_k(x+l) &= \sum_{q=-\infty}^{+\infty} e^{ikql} v_0 [x - (q-1)l] \\ &= e^{ikl} \sum_{q=-\infty}^{+\infty} e^{ik(q-1)l} v_0 [x - (q-1)l] \\ &= e^{ikl} \varphi_k(x)\end{aligned}\quad (14)$$

برای بیان ساده این ویژگی برجسته، قرار می‌دهیم

$$\varphi_k(x) = e^{ikx} u_k(x) \quad (15)$$

تابع  $u_k(x)$  که به این ترتیب تعریف شده است در رابطه زیر صدق می‌کند

$$u_k(x+l) = u_k(x) \quad (16)$$

بنابراین، تابع موج  $\varphi_k(x)$  عبارت است از حاصلضرب  $e^{ikx}$  و یک تابع تناوبی که دارای تناوب  $l$  شبکه است. تابعی از نوع (۱۵) تابع بلاخ نامیده می‌شود. توجه کنید که اگر  $n$  یک عدد صحیح باشد داریم

$$|\varphi_n(x+nl)|^2 = |\varphi_k(x)|^2 \quad (17)$$

که نتیجه‌ای است که ناچایگزیدگی الکترون را نشان می‌دهد: چگالی احتمال یافتن الکترون در هر نقطه بر روی محور  $x$ ها، یک تابع تناوبی از  $x$  است.

یادداشت:

در اینجا، روابط (۱۵) و (۱۶) را برای یک مدل ساده ثابت کرده‌ایم. در واقع، این نتیجه کلی‌تر است و می‌توان آن را مستقیماً از روی تقارنهای هامیلتونی  $H$  اثبات کرد (قضیه بلاخ). برای نشان دادن این مطلب، عملگر یکانی وابسته به یک انتقال  $a$  در طول  $Ox$  را با  $S(a)$  نشان می‌دهیم (مکمل ۵ از فصل ۲ بخش ۳). چون سیستم تحت هر انتقالی که زنجیر یونی را تغییر ندهد، ناورداست. باید داشته باشیم

$$[H, S(l)] = 0 \quad (الف ۱۸)$$

بنابراین می‌توانیم از ویژه‌بردارهای مشترک بین عملگر  $S(l)$  و  $H$ ، یک پایه بسازیم. حال، معادله (۱۴) معادله‌ای است که ویژه‌بردارهای  $S(-l)$  را تعریف می‌کند [چون این عملگر، یکانی است، ویژه‌مقدارهای آن را می‌توانیم همواره به صورت  $e^{ikl}$  بنویسیم، که  $k$  در شرط (۷) صدق می‌کند؛ مکمل ۳ از فصل ۲ بخش ۱-د]. سپس به سادگی مانند قبل، (۱۵) و (۱۶) را از روی (۱۴) به دست می‌آوریم.

توجه کنید که در حالت کلی، برخلاف مورد ذره آزاد (یا ذره تحت تأثیر پتانسیل ثابت)، برای هر مقدار

$a$  داریم

$$[H, S(a)] \neq 0 \quad (18 \text{ ب})$$

برای یک ذره آزاد، چون  $H$  با تمام عملگرهای  $S(a)$ ، یعنی، با تکانه  $P_x$ ؛ مکمل ۵ از فصل ۲ بخش ۳) جابه‌جا می‌شود، تابع موجها (ی) مانا به صورت زیر هستند

$$w_k(x) \propto e^{ikx} \quad (19)$$

این واقعیت که، در مورد اخیر، (۱۸ ب) تنها برای مقادیر مشخصی از  $a$  صادق است، بیان‌کننده این است که چرا (۱۵) از (۱۹) محدودیت کمتری ایجاد می‌کند.

#### ۴. شرایط مرزی تناوبی

بنابراین، به هر مقدار  $k$  در فاصله  $[-\pi/l, +\pi/l]$  یک ویژه‌حالت  $\langle \varphi |$  متعلق به  $H$  مربوط می‌شود، که ضرایب  $c_q$  بسط (۳)ی آن، با معادله (۶) داده می‌شوند. از این رو، یک پیوستار نامتناهی از حالت‌های مانا به دست می‌آوریم. این، ناشی از این واقعیت است که یک زنجیر خطی شامل تعدادی نامتناهی یون را در نظر گرفته‌ایم. حال اگر یک زنجیر خطی متناهی به طول  $L$ ، متشکل از تعداد زیاد  $N$  یون، را در نظر بگیریم چه رخ می‌دهد؟

بررسی‌های کیفی بخش ۱ نشان می‌دهند که در این صورت باید تعداد  $N$  تراز در نوار وجود داشته باشد (اگر اسپین را منظور کنیم،  $2N$  تراز). تعیین دقیق  $N$  حالت مانای مربوط، مسئلهٔ مشکلی است، زیرا لازم است که شرایط مرزی در دو انتهای زنجیر را در نظر بگیریم. اما، واضح است که رفتار الکترونیایی که به قدر کافی از دو انتهای زنجیر دورند، به طور ناچیزی تحت تأثیر "آثار لبه" قرار می‌گیرند.<sup>۱</sup> به همین دلیل است که عموماً، در فیزیک حالت جامد، ترجیح داده می‌شود که به جای شرایط مرزی واقعی، شرایط مرزی جدیدی را جایگزین کنند، که، علی‌رغم مشخصه ساختگی‌شان، این امتیاز را دارند که محاسبات را خیلی ساده‌تر می‌کنند، و در عین حال مهم‌ترین خواص لازم برای درک آثار علاوه بر آثار لبه را حفظ می‌کنند.

۱. برای یک بلور سه بعدی، این به معنای پذیرش تمایزی بین "آثار حجمی" و "آثار سطحی" است.

این شرایط مرزی جدید که شرایط مرزی تناوبی، یا "شرایط بورن-سون-کارمن" (شرایط B.V.K نامیده می‌شوند، ایجاب می‌کنند که تابع موج در دو انتهای زنجیر، یک مقدار داشته باشد. همچنین می‌توانیم تصور کنیم که تعدادی نامتناهی زنجیر یکسان را که طول همگی آنها  $L$  است پشت سر هم قرار دهیم، و سپس شرط کنیم که تابع موج الکترون با تناوب  $L$ ، تناوبی باشد. معادلات (۵)، و نیز جوابهای (۶) آنها، معتبر باقی می‌مانند، اما تناوبی بودن تابع موج اکنون ایجاب می‌کند که

$$e^{ikL} = 1 \quad (20)$$

در نتیجه، تنها مقادیر ممکن  $k$  عبارت‌اند از

$$k_n = n \frac{2\pi}{L} \quad (21)$$

که  $n$  یک عدد صحیح مثبت یا منفی و یا صفر است. حال ثابت می‌کنیم که شرایط B.V.K برای تعداد حالت‌های مانای موجود در نوار، نتیجهٔ درستی می‌دهند. برای این منظور، باید تعداد مقادیر مجاز  $k_n$  در اولین منطقه بریلوئن را حساب کنیم. این تعداد، از تقسیم پهنای  $2\pi/l$  این منطقه بر فاصلهٔ  $2\pi/L$  بین دو مقدار مجاور  $k$  به دست می‌آید، که برابر است با

$$\frac{2\pi}{\frac{2\pi}{L}} = \frac{L}{l} = \mathcal{N} - 1 \simeq \mathcal{N} \quad (22)$$

همچنین باید نشان دهیم که  $\mathcal{N}$  حالت مانای به دست آمده توسط شرایط B.V.K، با همان دانسیتهٔ  $\rho(E)$  حالت‌های مانای واقعی (وابسته به شرایط مرزی واقعی)، در نوار مجاز توزیع می‌شوند چون دانسیتهٔ  $\rho(E)$  حالتها، نقش بسیار مهمی در خواص فیزیکی یک جامد ایفا می‌کند (این نکته را در مکمل ۳ از فصل ۱۴ مورد بحث قرار خواهیم داد). شرایط مرزی جدید نباید آن را تغییر دهند. اینکه شرایط B.V.K، دانسیتهٔ صحیح حالتها را می‌دهند، در مکمل ۳ از فصل ۱۴ (بخش ۱-ج) برای مثال سادهٔ یک گاز الکترون آزاد محبوس در داخل یک "جعبهٔ صلب" اثبات خواهد شد. در این مورد، حالت‌های مانای واقعی را می‌توانیم محاسبه کنیم و با حالت‌هایی که با استفاده از شرایط مرزی تناوبی در دیواره‌های جعبه به دست آورده‌ایم (همچنین بخش ۳ از مکمل ۵ از فصل ۳ را ملاحظه کنید) مقایسه نماییم.

(ب) بحث

با شروع از یک تراز گسسته ناواکن برای یک اتم منزوی (به عنوان مثال، تراز پایه) یک رشته انرژیهای ممکن به دست آوردیم، که برای زنجیر یونهای مورد نظر، در یک نوار مجاز به پهنای  $4A$  گروه بندی شده اند. اگر از یک تراز دیگر اتم (به عنوان مثال، اولین تراز برانگیخته) شروع کرده بودیم، یک نوار دیگر انرژی به دست می آوردیم، والی آخر. همان گونه که شکل ۶ نشان می دهد، هر تراز اتمی یک نوار انرژی می دهد، و در نتیجه یک رشته نوارهای مجاز به دست می آید که به وسیله نوارهای ممنوع از هم جدا می شوند.

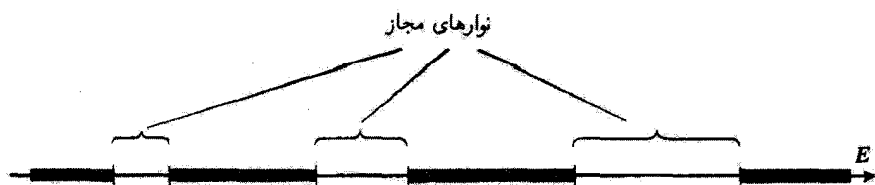
رابطه (۶) نشان می دهد که، برای یک حالت مانا، دامنه احتمال یافتن الکترون در حالت  $(v_q)$ ، یک تابع نوسانی از  $q$  است که مدول آن به  $q$  بستگی ندارد. این، یادآور خواص فونونهاست، مدهای ارتعاشی متعارف تعدادی نامتناهی نوسانگر جفت شده که در آنها، تمام نوسانگرها با بسامدهای یکسان، ولی با یک انتقال فاز معین، در ارتعاش جمعی مشارکت دارند (مکمل  $10^\circ$  از فصل ۵). چگونه می توانیم حالتی را به دست آوریم که در آنها الکترون کاملاً ناچایگزیده نیست؟ برای یک الکترون آزاد، در فصل ۱ دیدیم که باید امواج تخت را با هم ترکیب کنیم تا یک "بسته موج" آزاد تشکیل دهند

$$\hat{\psi}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \hat{g}(k) e^{i[kx - E(k)t/\hbar]} \quad (23)$$

ماکزیموم این بسته موج با سرعت گروه انتشار می یابد (فصل ۱، بخش ۳)

$$\hat{V}_G = \frac{1}{\hbar} \left[ \frac{dE}{dk} \right]_{k=k_0} = \frac{\hbar k_0}{m} \quad (24)$$

که  $k_0$  مقدار  $k$  است که به ازاء آن تابع  $\hat{g}(k)$  یک قله دارد. در اینجا، باید توابع موجی از نوع (۱۵)



شکل ۶ نوارهای مجاز و ممنوع روی محور انرژی.

را ترکیب کنیم، وکت مربوط را می‌توانیم به صورت زیر بنویسیم

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk g(k) e^{-iE(k)t/\hbar} |\varphi_k\rangle \quad (25)$$

که در آن،  $g(k)$  تابعی از  $k$  است که در  $k = k_0$  ماکزیموم می‌شود. دامنه احتمال یافتن الکترون در حالت  $|v_g\rangle$  را محاسبه می‌کنیم. با استفاده از (الف) و (ب)، می‌توان نوشت

$$\langle v_g | \psi(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk g(k) e^{i[kql - E(k)t/\hbar]} \quad (26)$$

با جایگزین کردن  $ql$  توسط  $x$  در این رابطه، تابعی از  $x$  به دست می‌آوریم

$$\chi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk g(k) e^{i[kx - E(k)t/\hbar]} \quad (27)$$

فقط مقادیر این تابع در نقاط  $x = 0, \pm ql, \pm 2ql, \dots$  واقعاً اهمیت داشته و دامنه احتمالهای مطلوب را می‌دهند.

رابطه (۲۷) کاملاً مشابه (۲۳) است. با به‌کار بردن (۲۴)، می‌توان نشان داد که  $\chi(x, t)$  فقط در یک حوزه محدودی از محور  $x$ ‌ها که مرکز آن با سرعت

$$V_G = \frac{1}{\hbar} \left[ \frac{dE(k)}{dk} \right]_{k=k_0} \quad (28)$$

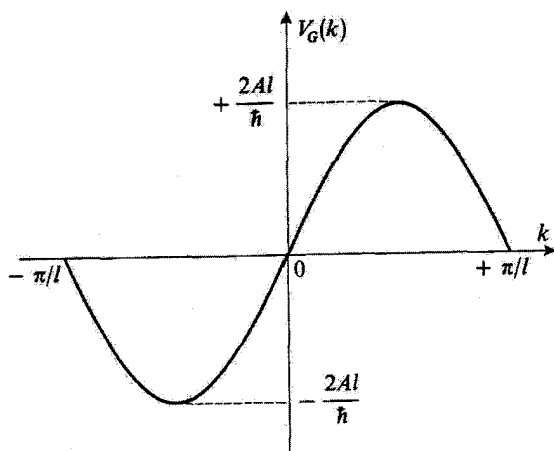
حرکت می‌کند دارای مقادیر حائز اهمیت است. نتیجه اینکه، دامنه احتمال  $\langle v_g | \psi(t) \rangle$  تنها به‌ازاء مقادیر معینی از  $q$  بزرگ است؛ بنابراین، دیگر الکترون ناجایگزیده نبوده، بلکه با سرعت  $V_G$ ، که توسط (۲۸) داده می‌شود، در بلور حرکت می‌کند.

معادله (۹) به‌ما امکان می‌دهد تا این سرعت را صریحاً محاسبه کنیم

$$V_G = \frac{\hbar A l}{\hbar} \sin k_0 l \quad (29)$$

این تابع در شکل (۷) نشان داده شده است. وقتی  $k_0 = 0$ ، یعنی، وقتی انرژی مینیموم است، مقدار آن صفر است؛ این ویژگی، یک ویژگی الکترون آزاد نیز هست. لیکن، وقتی  $k_0$  مقادیر غیرصفر اختیار می‌کند، انحرافات مهمی از رفتار یک الکترون آزاد بروز می‌کنند. به‌عنوان مثال،





شکل ۷ سرعت گروه الکترون به صورت تابعی از پارامتر  $k$ . این سرعت، نه تنها به ازاء  $k = 0$  بلکه به ازاء  $k = \pm \pi/l$  (لبه‌های اولین منطقه بریلوئن) نیز، صفر می‌شود.

به مجرد اینکه  $k_0 > \pi/2l$  شد، سرعت گروه دیگر یک تابع صعودی از انرژی نخواهد بود. حتی، وقتی  $k_0 = \pm \pi/l$  باشد (در مرزهای اولین منطقه بریلوئن) مقدار آن صفر می‌شود. این نشان می‌دهد که اگر انرژی یک الکترون به مقدار ماکزیموم  $E_0 + 2A$ ، نشان داده شده در شکل (۵)، خیلی نزدیک باشد، دیگر نمی‌تواند در بلور حرکت کند. مشابه ایتیکی این وضعیت، بازتاب براگ است. اشعه X با طول موج مساوی با واحد لبه شبکه بلوری، نمی‌تواند در آن انتشار یابد: تداخل امواج پراکنده شده توسط هر یک از یونها، منجر به بازتاب کلی می‌شود.

مراجع برای مطالعه بیشتر

Feynman III (1.2), chap. 13; Mott and Jones (13.7), chap. II, §4; references of section 13 of the bibliography.

# مکمل ۷

## یک نمونه ساده از پیوند شیمیایی: یون $H_2^+$

۱. مقدمه

الف) روش عمومی

ب) نمادگذاری

ج) اساس محاسبه دقیق

۲. محاسبه وردشی انرژیها

الف) انتخاب کتهای آزمایشی

ب) معادله ویژه مقدار هامیلتونی  $H$  در زیر فضای برداری  $\mathcal{F}$  کت آزمایشی

ج) روی هم افتادگی، انتگرالهای کولنی و تشدید

د) حالتهاى پیوندی و پادپیوندی

۳. نقد مدل پیشین. اصلاحات ممکن

الف) نتایج برای  $R$  کوچک

ب) نتایج برای  $R$  بزرگ

۴. سایر اوربیتالهای مولکولی یون  $H_2^+$

الف) تقارنها و اعداد کوانتومی. نمادگذاری اسپکتروسکوپیکی

ب) اوربیتالهای مولکولی متشکل از اوربیتالهای اتمی  $2p$

۵. منشأ پیوند شیمیایی: قضیه ویریال

الف) بیان مسئله

ب) چند قضیه مفید

ج) کاربرد قضیه ویریال در مورد مولکولها

د) بحث

۱. مقدمه

در این مکمل، می خواهیم نشان بدهیم که چگونه به کمک مکانیک کوانتومی می توان به وجود و خواص پیوند شیمیایی، که عامل تشکیل مولکولهای کمابیش مرکب از اتمهای منزوی است، پی برد. هدف ما تشریح ماهیت اساسی این پدیده هاست و نه، مسلماً، وارد شدن به جزئیات که تنها می تواند در یک کتاب تخصصی فیزیک مولکولی مورد بحث قرار گیرد. به همین دلیل است که

ساده‌ترین مولکول ممکن، یون  $H_3^+$ ، را که از دو پروتون و یک الکترون تشکیل شده است بررسی خواهیم کرد. قبلاً بعضی از جنبه‌های این مسئله را در فصل ۴ (بخش ۴-۳-۲-ج) و در تمرین ۵ از مکمل ۱۱ از فصل ۱ مورد بحث قرار دادیم؛ در اینجا آن را با یک روش واقع‌بینانه‌تر و اصولی‌تر بررسی می‌کنیم.

### الف) روش عمومی

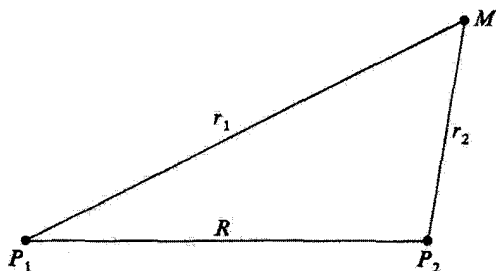
وقتی دو پروتون از یکدیگر خیلی دور باشند، الکترون با یکی از آنها تشکیل یک اتم هیدروژن می‌دهد، و پروتون دیگر منزوی و به‌صورت یک یون  $H^+$  باقی می‌ماند. اگر دو پروتون را نزدیک یکدیگر بیاوریم، الکترون قادر خواهد بود از یکی به دیگری "بجهد". این عمل، شدیداً وضعیت را تغییر می‌دهد (فصل ۴، بخش ۴-۳-۲). از این رو، تغییر انرژی‌های حالت‌های مانای سیستم را نسبت به فاصله بین دو پروتون بررسی خواهیم کرد. خواهیم دید که انرژی حالت پایه به‌ازای یک مقدار معین از این فاصله، به یک مینیموم می‌رسد، که پایداری مولکول  $H_3^+$  را بیان می‌کند.

برای بررسی دقیق مسئله، لازم خواهد بود هامیلتونی سیستم سه ذره را بنویسیم و معادله ویژه‌مقدار آن را حل کنیم. با این همه، می‌توانیم با استفاده از تقریب بورن-اپنهایمر (مکمل ۱ از فصل ۵ بخش ۱-الف) مسئله را به‌طور قابل ملاحظه‌ای ساده کنیم. چون حرکت الکترون در مولکول به‌طور قابل ملاحظه‌ای سریع‌تر از حرکت پروتون‌هاست، در تقریب اول می‌توان از حرکت پروتون‌ها صرف‌نظر کرد. در این صورت مسئله تبدیل می‌شود به حل معادله ویژه‌مقدار هامیلتونی الکترون که تحت تأثیر جاذبه دو پروتون ثابت قرار دارد. به‌عبارت دیگر، فاصله  $R$  بین دو پروتون، نه به‌صورت یک متغیر کوانتومی، بلکه به‌صورت یک پارامتر، که هامیلتونی الکترونی و انرژی کل سیستم به آن بستگی دارد، تلقی می‌شود.

در مورد یون  $H_3^+$ ، برحسب اتفاق، معادله‌ای که به این نحو ساده می‌شود برای تمام مقادیر  $R$  دقیقاً قابل حل است. اما، برای سایر مولکول‌های پیچیده‌تر این‌طور نیست. در این صورت، روش وردشی مندرج در مکمل ۵ از فصل ۱۱ را باید به‌کار ببریم. در اینجا، اگرچه مطالعه خود را به یون  $H_3^+$  محدود می‌کنیم، ولی باز از روش وردشی استفاده خواهیم کرد، زیرا می‌توان آن را به‌موارد سایر مولکول‌ها تعمیم داد.

### ب) نمادگذاری

فاصله بین دو پروتون واقع در  $P_1$  و  $P_2$  را  $R$  و فاصله الکترون تا هر یک از دو پروتون را به‌ترتیب  $T_1$  و  $T_2$  می‌نامیم (شکل ۱). با قرار دادن



شکل ۱ فاصله بین الکترون ( $M$ ) و پروتون  $P_1$  را  $r_1$  و فاصله بین الکترون و پروتون  $P_2$  را  $r_2$  و فاصله بین مولکولی  $P_1P_2$  را  $R$  می‌نامیم.

$$\rho = \frac{R}{a_0}$$

$$\rho_1 = \frac{r_1}{a_0} \quad \rho_2 = \frac{r_2}{a_0} \quad (1)$$

این فواصل را به یک واحد اتمی طبیعی، به نام شعاع بور  $a_0$  (فصل ۷، بخش ۷-۳-۲)، مربوط می‌کنیم. در این صورت تابع موج بهنجار وابسته به حالت پایه  $1s$  اتم هیدروژن تشکیل شده در اطراف پروتون  $P_1$  را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\varphi_1 = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\rho_1} \quad (2)$$

همچنین، انرژیها را برحسب واحد طبیعی  $E_I = e^2/2a_0$  بیان می‌کنیم؛ انرژی یونش اتم هیدروژن است.

گاهی راحت‌تر است که در آنچه به دنبال می‌آید از دستگاه مختصات بیضوی استفاده کنیم، که در آن یک نقطه  $M$  از فضا (در اینجا الکترون) توسط روابط

$$\mu = \frac{r_1 + r_2}{R} = \frac{\rho_1 + \rho_2}{\rho}$$

$$\nu = \frac{r_1 - r_2}{R} = \frac{\rho_1 - \rho_2}{\rho} \quad (3)$$

و زاویه  $\varphi$  تعریف می‌شود؛  $\varphi$  زاویه‌ای است که جهت صفحه  $MP_1P_2$  را نسبت به محور  $P_1P_2$  تعیین می‌کند، (این زاویه در دستگاه مختصات قطبی که محور  $Oz$  آن بر  $P_1P_2$  منطبق است، نیز

وارد می‌شود). اگر  $\mu$  و  $\nu$  را ثابت نگه داریم و  $\varphi$  را از  $0$  تا  $2\pi$  تغییر بدهیم، نقطه  $M$  یک دایره حول محور  $P_1P_2$  می‌پیماید. اگر  $\mu$  (یا  $\nu$ ) و  $\varphi$  ثابت باشند، با تغییر دادن  $\nu$  (یا  $\mu$ ) نقطه  $M$ ، یک بیضی (یا هذلولی) با کانونهای  $P_1$  و  $P_2$  را طی می‌کند. به سادگی می‌توان نشان داد که عنصر حجمی در این دستگاه عبارت است از

$$d^3\tau = \frac{R^2}{\lambda} (\mu^2 - \nu^2) d\mu d\nu d\varphi \quad (4)$$

برای این منظور، ژاکوبی  $J$  تبدیل

$$\{x, y, z\} \Rightarrow \{\mu, \nu, \varphi\} \quad (5)$$

را محاسبه می‌کنیم. بلافاصله، ملاحظه می‌کنیم که اگر  $P_1P_2$  به عنوان محور  $Oz$ ، و مبدأ در وسط  $P_1P_2$  انتخاب شوند، داریم

$$\begin{aligned} r_1^2 &= x^2 + y^2 + \left(z - \frac{R}{2}\right)^2 \\ r_2^2 &= x^2 + y^2 + \left(z + \frac{R}{2}\right)^2 \\ \tan\varphi &= \frac{y}{x} \end{aligned} \quad (6)$$

سپس روابط زیر را می‌توانیم به دست بیاوریم

$$\begin{aligned} \frac{\partial\mu}{\partial x} &= \frac{1}{R} \left( \frac{\partial r_1}{\partial x} + \frac{\partial r_2}{\partial x} \right) = \frac{1}{R} \left( \frac{x}{r_1} + \frac{x}{r_2} \right) = \frac{\mu x}{r_1 r_2} \\ \frac{\partial\nu}{\partial x} &= \frac{1}{R} \left( \frac{\partial r_1}{\partial x} - \frac{\partial r_2}{\partial x} \right) = -\frac{\nu x}{r_1 r_2} \\ \frac{\partial\mu}{\partial y} &= \frac{\mu y}{r_1 r_2} \\ \frac{\partial\nu}{\partial y} &= \frac{\nu y}{r_1 r_2} \\ \frac{\partial\mu}{\partial z} &= \frac{1}{R} \left[ \frac{z - R/2}{r_1} + \frac{z + R/2}{r_2} \right] = \frac{\mu z + \nu R/2}{r_1 r_2} \\ \frac{\partial\nu}{\partial z} &= \frac{1}{R} \left[ \frac{z - R/2}{r_1} - \frac{z + R/2}{r_2} \right] = -\frac{\nu z + \mu R/2}{r_1 r_2} \\ \frac{\partial\varphi}{\partial x} &= -\frac{y}{x^2 + y^2} \quad \frac{\partial\varphi}{\partial y} = \frac{x}{x^2 + y^2} \quad \frac{\partial\varphi}{\partial z} = 0 \end{aligned} \quad (7)$$

بنابراین، ژاکوبی  $J$  را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$J = \frac{1}{(r_1 r_2)^2} \begin{vmatrix} \mu x & \mu y & \mu z + \nu R / \gamma \\ -\nu x & -\nu y & -\nu z - \nu R / \gamma \\ -y / (x^2 + y^2) & x / (x^2 + y^2) & 0 \end{vmatrix} = \frac{1}{(r_1 r_2)^2} \frac{R}{\gamma} (\mu^2 - \nu^2) \quad (8)$$

چون

$$\mu^2 - \nu^2 = \frac{\gamma^2 r_1 r_2}{R^2} \quad (9)$$

بالاخره، به دست می‌آوریم

$$J = \frac{1}{R^2 (\mu^2 - \nu^2)} \quad (10)$$

ج) اساس محاسبه دقیق

معادله‌ای را که باید برای تأمین ترازهای انرژی الکترون واقع در میدان کولنی دو پروتون ثابت حل کنیم، در تقریب بورن اینهایمر می‌توانیم به صورت زیر بنویسیم

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{r_1} - \frac{e^2}{r_2} + \frac{e^2}{R} \right] \varphi(\mathbf{r}) = E \varphi(\mathbf{r}) \quad (11)$$

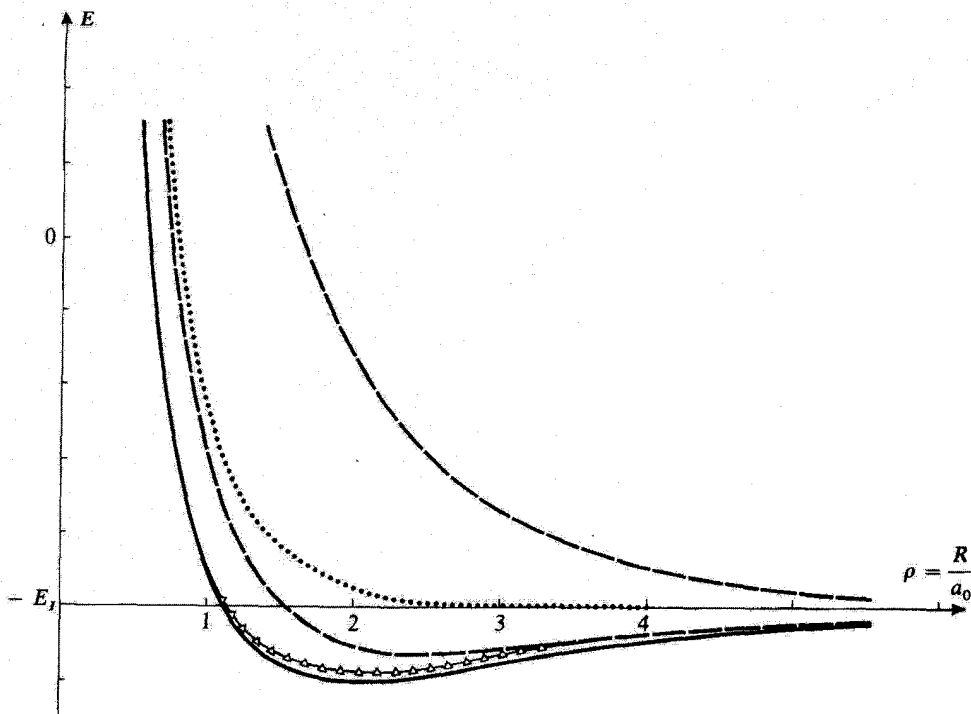
اگر به مختصات بیضوی تعریف شده در (۳) برویم، می‌توانیم متغیرهای  $\mu$ ،  $\nu$  و  $\varphi$  را از هم جدا کنیم. با حل معادلاتی که به این ترتیب به دست می‌آیند، یک طیف گسسته از انرژیهای ممکن برای هر مقدار  $R$  به دست می‌آوریم. این محاسبات را در اینجا انجام نخواهیم داد، ولی صرفاً تغییرات انرژی حالت پایه را نسبت به  $R$  نشان می‌دهیم (منحنی خط پر در شکل ۲). این کار به ما امکان خواهد داد تا نتایجی را که با روش وردشی به دست می‌آوریم، با مقادیری که از حل دقیق معادله (۱۱) به دست می‌آیند، مقایسه کنیم.

۲. محاسبه وردشی انرژیها

الف) انتخاب کتهای آزمایشی

فرض کنید  $R$  خیلی بزرگتر از  $a_0$  باشد. اگر مقادیری از  $r_1$  که در حدود  $a_0$  هستند، مورد نظر ما باشند، عملاً داریم

$$\frac{e^2}{r_1} \simeq \frac{e^2}{R} \quad \text{برای} \quad R, r_2 \gg a_0 \quad (12)$$



شکل ۲ تغییر انرژی  $E$  یون مولکولی  $H_2^+$  نسبت به فاصله  $R$  بین دو پروتون.

خط پر: انرژی کل دقیق حالت پایه (پایداری یون  $H_2^+$  ناشی از وجود یک مینیموم در این منحنی است).

نقطه چین: عنصر قطر اصلی  $H_{11} = H_{22}$  ی هامیلتونی  $H$  (تغییر این عنصر ماتریسی نمی تواند پیوند شیمیایی

را تشریح کند).

خط چین: نتایج محاسبه وردشی ساده بخش ۲ برای حالت های پیوندی و بادپیوندی (این محاسبه، هر چند به طور

تقریب، پایداری یون  $H_2^+$  را تشریح می کند).

مثلاً: نتایج محاسبه وردشی دقیقتر بخش ۳-الف (در نظر گرفتن اوربیتال های اتمی با شعاع های قابل تنظیم

به طور قابل ملاحظه ای دقت را زیاد می کند، بخصوص در فواصل کوتاه).

در این صورت هامیلتونی

$$H = \frac{P^2}{2m} - \frac{e^2}{r_1} - \frac{e^2}{r_2} + \frac{e^2}{R} \quad (13)$$

به هامیلتونی یک اتم هیدروژن متمرکز در  $P_1$  بسیار نزدیک است. مسلماً وقتی  $R$  بسیار بزرگتر از

$a_0$ ، و  $r_2$  در حدود  $a_0$  باشد، نتایج مشابهی به دست می آید. بنابراین، وقتی دو پروتون خیلی از

یکدیگر دور باشند، ویژه‌توابع هامیلتونی (۱۳)، عملاً تابع‌موجهای مانای اتمهای هیدروژن خواهند بود.

البته وقتی  $a$  در مقابل  $R$  قابل اغماض نباشد، دیگر این مطلب درست نیست. لیکن، ملاحظه می‌کنیم که بهتر است، برای تمام  $R$ ها، یک دسته کتهای آزمایشی را که از حالت‌های اتمی متمرکز در هر یک از دو پروتون ساخته شده‌اند، انتخاب کنیم. این انتخاب، کاربرد یک روش عمومی موسوم به روش ترکیب خطی اوربیتال‌های اتمی، را در مورد خاص یون  $H_2^+$  تشکیل می‌دهد. به‌طور دقیقتر، کتهایی که حالت‌های ۱s دو اتم هیدروژن را توصیف می‌کنند،  $|\varphi_1\rangle$  و  $|\varphi_2\rangle$  می‌نامیم

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{r} | \varphi_1 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\rho_1} \\ \langle \mathbf{r} | \varphi_2 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\rho_2}\end{aligned}\quad (14)$$

تمام کتهای متعلق به زیرفضای برداری  $\mathcal{F}$  که توسط این دوکت پدید می‌آید، یعنی مجموعه کتهای  $|\psi\rangle$  را به‌عنوان کتهای آزمایشی به‌گونه‌ای انتخاب می‌کنیم که برای آنها

$$|\psi\rangle = c_1 |\varphi_1\rangle + c_2 |\varphi_2\rangle \quad (15)$$

در این صورت، روش وردشی (مکمل ۵ از فصل ۱۱) مشتمل است بر یافتن مقادیر مانای

$$\langle H \rangle = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (16)$$

در محدوده این زیرفضا. چون این یک زیرفضای برداری است، مقدار متوسط  $\langle H \rangle$  زمانی ماکزیموم یا مینیموم است که  $|\psi\rangle$  یک ویژه‌بردار  $H$  در داخل این زیرفضای  $\mathcal{F}$  و ویژه‌مقدار مربوط به آن، تقریبی از یک ویژه‌مقدار واقعی  $H$  در فضای حالت کل را تشکیل دهد.

ب) معادله ویژه‌مقدار هامیلتونی  $H$  در زیرفضای برداری  $\mathcal{F}$  کت آزمایشی

تفکیک معادله ویژه‌مقدار  $H$  در داخل زیرفضای  $\mathcal{F}$ ، با توجه به اینکه  $|\varphi_1\rangle$  و  $|\varphi_2\rangle$  متعامد نیستند، کمی پیچیده است.



هر بردار  $|\psi\rangle$  از  $\mathcal{H}$ ، به شکل (۱۵) است. برای اینکه این بردار، یک ویژه بردار  $H$  در  $\mathcal{H}$  با ویژه مقدار  $E$  باشد، لازم و کافی است که داشته باشیم

$$\langle \varphi_i | H | \psi \rangle = E \langle \varphi_i | \psi \rangle \quad i = 1, 2 \quad (17)$$

یعنی

$$\sum_{j=1}^2 c_j \langle \varphi_i | H | \varphi_j \rangle = E \sum_{j=1}^2 c_j \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle \quad (18)$$

قرار می دهیم

$$\begin{aligned} S_{ij} &= \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle \\ H_{ij} &= \langle \varphi_i | H | \varphi_j \rangle \end{aligned} \quad (19)$$

باید دستگاه دو معادله خطی همگن زیر را حل کنیم

$$\begin{aligned} (H_{11} - ES_{11})c_1 + (H_{12} - ES_{12})c_2 &= 0 \\ (H_{21} - ES_{21})c_1 + (H_{22} - ES_{22})c_2 &= 0 \end{aligned} \quad (20)$$

این دستگاه فقط به شرطی دارای یک جواب غیر صفر است که داشته باشیم

$$\begin{vmatrix} H_{11} - ES_{11} & H_{12} - ES_{12} \\ H_{21} - ES_{21} & H_{22} - ES_{22} \end{vmatrix} = 0 \quad (21)$$

بنابراین، ویژه مقدارهای ممکن  $E$ ، ریشه های یک معادله درجه دوم اند.

ج) روی هم افتادگی، انتگرالهای کولنی و تشدید

$|\varphi_1\rangle$  و  $|\varphi_2\rangle$  بهنجارند؛ در نتیجه

$$S_{11} = S_{22} = 1 \quad (22)$$

از طرف دیگر،  $|\varphi_1\rangle$  و  $|\varphi_2\rangle$  متعامد نیستند. چون تابع موجهای (۱۴) وابسته به این دو کت، حقیقی اند، داریم

$$S_{12} = S_{21} = S \quad (23)$$

که در آن

$$S = \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle = \int d^3r \varphi_1(\mathbf{r}) \varphi_2(\mathbf{r}) \quad (24)$$

$S$  انتگرال روی هم افتادگی نامیده می شود، زیرا تنها نقاطی از فضا در آن سهم دارند که در آن نقاط تابع موجهای اتمی  $\varphi_1$  و  $\varphi_2$  هر دو مخالف صفر باشند (این نقاط، در صورتی وجود دارند که بخشهایی از دو اوربیتال اتمی روی هم بیفتند). با یک محاسبه ساده داریم

$$S = e^{-\rho} \left[ 1 + \rho + \frac{1}{3} \rho^2 \right] \quad (25)$$

برای به دست آوردن این نتیجه، می توانیم از مختصات بیضوی (۳) استفاده کنیم، زیرا

$$\begin{aligned} \rho_1 &= \frac{\mu + \nu}{2} \rho \\ \rho_2 &= \frac{\mu - \nu}{2} \rho \end{aligned} \quad (26)$$

بنابر عبارت (۱۴) برای تابع موجها و عبارت مربوط به عنصر حجمی، (۴)، باید محاسبه زیر را انجام دهیم

$$\begin{aligned} S &= \frac{1}{\pi a_0^3} \int_1^{+\infty} d\mu \int_{-1}^1 d\nu \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{\rho^3 a_0^3}{\lambda} (\mu^2 - \nu^2) e^{-\mu\rho} \\ &= \frac{\rho^3}{2} \int_1^{+\infty} d\mu \left( \mu^2 - \frac{1}{3} \right) e^{-\mu\rho} \end{aligned} \quad (27)$$

که به سادگی رابطه (۲۵) را به دست می دهد

به واسطه تقارن داریم

$$H_{11} = H_{22} \quad (28)$$

طبق رابطه (۱۳) برای هامیلتونی  $H$ ، به دست می آوریم

$$H_{11} = \langle \varphi_1 | \left[ \frac{P^2}{2m} - \frac{e^2}{r_1} \right] | \varphi_1 \rangle - \langle \varphi_1 | \frac{e^2}{r_2} | \varphi_1 \rangle + \frac{e^2}{R} \langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle \quad (29)$$

حال،  $|\varphi_1\rangle$  یک ویژه‌کمت بهنجار مربوط به  $(P^2/2m - e^2/r_1)$  است. بنابراین، جمله اول (۲۹) برابر است با انرژی  $(-E_I)$  حالت پایه اتم هیدروژن، و جمله سوم برابر است با  $e^2/R$ ؛ بنابراین داریم

$$H_{11} = -E_I + \frac{e^2}{R} - C \quad (30)$$

که در آن

$$C = \langle \varphi_1 | \frac{e^2}{r_2} | \varphi_1 \rangle = \int d^3r \frac{e^2}{r_2} [\varphi_1(\mathbf{r})]^2 \quad (31)$$

$C$ ، انتگرال کولنی نامیده می‌شود. این انتگرال (با تقریب یک تغییر علامت)، برهم‌کنش الکتروستاتیکی بین پروتون  $P_2$  و توزیع بار وابسته به الکترون را، در وقتی که الکترون در حالت اتمی  $1s$  در اطراف پروتون  $P_1$  است، توصیف می‌کند. به دست می‌آوریم

$$C = E_I \times \frac{2}{\rho} [1 - e^{-\rho} (1 + \rho)] \quad (32)$$

برای به دست آوردن این نتیجه، بار دیگر از مختصات بیضوی استفاده می‌کنیم

$$\begin{aligned} C &= \frac{e^2}{a_0 \rho} \frac{1}{\pi a_0^3} \frac{\rho^3 a_0^3}{\lambda} \int (\mu^2 - \nu^2) d\mu d\nu d\varphi \frac{2}{\mu - \nu} e^{-(\mu+\nu)\rho} \\ &= E_I \rho^2 \int_1^{+\infty} d\mu \int_{-1}^1 d\nu (\mu + \nu) e^{-(\mu+\nu)\rho} \end{aligned} \quad (33)$$

که پس از انتگرالگیریهای مقدماتی به نتیجه (۳۲) منتهی می‌شود.

در فرمول (۳۰)،  $C$  را می‌توان به‌عنوان تغییر انرژی دافعه  $e^2/R$  دو پروتون در نظر گرفت؛ وقتی الکترون در حالت  $|\varphi_1\rangle$  قرار دارد، توزیع بار مربوط، پروتون  $P_1$  را "می‌پوشاند." چون  $|\varphi_1(\mathbf{r})|^2$  حول  $P_1$  دارای تقارن کروی است، اگر پروتون  $P_2$  به قدر کافی از آن دور می‌بود، این توزیع بار برای

$P_2$  مانند یک بار نقطه‌ای منفی  $e$  که در مرکز  $P_1$  قرار دارد، ظاهر می‌شود، (که در این صورت بار پروتون  $P_1$  کلاً حذف می‌گردد). این عمل، در واقع اتفاق نمی‌افتد مگر اینکه  $R$  خیلی بزرگتر از  $a_0$  باشد

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \left[ \frac{e^r}{R} - C \right] = 0 \quad (34)$$

برای  $R$  های متناهی، اثر پوشش می‌تواند فقط جزئی باشد، و باید داشته باشیم

$$\frac{e^r}{R} - C > 0 \quad (35)$$

تغییرات انرژی  $(e^r/R - C)$  نسبت به  $R$  در شکل ۲ با منحنی نقطه‌چین نشان داده شده است. واضح است که تغییر  $H_{11}$  (یا  $H_{22}$ ) نسبت به  $R$  نمی‌تواند پیوند شیمیایی را توضیح بدهد، زیرا این منحنی دارای مینیموم نیست.

بالاخره،  $H_{12}$  و  $H_{21}$  را حساب می‌کنیم. چون تابع‌موجهای  $\varphi_1(r)$  و  $\varphi_2(r)$  حقیقی‌اند، داریم

$$H_{12} = H_{21} \quad (36)$$

از رابطه (۱۳) برای هامیلتونی داریم

$$H_{12} = \langle \varphi_1 | \left[ \frac{P^2}{2m} - \frac{e^r}{r} \right] | \varphi_2 \rangle + \frac{e^r}{R} \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle - \langle \varphi_1 | \frac{e^r}{r_1} | \varphi_2 \rangle \quad (37)$$

یعنی، طبق تعریف (۲۴) از  $S$

$$H_{12} = -E_I S + \frac{e^r}{R} S - A \quad (38)$$

که در آن

$$A = \langle \varphi_1 | \frac{e^r}{r_1} | \varphi_2 \rangle = \int d^3r \varphi_1(r) \frac{e^r}{r_1} \varphi_2(r) \quad (39)$$

$A$  را انتگرال شدید می‌نامیم. مقدار آن برابر است با

$$A = E_I \times 2e^{-\rho} (1 + \rho) \quad (40)$$

استفاده از مختصات بیضوی به ما امکان می‌دهد که  $A$  را به صورت زیر بنویسیم

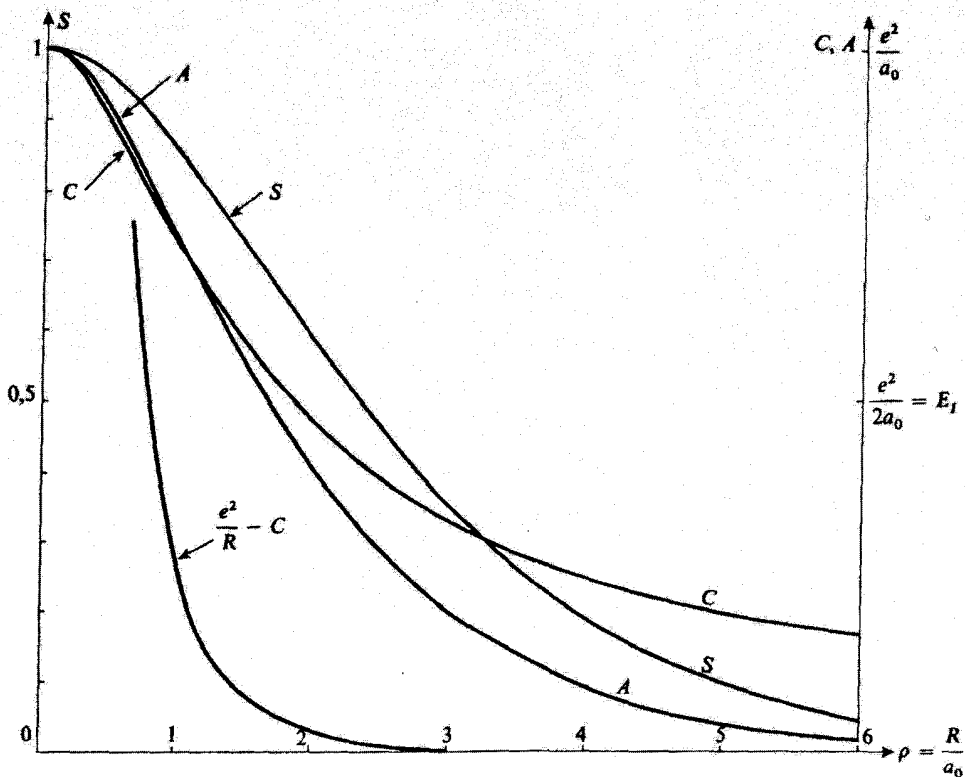
$$\begin{aligned} A &= \frac{e^2}{a_0} \frac{1}{\pi a_0^2} \frac{\rho^2 a_0^2}{\lambda} \int (\mu^2 - \nu^2) d\mu d\nu d\varphi \frac{2e^{-\mu\rho}}{(\mu + \nu)\rho} \\ &= \rho^2 E_I \int_1^{+\infty} d\mu \int_0^{\mu} 2\nu e^{-\mu\rho} \end{aligned} \quad (41)$$

این واقعیت که  $H_{12}$  مخالف صفر است، بیان‌کننده امکان "جهیدن" الکترون از مجاورت یک پروتون به مجاورت پروتون دیگر است. اگر، در یک زمانی، الکترون در حالت  $|\varphi_1\rangle$  (یا  $|\varphi_2\rangle$ ) باشد، تحت تأثیر عنصر ماتریسی غیرقطری  $H_{12}$ ، بین این دو مکان یا گذشت زمان، نوسان می‌کند. بنابراین،  $H_{12}$  عامل پدیدهٔ شدید کوانتومی است، که به طور کیفی در بخش ۴-۳-۲-ج فصل ۴ آن را تشریح کردیم، (به این جهت است که به  $A$  نام انتگرال داده شده است).  
به طور خلاصه، پارامترهایی که تابعی از  $R$  هستند و در معادله (۲۱) که انرژیهای تقریبی  $E$  را می‌دهد، وارد شده‌اند، عبارت‌اند از

$$\begin{aligned} S_{11} &= S_{22} = 1 \\ S_{12} &= S_{21} = S \\ H_{11} &= H_{22} = -E_I + \frac{e^2}{R} - C \\ H_{12} &= H_{21} = \left( -E_I + \frac{e^2}{R} \right) S - A \end{aligned} \quad (42)$$

که در آن  $S$ ،  $C$  و  $A$  توسط (۲۵)، (۳۲) و (۴۰) داده شده و در شکل ۳ نشان داده شده‌اند. توجه کنید که عناصر غیرقطری دترمینان (۲۱)، تنها وقتی مقادیر قابل ملاحظه‌ای دارند که اوربیتالهای  $\varphi_1(\mathbf{r})$  و  $\varphi_2(\mathbf{r})$  به طور جزئی روی هم افتادگی داشته باشند، زیرا حاصلضرب  $\varphi_1(\mathbf{r})\varphi_2(\mathbf{r})$  هم در تعریف (۳۹) از  $A$  و هم در تعریف  $S$ ، ظاهر می‌شود.

۱. بعضی از مؤلفین  $A$  را "انتگرال تعویض" می‌نامند. ما ترجیح می‌دهیم که استفاده از این نام را به انتگرال نوع دیگری که در سیستمهای با ذرات زیاد به آن برخوردیم خورد، محدود کنیم (مکمل ۲ از فصل ۴، بخش ۴-۲-ج-۲).



شکل ۳ تغییرات  $S$  (انترگرال روی هم افتادگی)،  $C$  (انترگرال کولنی) و  $A$  (انترگرال تشدید) نسبت به  $\rho = R/a_0$  وقتی  $R \rightarrow \infty$ ،  $S$  و  $A$  به طور نمایی به سمت صفر میل می کنند، در حالی که  $C$  فقط به صورت  $e^2/R$  کاهش می یابد (با این همه، برهم کنش "پوشش شده"  $(e^2/R - C)$  ی پروتون  $P_1$  با اتم متمرکز در  $P_2$  نیز به طور نمایی کاهش می یابد).

(د) حالت‌های پیوندی و پادپیوندی

۱. محاسبه انرژیهای تقریبی

قرار می دهیم

$$E = \varepsilon E_I$$

$$A = \alpha E_I$$

$$C = \gamma E_I$$

سپس معادله (۲۱) را می‌توانیم به صورت زیر بنویسیم

$$\begin{vmatrix} -1 + \frac{\gamma}{\rho} - \gamma - \varepsilon & \left(-1 + \frac{\gamma}{\rho}\right) S - \alpha - \varepsilon S \\ \left(-1 + \frac{\gamma}{\rho}\right) S - \alpha - \varepsilon S & -1 + \frac{\gamma}{\rho} - \gamma - \varepsilon \end{vmatrix} = 0 \quad (44)$$

یا

$$\left[\gamma + \varepsilon + 1 - \frac{\gamma}{\rho}\right]^2 = \left[\alpha + \left(\varepsilon + 1 - \frac{\gamma}{\rho}\right) S\right]^2 \quad (45)$$

این معادله برای  $\varepsilon$  دو مقدار زیر را می‌دهد

$$\varepsilon_+ = -1 + \frac{\gamma}{\rho} + \frac{\alpha - \gamma}{1 - S} \quad (46\text{الف})$$

$$\varepsilon_- = -1 + \frac{\gamma}{\rho} - \frac{\alpha + \gamma}{1 + S} \quad (46\text{ب})$$

وقتی  $\rho$  به سمت بینهایت میل کند،  $\varepsilon_+$  و  $\varepsilon_-$  هر دو به سمت  $-1$  میل می‌کنند. این یعنی، همان طور که از (۲الف) انتظار داریم، دو انرژی تقریبی  $E_{\pm}$  به سمت  $-E_I$ ، انرژی حالت پایه یک اتم هیدروژن منزوی، میل می‌کنند. به علاوه، بهتر است که این مقدار را به عنوان مبدأ انرژی انتخاب کنیم، یعنی، قرار دهیم

$$\Delta E = E(\rho) - E(\infty) = E + E_I \quad (47)$$

با استفاده از (۲۵)، (۳۲) و (۴۰)، انرژیهای تقریبی  $\Delta E_+$  و  $\Delta E_-$  را می‌توانیم به صورت زیر بنویسیم

$$\Delta E_{\pm} = E_I \left\{ \frac{\gamma}{\rho} \pm \frac{\gamma e^{-\rho}(1 + \rho) \mp \frac{\gamma}{\rho} [1 - e^{-\gamma\rho}(1 + \rho)]}{1 \mp e^{-\rho} \left(1 + \rho + \frac{\rho^2}{3}\right)} \right\} \quad (48)$$

تغییرات  $\Delta E_{\pm}/E_I$  نسبت به  $\rho$  در شکل ۲ با خط چین نشان داده شده است. مشاهده می‌کنیم که  $\Delta E_-$  به‌ازاء مقدار معینی از فاصله  $R$  بین دو پروتون، دارای یک مینیموم منفی است. هر چند این یک تقریب است (شکل ۲)، ولی وجود پیوند شیمیایی را تشریح می‌کند.

همان طور که اشاره کردیم، منحنی تغییرات عناصر قطری  $H_{11}$  و  $H_{22}$ ی درمیان (۲۱) نسبت به  $R$  مینیموم ندارند (منحنی نقطه چین در شکل ۲). بنابراین، مینیموم  $\Delta E_-$  از عناصر غیر قطری  $H_{12}$  و  $S_{12}$  ناشی می شود. این نشان می دهد که پدیده پیوند شیمیایی تنها زمانی ظاهر می شود که اوربیتالهای الکترونی دواتمی که در پیوند مشارکت دارند به اندازه کافی روی هم افتادگی داشته باشند.

۲. ویژه حالت های  $H$  در داخل زیرفضای  $\mathcal{F}$

ویژه حالت مربوط به  $E_-$ ، یک حالت پیوندی، و ویژه حالت مربوط به  $E_+$ ، یک حالت پادپیوندی نامیده می شوند، زیرا  $E_+$  همواره از انرژی  $(-E_I)$ ی سیستم متشکل از یک اتم هیدروژن در حالت پایه و یک پروتون بینهایت دور از آن، بزرگتر باقی می ماند.

بنابراین (۴۵)

$$\gamma + \varepsilon + 1 - \frac{\rho}{\rho} = \pm \left[ \alpha + \left( \varepsilon + 1 - \frac{\rho}{\rho} \right) S \right] \quad (49)$$

سپس از دستگاه (۲۰) داریم

$$c_1 \pm c_2 = 0 \quad (50)$$

بنابراین، حالت های پیوندی و پادپیوندی، ترکیبات خطی متقارن و پادمقارنی از کتهای  $|\varphi_1\rangle$  و  $|\varphi_2\rangle$  هستند. برای بهنجار کردن آنها باید به خاطر داشته باشیم که  $|\varphi_1\rangle$  و  $|\varphi_2\rangle$  متعامد نیستند (حاصل ضرب اسکالر آنها برابر با  $S$  است). بنابراین، به دست می آوریم

$$|\psi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2(1-S)}} [|\varphi_1\rangle - |\varphi_2\rangle] \quad (الف ۵۱)$$

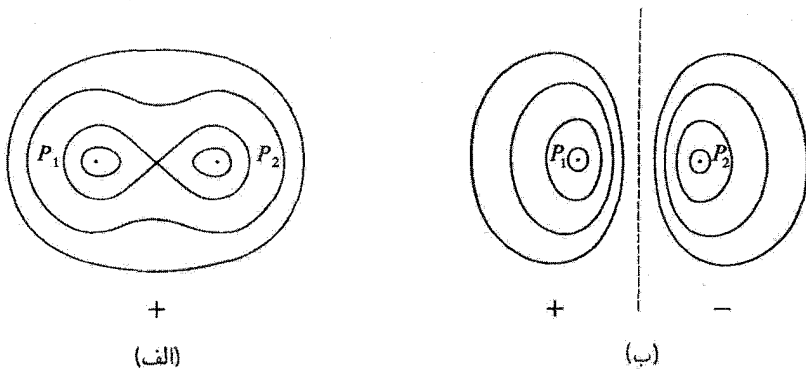
$$|\psi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2(1+S)}} [|\varphi_1\rangle + |\varphi_2\rangle] \quad (ب ۵۱)$$

توجه کنید که حالت پیوندی  $|\psi_-\rangle$ ، وابسته به  $E_-$ ، نسبت به جابه جایی  $|\varphi_1\rangle$  و  $|\varphi_2\rangle$  متقارن است، حال آنکه حالت پادپیوندی، پادمقارن است.

یادداشت:

می توانستیم انتظار داشته باشیم که ویژه حالت های  $H$  در داخل زیرفضای  $\mathcal{F}$ ، ترکیبات متقارن و





شکل ۴ ترسیم طرح وار اوربیتال پیوندی مولکولی (شکل الف) و اوربیتال پادپیوندی مولکولی (شکل ب) برای یون  $H_2^+$  سطح مقطع دسته سطوحی را که برای آنها مدول  $|\psi|$  تابع موج دارای یک مقدار ثابت معین است، با صفحه شامل  $P_1 P_2$  نشان داده‌ایم. اینها سطوح دورانی حول  $P_1 P_2$  اند (۴ سطح مربوط به ۴ مقدار متفاوت  $|\psi|$  نشان داده شده است). علامتهای + و - در شکل، علامتهای تابع موج (که حقیقی است) در نواحی مربوط هستند. خط چین، عبارت است از اثر صفحه عمودمنصف  $P_1 P_2$ ، که برای اوربیتال پادپیوندی، یک صفحه گرهی است.

بازمقایسه از  $|\psi_1|$  و  $|\psi_2|$  باشند: برای مکانهای معین دو پروتون، نسبت به صفحه عمودمنصف  $P_1 P_2$  تقارن وجود دارد، و اگر نقش دو پروتون جابه‌جا شود،  $H$  بدون تغییر باقی می‌ماند. ■

حالاتهای پیوندی و پادپیوندی، حالاتهای مانای تقریبی سیستم مورد نظرند. به‌علاوه، در مکمل ۵ از فصل ۱۱ متذکر شدیم که روش وردشی می‌تواند یک تقریب معتبر برای انرژیها بدهد اما نتیجه‌ای که برای توابع خاص می‌دهد بیشتر قابل بحث است. لیکن، آموزنده است که، برای داشتن یک دید کلی از سازوکار پیوند شیمیایی، تابع موجهای وابسته به حالاتهای پیوندی و پادپیوندی را، که غالباً اوربیتالهای مولکولی پیوندی و پادپیوندی نامیده می‌شوند، به‌طور ترسیمی نشان بدهیم. برای این منظور، به‌عنوان مثال، سطوح با  $|\psi|$ های مساوی را رسم می‌کنیم (مکان هندسی نقاطی از فضا که برای آنها مدول  $|\psi|$  تابع موج دارای یک مقدار معین است) اگر  $\psi$  حقیقی باشد، نواحی‌ای را که در آنها  $\psi$  مثبت (یا منفی) است با + (یا -) نمایش می‌دهیم. این کاری است که برای  $\psi_+$  و  $\psi_-$  در شکل ۴ انجام شده است (سطوح با  $|\psi|$ های مساوی، سطوح دوران حول محور  $P_1 P_2$  هستند، و شکل ۴ تنها سطح مقطع آنها را با صفحه‌ای که شامل  $P_1 P_2$  است، نشان می‌دهد). اختلاف بین اوربیتال پیوندی و اوربیتال پادپیوندی، بسیار زیاد است. در اولی، ابر الکترونی "کشیده می‌شود" تا هر دو پروتون را شامل شود، و حال آنکه در دومی، احتمال مکانی الکترون در صفحه عمودمنصف  $P_1 P_2$ ، صفر است.

یادداشت:

می‌توانیم مقدار متوسط انرژی پتانسیل در حالت  $|\psi_{-}\rangle$  را حساب کنیم، که، اگر (۵۱ب)، (۳۱) و (۳۹) را به‌کار ببریم، برابر است با

$$\begin{aligned} \langle V \rangle &= \langle \psi_{-} | \left[ \frac{e^{\gamma}}{R} - \frac{e^{\gamma}}{r_1} - \frac{e^{\gamma}}{r_2} \right] | \psi_{-} \rangle \\ &= \frac{e^{\gamma}}{R} - \frac{1}{1+S} \left[ \langle \varphi_1 | \frac{e^{\gamma}}{r_1} | \varphi_1 \rangle + \langle \varphi_1 | \frac{e^{\gamma}}{r_1} | \varphi_2 \rangle \right. \\ &\quad \left. + \langle \varphi_1 | \frac{e^{\gamma}}{r_2} | \varphi_1 \rangle + \langle \varphi_1 | \frac{e^{\gamma}}{r_2} | \varphi_2 \rangle \right] \\ &= E_I \left[ \frac{\gamma}{\rho} - \frac{1}{1+S} (\gamma + 2\alpha + \gamma) \right] \end{aligned} \quad (52)$$

با کم کردن این مقدار از (۴۶ب)، انرژی جنبشی به‌دست می‌آید

$$\begin{aligned} \langle T \rangle &= \left\langle \frac{\mathbf{P}^2}{2m} \right\rangle = \langle H - V \rangle \\ &= E_I \frac{1}{1+S} (1 - S + \alpha) \end{aligned} \quad (53)$$

بعداً (در بخش ۵) بحث خواهیم کرد که (۵۲) و (۵۳) تا چه میزانی برای انرژیهای جنبشی و پتانسیل تقریبهای خوبی می‌دهند.

### ۳. نقد مدل پیشین. اصلاحات ممکن الف) نتایج برای $R$ کوچک

حال وقتی  $R \rightarrow 0$ ، انرژی حالت پیوندی و تابع موج مربوط به‌چه صورت در می‌آیند؟ از شکل ۳ ملاحظه می‌کنیم که وقتی  $\rho$  به‌سمت صفر میل می‌کند،  $S$ ،  $A$  و  $C$  به‌ترتیب به‌سمت مقادیر  $1$ ،  $2E_I$  و  $2E_I$  میل می‌کنند. اگر جمله دافعه  $e^{\gamma}/R$  بین دو پروتون را کم کنیم تا انرژی الکترونی را به‌دست بیاوریم، نتیجه می‌شود

$$E_{-} - \frac{e^{\gamma}}{R} \xrightarrow{R \rightarrow 0} -2E_I \quad (54)$$

به‌علاوه، چون  $|\varphi_1\rangle$  به‌سمت  $|\varphi_2\rangle$  میل می‌کند،  $|\psi_{-}\rangle$  به  $|\varphi_1\rangle$  (حالت پایه  $1s$  اتم هیدروژن) تقلیل می‌یابد.

واضح است که این نتیجه نادرست است. برای  $R = 0$ ، آنچه را که هم‌ارز یک یون هلیوم  $He^+$  است، داریم.<sup>۱</sup> انرژی الکترونی حالت پایه  $H^+$  باید، به‌ازاء  $R = 0$ ، بر انرژی الکترونی حالت پایه  $He^+$  منطبق شود. چون هسته هلیوم، یک هسته با  $Z = 2$  است، این انرژی برابر با  $-3E_I$  نیست، بلکه برابر است با (مکمل ۱ از فصل ۷)

$$-Z^2 E_I = -2 E_I \quad (55)$$

به‌علاوه، تابع موج  $\psi_-(r)$  نباید به‌سمت  $\psi_1(r) = (\pi a_0^3)^{-1/2} e^{-r/a_0}$  میل کند بلکه به‌جای آن باید به‌سمت  $\psi_2(r) = (\pi a_0^3 / Z^3)^{-1/2} e^{-Zr/a_0}$  میل کند (مدار بور دوبار کوچکتر است). این مطلب، به‌ما امکان می‌دهد که بفهمیم چرا عدم توافق میان نتیجه دقیق و نتیجه بخش ۲ فوق، برای مقادیر کوچک  $R$  مهم می‌شود (شکل ۲): در این محاسبه از اوربیتالهای اتمی‌ای استفاده می‌شود که وقتی دو پروتون خیلی به یکدیگر نزدیک‌اند بسیار گسترده‌اند.

بنابراین، یک اصلاح ممکن این است که به‌خاطر این استدلالهای فیزیکی، دسته‌کنهای آزمایشی را توسعه بدهیم و از کتهایی به‌صورت زیر استفاده کنیم

$$|\psi\rangle = c_1 |\varphi_1(Z)\rangle + c_2 |\varphi_2(Z)\rangle \quad (56)$$

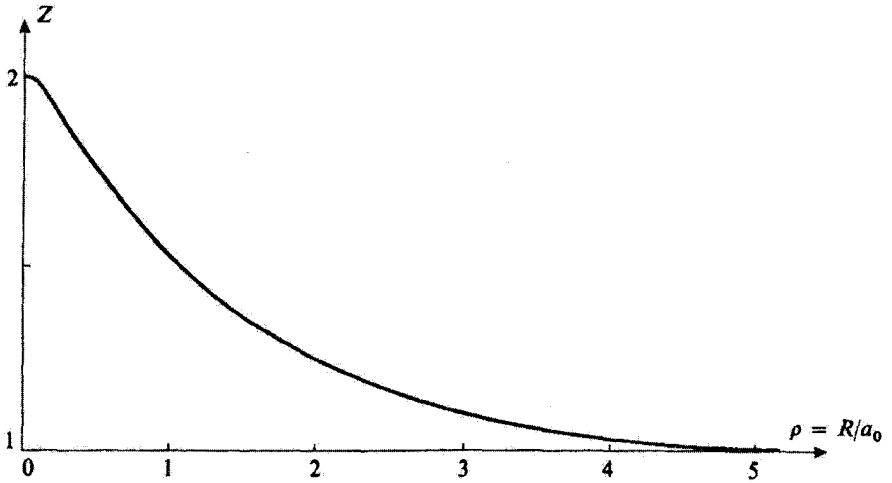
که در آن  $|\varphi_1(Z)\rangle$  و  $|\varphi_2(Z)\rangle$  به اوربیتالهای اتمی  $1s$  با شعاع  $a_0/Z$  و متمرکز در  $P_1$  و  $P_2$ ، وابسته‌اند. حالت پایه، بنا به دلایل تقارن، همیشه متناظر با  $c_1 = c_2$  است. در جستجوی مقداری از  $Z$  که انرژی را مینیموم می‌کند  $Z$  را برای هر مقدار  $R$ ، به‌صورت یک پارامتر وردشی، در نظر می‌گیریم. محاسبه را می‌توانیم کلاً در مختصات بیضوی انجام بدهیم. در می‌یابیم (شکل ۵)، همان‌گونه که باید، مقدار بهین  $Z$  از  $Z = 2$  به‌ازاء  $R = 0$ ، به  $Z = 1$  برای  $R \rightarrow \infty$  کاهش می‌یابد.

منحنی به‌دست آمده برای  $\Delta E_-$ ، به منحنی دقیق خیلی نزدیکتر است (شکل ۲ را ببینید). جدول ۱ مقادیر طول و عرض مینیموم  $\Delta E_-$  را که از روی مدل‌های مختلفی که در این مکمل در نظر گرفتیم، به‌دست آمده‌اند، نشان می‌دهد. از این جدول می‌توان دید که انرژیهای به‌دست آمده به‌روش وردشی همواره از انرژی دقیق حالت پایه بیشترند؛ به‌علاوه، ملاحظه می‌کنیم که توسعه دادن دسته‌کنهای آزمایشی، نتایج به‌دست آمده برای انرژی را بهبود می‌بخشد.

### ب) نتایج برای $R$ بزرگ

وقتی  $R \rightarrow \infty$ ، از (۴۸) مشاهده می‌کنیم که  $E_+$  و  $E_-$  به‌طور نمایی به‌سمت یک مقدار  $-E_I$  میل می‌کنند. در واقع، این حد نباید به‌این سرعت به‌دست بیاید. برای ملاحظه این مطلب، از یک روش اختلال استفاده خواهیم کرد، مانند مکمل ۳ از فصل ۱۱ (نیروهای وان‌دروالس) یا مکمل ۵ از فصل ۱۲ (اثر استارک اتم هیدروژن). ابتدا، اختلال انرژی یک اتم هیدروژن (در حالت  $1s$ )، واقع در  $P_2$ ، را که در اثر

۱. البته هسته هلیوم، علاوه بر دو پروتون شامل یک یا دو نوترون هم هست.

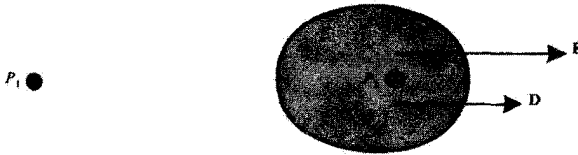


شکل ۵ برای هر یک مقدار از فاصله بین هسته‌ای، مقدار  $Z$  که انرژی را مینیموم می‌کند، محاسبه شده است. برای  $R = 0$ ، هم‌ارز یون  $\text{He}^+$  را داریم و واقعاً  $Z$  را مساوی ۲ به دست می‌آوریم. برای  $R \gg a_0$ ، اساساً یک اتم هیدروژن منزوی داریم که  $Z = 1$  را به دست می‌دهد. بین این دو حد نهایی،  $Z$  یک تابع نزولی از  $\rho$  است. انرژیهای بهین مربوطه، در شکل ۲ توسط مثلثها نشان داده شده‌اند.

جدول ۱

عمق مینیموم $\Delta E_-$	فاصله تعادلی بین دو پروتون (طول مینیموم $\Delta E_-$ )	
۱٫۷۶eV	$۲٫۵۰ a_0$	روش وردشی بخش ۱ (اوربیتالهای ۱s با $Z = 1$ با ... ..)
۲٫۳۵eV	$۲٫۰۰ a_0$	روش وردشی بخش ۲-الف (اوربیتالهای ۱s با $Z$ متغیر) ... ..
۲٫۷۳eV	$۲٫۰۰ a_0$	روش وردشی بخش ۲-ب (اوربیتالهای هیبرید با متغیرهای $Z, Z', \sigma$ )
۲٫۷۹eV	$۲٫۰۰ a_0$	مقادیر دقیق ...

حضور یک پروتون  $P_1$  واقع در فاصله  $R$  ( $R \gg a_0$  و لذا  $\rho \gg 1$ ) ایجاد می‌شود، محاسبه می‌کنیم. پروتون  $P_1$ ، در اطراف  $P_2$  یک میدان الکتریکی  $E$  به وجود می‌آورد، که به صورت  $1/R^2$  تغییر می‌کند. این میدان، اتم هیدروژن را قطبیده می‌کند و باعث می‌شود که یک گشتاور دوقطبی الکتریکی  $D$ ، متناسب با



شکل ۶ ابر الکترونی اتم هیدروژن متمرکز در  $P_2$ ، در اثر میدان الکتریکی  $E$  که توسط پروتون  $P_1$  ایجاد می‌شود، تغییر شکل می‌دهد. و این اتم یک گشتاور دوقطبی الکتریکی  $D$  کسب می‌کند. انرژی برهم‌کنش حاصله، با افزایش  $R$  به صورت  $1/R^2$  کاهش می‌یابد.

$E$ ، ظاهر شود. تابع موج الکترونی تغییر شکل می‌یابد، و مرکز بار توزیع بار الکترونی به  $P_1$  نزدیکتر می‌شود (شکل ۶).  $E$  و  $D$  هر دو متناسب با  $1/R^2$  و هم علامت‌اند. بنابراین، برهم‌کنش الکتروستاتیکی بین پروتون  $P_1$  و اتم واقع در  $P_2$  باید انرژی را به مقداری که، نظیر  $-E \cdot D$ ، به صورت  $1/R^2$  تغییر می‌کند، پایین بیاورد.<sup>۱</sup> در نتیجه، رفتار مجانبی  $\Delta E_+$  و  $\Delta E_-$  نباید به صورت نمایی، بلکه به صورت  $-a/R^2$  (که  $a$  یک ثابت مثبت است) تغییر کند.

در واقع می‌توانیم این نتیجه را با روش وردشی به دست بیاوریم. به جای برهم‌نیش خطی اوربیتال‌های  $1s$  متمرکز در  $P_1$  و  $P_2$ ، اوربیتال‌های هیبرید  $\chi_1$  و  $\chi_2$  را که دیگر در اطراف  $P_1$  و  $P_2$  دارای تقارن کروی نیستند ترکیب می‌کنیم.  $\chi_2$ ، از، مثلاً برهم‌نیش خطی یک اوربیتال  $1s$  و یک اوربیتال  $2p$ ، که هر دو در  $P_2$  متمرکزند، به دست می‌آید<sup>۲</sup>

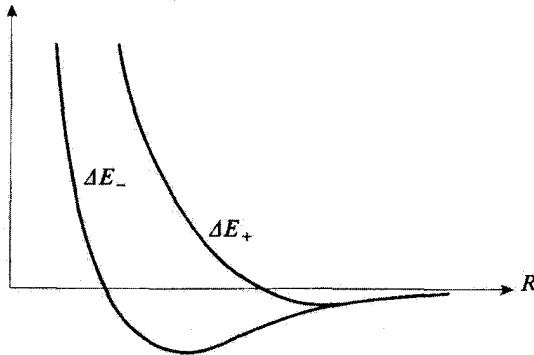
$$\chi_2(\mathbf{r}) = \varphi_{1s}^2(\mathbf{r}) + \sigma \varphi_{2p}^2(\mathbf{r}) \quad (57)$$

که دارای شکلی شبیه شکل ۶ است. حال، درمیانان (۲۱) را در نظر بگیرید. وقتی  $R \rightarrow \infty$ ، عناصر غیرقطری  $H_{12} = \langle \chi_1 | H | \chi_2 \rangle$  و  $S_{12} = \langle \chi_1 | \chi_2 \rangle$  باز هم به‌طور نمایی به سمت صفر میل می‌کنند. این مطلب به‌خاطر این است که حاصلضرب  $\chi_1(\mathbf{r})\chi_2(\mathbf{r})$  در انتگرال‌های مربوط ظاهر می‌شود؛ اوربیتال‌های  $\chi_1(\mathbf{r})$  و  $\chi_2(\mathbf{r})$ ، اگرچه تغییر شکل یافته‌اند، هنوز هم به‌ترتیب در نزدیکی  $P_1$  و  $P_2$  جایگزیده باقی می‌مانند، و وقتی  $R \rightarrow \infty$  روی هم افتادگی آنها به‌طور نمایی به سمت صفر میل می‌کند. بنابراین وقتی  $R \rightarrow \infty$ ، دو ویژه مقدار  $E_+$  و  $E_-$  هر دو به سمت  $H_{11} = H_{22}$  میل می‌کنند، زیرا در این صورت درمیانان (۲۱) قطری می‌شود.

حال ببینیم  $H_{22}$  معرف چیست؟ همان‌طور که دیده‌ایم (بخش ۲-ج)، انرژی اتم هیدروژنی است که در  $P_2$  قرار دارد و توسط پروتون  $P_1$  مختل می‌شود. در محاسبه بخش ۲ از هر قطبش اوربیتال الکترونی  $1s$  بر اثر میدان الکتریکی حاصل از  $P_1$ ، صرف‌نظر کردیم، و به‌این دلیل است که تصحیح انرژی‌ای که

۱. به‌طور دقیقتر، انرژی به‌اندازه  $1/2E \cdot D$  - پایین می‌آید.

۲. محور تقارن اوربیتال  $2p$  در امتداد خط واصل بین دو پروتون انتخاب شده است.



شکل ۷ وقتی  $\rho \rightarrow \infty$ ، انرژیهای حالتی پیوندی و پادپیوندی به طور نمایی به سمت یکدیگر میل می کنند. البته با سرعت کمتری (مانند  $1/R^2$ ) به سمت مقدار حدی خود نزدیک می شوند.

به دست آوردیم به صورت نمایی با  $R$  کاهش پیدا می کند. با این همه، اگر، همان طور که در اینجا انجام می دهیم، قطبش اوربیتال الکترونی را منظور کنیم، تصحیحی به صورت  $-a/R^2$  به دست می آوریم. این واقعیت که، در (۵۷)، فقط آمیزش با اوربیتال  $2p$  را در نظر می گیریم موجب می شود که مقدار  $a$  که از محاسبه وردشی به دست می آید، تقریبی باشد (حال آنکه محاسبه اختلال قطبش، تمام حالتیهای برانگیخته را در برمی گیرد، مکمل ۵ از فصل ۱۲ را ملاحظه کنید).

بنابراین، دو منحنی  $\Delta E_+$  و  $\Delta E_-$  به طور نمایی به سمت یکدیگر میل می کنند، زیرا اختلاف بین  $E_+$  و  $E_-$  تنها شامل عناصر غیر قطری  $H_{12}$  و  $S_{12}$  است، و مقدار مشترک آنها به ازاء  $R$  های بزرگ به صورت  $-a/R^2$  به سمت صفر میل می کند (شکل ۷).

بحث پیش، همچنین استفاده از اوربیتالهای قطبی شده مانند (۵۷)، را نه تنها برای  $R$  های بزرگ، بلکه برای سایر مقادیر  $R$  نیز پیشنهاد می کند. بنابراین، دسته کنه های آزمایشی را توسعه می دهیم و در نتیجه دقت را بالا می بریم. سپس، در رابطه (۵۷)،  $\sigma$  را، مانند پارامتر  $Z$  که معرف شعاع بور  $a_0/Z$  و وابسته به اوربیتالهای  $1s$  و  $2p$  است، به صورت یک پارامتر وردشی در نظر می گیریم. برای اینکه حتی این روش را قابل انعطاف تر کنیم، پارامترهای متفاوت  $Z'$  و  $Z$  را برای  $\varphi_{2p}$  و  $\varphi_{1s}$  انتخاب می کنیم. سپس، برای هر مقدار  $R$ ، مقدار متوسط  $H$  در حالت  $(\chi_1) + (\chi_2)$  (که به دلایل تقارن، هنوز حالت پایه است) را مینیموم می کنیم و به این ترتیب، مقادیر بهین  $\sigma$ ،  $Z'$  و  $Z$  را به دست می آوریم. در این صورت، توافق با جواب دقیق، بسیار عالی است (جدول ۱ را ملاحظه کنید).

#### ۴. سایر اوربیتالهای مولکولی یون $H_2^+$

در بخشهای گذشته، با استفاده از روش وردشی، از حالت پایه  $1s$  هریک از دو اتم هیدروژنی که می توانند در اطراف دو پروتون تشکیل شوند، یک اوربیتال مولکولی پیوندی و یک اوربیتال

مولکولی پادیوندی ساختیم. البته، حالت ۱s را از این رو انتخاب کردیم که واضح بود این حالت بهترین انتخاب برای یافتن حالت پایه تقریبی سیستم متشکل از دو پروتون و یک الکترون است. مسلماً می‌توانیم با روش ترکیب خطی اوربیتالهای اتمی (بخش ۲-الف)، با استفاده از حالت‌های برانگیخته اتم هیدروژن، سایر اوربیتالهای مولکولی با انرژیهای بالاتر را به دست بیاوریم. فایده اصلی این اوربیتالهای برانگیخته در اینجا این خواهد بود که از پدیده‌هایی که می‌توانند در مولکولها پیچیده‌تر از یون  $H_2^+$  وارد شوند، یک دید کلی به ما می‌دهند. به عنوان مثال، برای درک خواص یک مولکول دواتمی چندالکترونی می‌توانیم، در تقریب اول، الکترونها را به صورت تک-تک، مانند اینکه با یکدیگر برهم‌کنش ندارند، بررسی کنیم. بنابراین، حالت‌های مانای ممکن یک تک-الکترون واقع در میدان کولنی هسته‌ها را تعیین می‌کنیم، و سپس با در نظر گرفتن اصل پاؤلی (فصل ۱۴، بخش ۱۴-۱) و پر کردن حالت‌های پایتترین انرژی در مرحله اول، الکترونهای مولکول را در این حالتها قرار می‌دهیم (این رویه مشابه روشی است که برای اتمهای چندالکترونی در مکمل ۱ از فصل ۱۴ تشریح کردیم). در این بخش، به خواص عمده اوربیتالهای مولکولی برانگیخته یون  $H_2^+$  اشاره می‌کنیم، و در عین حال امکانات تعمیم به مولکولهای پیچیده‌تر را هم مد نظر قرار می‌دهیم.

### الف) تقارن‌ها و اعداد کوانتومی. نمادگذاری اسپکتروسکوپیکی

۱. پتانسیل  $V$  ناشی از دو پروتون، نسبت به گردش حول محور  $P_1P_2$ ، که آن را به عنوان محور  $Oz$  انتخاب می‌کنیم، متقارن است. این، یعنی که  $V$  و در نتیجه، هامیلتونی  $H$  الکترون به متغیر زاویه‌ای  $\varphi$  که جهت صفحه  $MP_1P_2$ ، شامل محور  $Oz$  و نقطه  $M$ ، را نسبت به محور  $Oz$  تعیین می‌کند، بستگی ندارند. نتیجه اینکه،  $H$  با مؤلفه  $L_z$  تکانه زاویه‌ای مدار الکترون جابه‌جا می‌شود. [در نمایش  $\{L_z, \{P\}\}$  تبدیل به عملگر دیفرانسیلی  $\hbar/i \partial/\partial\varphi$  می‌شود که با هر عملگر مستقل از  $\varphi$ ، جابه‌جا می‌شود]. در این صورت، می‌توانیم سیستمی از ویژه‌حالت‌های  $H$  که ویژه‌حالت‌های  $L_z$  هم هستند، پیدا کنیم، و آنها را براساس ویژه‌مقدارهای  $m\hbar$  عملگر  $L_z$  رده‌بندی کنیم.

۲. پتانسیل  $V$ ، همچنین تحت بازتاب نسبت به هر صفحه شامل  $P_1P_2$ ، یعنی، محور  $Oz$ ، ناورداست. تحت چنین بازتابی، یک ویژه‌حالت  $L_z$  با ویژه‌مقدار  $m\hbar$  به یک ویژه‌حالت  $L_z$  با ویژه‌مقدار  $-m\hbar$  تبدیل می‌شود (بازتاب، جهت گردش الکترون حول محور  $Oz$  را تغییر می‌دهد). به علت ناوردایی  $V$ ، انرژی یک حالت پایدار، فقط به  $|m|$  بستگی دارد.

در نمادگذاری اسپکتروسکوپیکی، به هر اوربیتال مولکولی، یک حرف یونانی که معرف مقدار

$|m|$  است، به صورت زیر نسبت می‌دهیم

$$|m| = 0 \leftrightarrow \sigma$$

$$|m| = 1 \leftrightarrow \pi$$

$$|m| = 2 \leftrightarrow \delta$$

(۵۸)

(به شباهت با نمادگذاری اسپکتروسکوپیکی اتمی توجه کنید:  $\sigma$ ,  $\pi$ ,  $\delta$  یادآور  $s$ ,  $p$ , و  $d$  اند). به عنوان مثال، چون حالت پایه  $1s$  اتم هیدروژن دارای تکانه زاویه‌ای مداری صفر است، دو اوربیتالی که در بخشهای گذشته مورد مطالعه قرار دادیم، اوربیتالهای  $\sigma$  هستند (می‌توان نشان داد که این مطلب نه فقط برای حالت‌های تقریبی به دست آمده با روش وردشی، بلکه برای تابع‌موجهای مانای دقیق نیز درست است).

این نمادگذاری، واقعیتی را که دو پروتون یون  $H_2^+$  دارای بارهای مساوی هستند، به کار نمی‌گیرد. بنابراین، طبقه‌بندی اوربیتالهای مولکولی به  $\sigma$ ,  $\pi$ , و  $\delta$  در مورد مولکول دواتمی ناقصی معتبر باقی می‌ماند.

۳. در یون  $H_2^+$  (و به طور کلی‌تر، در مولکولهای دواتمی هم‌قطبی)، پتانسیل  $V$  تحت بازتاب نسبت به نقطه  $O$ ، وسط  $P_1P_2$ ، ناورداست. بنابراین می‌توانیم ویژه‌توابع هامیلتونی  $H$  را طوری انتخاب کنیم که نسبت به نقطه  $O$  پاریته معینی داشته باشند. برای یک اوربیتال زوج، به حرف یونانی مشخص‌کننده  $|m|$ ، یک شاخص  $g$  (که از کلمه آلمانی "gerade" گرفته شده است) اضافه می‌کنیم؛ این شاخص، برای اوربیتالهای فرد  $u$ ، ("ungerade") است. بنابراین، اوربیتال پیوندی‌ای که در بالا از حالت‌های اتمی  $1s$  به دست آمد، یک اوربیتال  $\sigma_g$  است، در حالی‌که، اوربیتال پادپیوندی مربوط  $\sigma_u$  است.

۴. بالاخره، می‌توانیم از ناوردایی  $H$  تحت بازتاب نسبت به صفحه عمودمنصف  $P_1P_2$  استفاده کنیم، تابع‌موجهای مانایی را که در این عمل دارای پاریته معینی هستند، یعنی، پاریته‌ای که نسبت به تغییر علامت تنها متغیر  $z$  تعریف می‌شود، انتخاب کنیم. تابعی که تحت این بازتاب فرد هستند، یا یک ستاره مشخص می‌شوند. این توابع، مانند اوربیتال نشان داده شده در شکل ۴، ب، بالاجبار در تمام نقاط صفحه عمودمنصف  $P_1P_2$  صفرند؛ اینها اوربیتالهای پادپیوندی‌اند.

یادداشت:

بازتاب نسبت به صفحه عمودمنصف  $P_1P_2$  می‌تواند با انجام یک بازتاب نسبت به نقطه  $O$  و سپس یک دوران به اندازه  $\pi$  حول  $Oz$  به دست بیاید. از این رو، پاریته (۴) از تقارنهای قبلی مستقل نیست. (حالت‌های "g" برای  $|m|$ های فرد دارای یک ستاره‌اند و برای  $|m|$ های زوج فاقد ستاره‌اند؛ برای حالت‌های "u" وضعیت معکوس می‌شود). با این همه بهتر است که این



پارینه را در نظر بگیریم، زیرا می‌توانیم از روی آن بلافاصله اوربیتالهای پادپیوندی را تعیین کنیم.

ب) اوربیتالهای مولکولی متشکل از اوربیتالهای اتمی  $2p$

اگر با حالت برانگیخته  $2s$  اتم هیدروژن شروع کنیم، استدلالهایی مشابه استدلالهای بخشهای گذشته، یک اوربیتال پیوندی  $\sigma_g(2s)$  و یک اوربیتال پادپیوندی  $\sigma_u^*(2s)$ ، با اشکالی نظیر شکل ۴، خواهند داد. بنابراین به جای این حالت برانگیخته، توجه خود را به اوربیتالهای مولکولی‌ای که از حالت اتمی برانگیخته  $2p$  به دست می‌آیند، معطوف خواهیم کرد.

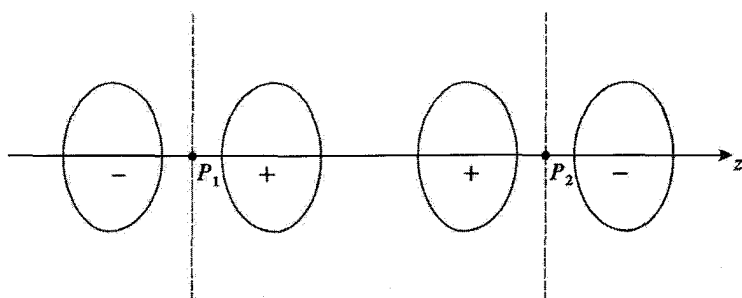
۱. اوربیتالهای متشکل از حالت‌های  $2p_z$

حالت‌های اتمی  $2p_z$  متمرکز در  $P_1$  و  $P_2$  را به ترتیب با  $|\varphi_{2p_z}^1\rangle$  و  $|\varphi_{2p_z}^2\rangle$  نشان خواهیم داد (مکمل بخش ۲- از مکمل ۵ از فصل ۷). شکل اوربیتالهای مربوط در شکل ۸ نشان داده شده است (به انتخاب علامتهای مشخص شده در شکل توجه کنید).

با یک محاسبه وردشی مشابه محاسبه بخش ۲، می‌توانیم، از روی این دو حالت اتمی، دو ویژه‌حالت تقریبی هامیلتونی (۱۳) را بسازیم، تقارنهای مورد اشاره در بخش ۴-الف، دلالت بر این دارند که این حالت‌های مولکولی را، با تقریب یک ضریب بهنجارش، می‌توانیم به صورت زیر بنویسیم

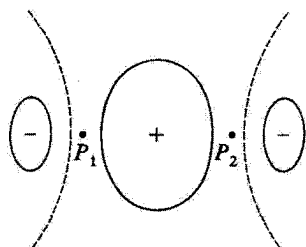
$$|\varphi_{2p_z}^1\rangle + |\varphi_{2p_z}^2\rangle \quad (الف ۵۹)$$

$$|\varphi_{2p_z}^1\rangle - |\varphi_{2p_z}^2\rangle \quad (ب ۵۹)$$



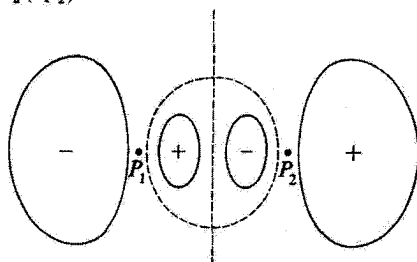
شکل ۸ نمایش طرح‌وار اوربیتالهای اتمی  $2p_z$  متمرکز در  $P_1$  و  $P_2$  (محور  $Oz$  در امتداد  $P_1P_2$  انتخاب شده است) که به عنوان یک پایه برای ساختن اوربیتالهای مولکولی برانگیخته  $\sigma_g(2p_z)$  و  $\sigma_u^*(2p_z)$  نشان داده شده در شکل ۹، (به علامت قراردادی انتخاب شده توجه کنید) به کار می‌روند.

$\sigma_g(2p_z)$



(الف)

$\sigma_u^*(2p_z)$



(ب)

شکل ۹ نمایش طرح وار اوربیتالهای مولکولی برانگیخته: اوربیتال پیوندی  $\sigma_g(2p_z)$  (شکل الف) و اوربیتال پادپیوندی  $\sigma_u^*(2p_z)$  (شکل ب). مانند شکل ۸، سطح مقطع یک سطح با مدول ثابت  $|\psi|$  را با صفحه‌های که شامل  $P_1 P_2$  است رسم کرده‌ایم. این یک سطح دورانی حول  $P_1 P_2$  است. علامت نشان داده شده، متعلق به علامت تابع موج (حقیقی) است. منحنیهای خط‌چین، سطح مقطعیهای سطح گرهی ( $|\psi| = 0$ ) با صفحه کتاب‌اند.

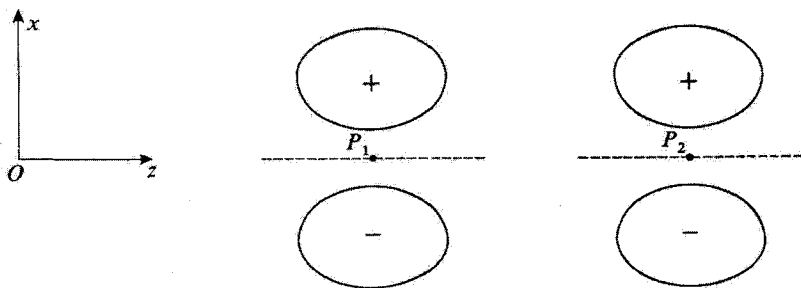
شکل دو اوربیتال مولکولی را که به این ترتیب به دست می‌آیند به آسانی می‌توان از شکل ۸ استنتاج کرد؛ شکل ۹.

دو حالت اتمی  $2p_z$ ، ویژه‌حالت‌های  $L_z$  با ویژه‌مقدار صفرند؛ بنابراین، همین مطلب برای دو حالت (۵۹) نیز صادق است. اوربیتال مولکولی وابسته به (۵۹الف) زوج است و به صورت  $\sigma_g(2p_z)$  نوشته می‌شود؛ اوربیتال مولکولی مربوط به (۵۹ب) تحت بازتاب نسبت به  $O$  و همچنین نسبت به صفحه عمود منصف  $P_1 P_2$  فرد است و از این رو آن را با  $\sigma_u^*(2p_z)$  نشان خواهیم داد.

۲. اوربیتالهای متشکل از حالت‌های  $2p_y$  یا  $2p_x$

اینک از حالت‌های اتمی  $|\varphi_{2p_x}\rangle$  و  $|\varphi_{2p_y}\rangle$  که دارای تابع موج‌های حقیقی نشان داده شده در شکل ۱۰ هستند، شروع می‌کنیم. (توجه کنید که سطوح با  $|\psi|$ ‌های مساری که سطح مقطعیهای آنها در صفحه  $xOz$  در شکل ۱۰ نشان داده شده، سطوح دورانی حول  $Oz$  نیستند، بلکه حول محورهای موازی  $Ox$  مارپَر  $P_1$  و  $P_2$  اند). یادآور می‌شویم که اوربیتال اتمی  $2p_x$  از ترکیب خطی ویژه‌حالت‌های  $L_z$  مربوط به  $m = 1$  و  $m = -1$  به دست می‌آید. بنابراین، اوربیتالهای مولکولی متشکل از این اوربیتالهای اتمی، دارای  $|m| = 1$  هستند؛ این اوربیتالها، اوربیتالهای  $\pi$  هستند.

در اینجا نیز، حالت‌های مولکولی تقریبی حاصل از حالت‌های اتمی  $2p_x$ ، ترکیب‌های خطی متقارن



شکل ۱۰ نمایش طرح وار اوربیتالهای اتمی  $2p_z$  متمرکز در  $P_1$  و  $P_2$  (محور  $Oz$  در امتداد  $P_1P_2$  انتخاب شده است) که به عنوان پایه‌ای برای ساختن اوربیتالهای مولکولی برانگیخته  $\pi_u(2p_x)$  و  $\pi_g^*(2p_x)$  نشان داده شده در شکل ۱۱، به کار می‌روند. برای هر اوربیتال، سطح با  $|\psi|$  مساوی، که سطح مقطع آن صفحه  $xOz$  نشان داده شده است، دیگر سطح دورانی حول  $Oz$  نیست بلکه حول خط راست موازی  $Ox$  مارپا  $P_1$  یا  $P_2$  است.

و پادمتقارن اند

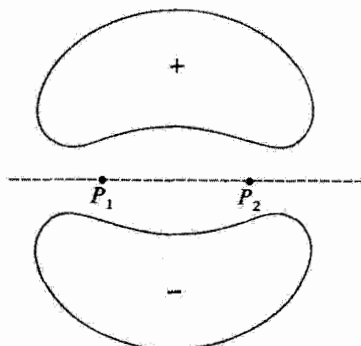
$$|\varphi_{2p_x}^1\rangle + |\varphi_{2p_x}^2\rangle \quad (۶۰\text{الف})$$

$$|\varphi_{2p_x}^1\rangle - |\varphi_{2p_x}^2\rangle \quad (۶۰\text{ب})$$

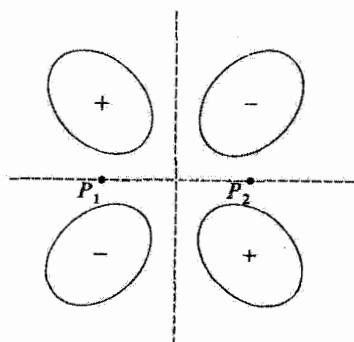
شکل این اوربیتالهای مولکولی را می‌توان به آسانی به‌طور کیفی از شکل ۱۰ استنتاج کرد. سطوح با  $|\psi|$ ‌های مساوی سطوح دورانی حول  $Oz$  نیستند، بلکه فقط نسبت به صفحه  $xOz$  متقارن‌اند. سطح مقطعی آنها در این صفحه در شکل ۱۱ نشان داده شده است. در این شکل ملاحظه می‌کنیم که اوربیتال وابسته به حالت  $(۶۰\text{الف})$  نسبت به نقطه  $O$ ، وسط  $P_1P_2$ ، فرد است اما نسبت به صفحه عمودمنصف  $P_1P_2$  زوج است؛ از این رو، آن را با  $\pi_u(2p_x)$  نشان می‌دهیم. از طرف دیگر، اوربیتال مربوط به  $(۶۰\text{ب})$  نسبت به نقطه  $O$  زوج و نسبت به صفحه عمودمنصف  $P_1P_2$  فرد است؛ این، یک اوربیتال پادپیوندی است و به  $\pi_g^*(2p_x)$  نمایش داده می‌شود. بر این واقعیت تأکید می‌کنیم که این اوربیتالهای  $\pi$  برخلاف اوربیتالهای  $\sigma$  دارای محورهای دوران نیستند، بلکه دارای صفحات تقارن‌اند.

البته، اوربیتالهای مولکولی ایجادشده توسط حالت‌های اتمی  $2p_y$  می‌توانند با یک دوران  $\pi/2$  حول  $P_1P_2$  از اوربیتالهای قبلی نتیجه شوند.

اوربیتالهای  $\pi$  شبیه اوربیتالهای قبل در پیوندهای دوگانه یا سه‌گانه انتهایی نظیر کربن وارد می‌شوند (مکمل ۵ از فصل ۷، بخشهای ۳-ج و ۴-ج).

$\pi_u(2p_x)$ 

(الف)

 $\pi_g^*(2p_x)$ 

(ب)

شکل ۱۱ نمایش طرح وار اوربیتالهای مولکولی برانگیخته: اوربیتال پیوندی  $\pi_u(2p_x)$  (شکل الف) و اوربیتال پادپیوندی  $\pi_g^*(2p_x)$  (شکل ب). برای هر یک از این دو اوربیتال، سطح مقطع سطحی را که  $|\psi|$  بر روی آن یک مقدار ثابت است، با صفحه  $xOz$  نشان داده‌ایم. این سطح، دیگر یک سطح دورانی نیست بلکه نسبت به صفحه  $xOz$  متقارن است. علامتها و خط‌چینها، همان معنای شکل‌های ۴، ۸، ۹، ۱۰ را دارند.

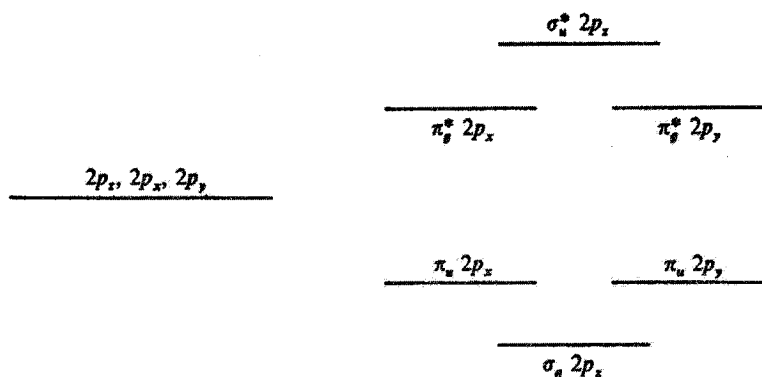
یادداشت:

قبلاً دیدیم (بخش ۲-د) که جدایی انرژی ترازهای پیوندی و پادپیوندی، از روی هم‌افتادگی تابع موجهای اتمی ناشی می‌شود. حال، برای یک فاصله  $R$  یکسان، روی هم‌افتادگی اوربیتالهای  $\varphi_{1p_x}$  و  $\varphi_{2p_x}$  که متوجه به سمت یکدیگرند، از روی هم‌افتادگی  $\varphi_{1p_x}$  و  $\varphi_{2p_x}$  که محورهاى آنها موازی یکدیگرند بیشتر است (شکل ۸ و ۱۰). ملاحظه می‌کنیم که اختلاف انرژی بین  $\sigma_g(2p_x)$  و  $\sigma_u^*(2p_x)$  از اختلاف انرژی بین  $\pi_u(2p_x)$  و  $\pi_g^*(2p_x)$  یا  $\pi_g^*(2p_y)$  و  $\pi_u(2p_y)$  بیشتر است. ترتیب ترازهای مربوط در شکل ۱۲ نشان داده شده است. ■

## ۵. منشأ پیوند شیمیایی: قضیهٔ ویریال

(الف) بیان مسئله

وقتی فاصله  $R$  بین دو پروتون کاهش می‌یابد، دافعهٔ الکتروستاتیکی  $e^2/R$  آنها افزایش می‌یابد. از این رو، این حقیقت که انرژی کل  $E_-(R)$  حالت پیوندی کاهش می‌یابد (وقتی  $R$  از یک مقدار بسیار بزرگ کاهش می‌یابد) و سپس از یک مینیموم می‌گذرد به این معنی است که در ابتدا کاهش انرژی الکترونی از افزایش  $e^2/R$  سریعتر است (البته، چون این عبارت هنگام  $R \rightarrow 0$  وا می‌گراید، نیروی دافعه بین دو پروتون است که در فواصل کوتاه حائز اهمیت است. پس می‌توان سؤال زیر را



شکل ۱۲ انرژیهای اوربیتالهای مولکولی مختلف برانگیخته، ساخته شده از اوربیتالهای اتمی  $2p_x$ ،  $2p_y$  و  $2p_z$  متمرکز در  $P_1$  و  $P_2$  (محور  $Oz$  در امتداد  $P_1P_2$  انتخاب شده است). به دلیل تقارن، اوربیتالهای مولکولی تولیدشده توسط اوربیتالهای اتمی  $2p_x$  با اوربیتالهای مولکولی تولیدشده توسط اوربیتالهای اتمی  $2p_y$ ، واگن اند. با این همه، اختلاف بین اوربیتالهای مولکولی پیوندی و پادپیوندی  $\pi_u(2p_x, y)$  و  $\pi_g^*(2p_x, y)$  از اختلاف مربوطه بین اوربیتالهای مولکولی  $\sigma_g(2p_z)$  و  $\sigma_u^*(2p_z)$  کوچکتر است. این، از روی هم افتادگی بیشتر دو اوربیتال اتمی  $2p_z$  ناشی می شود.

مطرح کرد: آیا پایین آمدن انرژی الکترونی که پیوند شیمیایی را ممکن می سازد از پایین آمدن انرژی پتانسیل الکترونی ناشی می شود یا از پایین آمدن انرژی جنبشی و یا هر دو؟

قبلاً در (۵۲) و (۵۳)، عباراتی تقریبی برای انرژیهای جنبشی و پتانسیل (کل) محاسبه کرده ایم. پس می توانیم مطالعه تغییرات این دو عبارت را نسبت به  $R$  در نظر بگیریم. البته، چنین روشی را باید با احتیاط به کار برد، زیرا، همان طور که قبلاً اشاره کردیم، دقت ویژه توابع به دست آمده با یک محاسبه وردشی، به مراتب از دقت انرژیها کمتر است. این نکته را در بخش ۵-۲ به تفصیل مورد بحث قرار خواهیم داد.

درواقع می توان، با توجه به "قضیه ویریا"، که روابط دقیق بین  $E(R)$  و میانگین انرژیهای جنبشی و پتانسیل را به دست می دهد، به این سؤال دقیقاً پاسخ داد. از این رو، در این بخش، این قضیه را اثبات می کنیم و نتایج فیزیکی آن را مورد بحث قرار می دهیم. به علاوه، نتایج به دست آمده، کاملاً عمومی اند و می توانیم آنها را نه تنها بر یون مولکولی  $H_2^+$ ، بلکه بر تمام مولکولهای دیگر نیز اعمال کنیم. قبل از پرداختن به خود قضیه ویریا، ابتدا بعضی از نتایج را که بعداً احتیاج خواهیم داشت، مشخص می کنیم.

(ب) چند قضیه مفید

۱. قضیه اویلر

یادآور می شویم که تابع  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  از چند متغیر  $x_1, x_2, \dots, x_n$  همگن از درجه  $s$  نامیده می شود در صورتی که با ضرب تمام متغیرها در  $\lambda$  این تابع در  $\lambda^s$  ضرب شود

$$f(\lambda x_1, \lambda x_2, \dots, \lambda x_n) = \lambda^s f(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (61)$$

به عنوان مثال، پتانسیل یک نوسانگر ساده سه بعدی

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2 + z^2) \quad (62)$$

همگن از درجه ۲ است. همین طور، انرژی برهم کنش الکتروستاتیکی دو ذره

$$\frac{e_a e_b}{r_{ab}} = \frac{e_a e_b}{\sqrt{(x_a - x_b)^2 + (y_a - y_b)^2 + (z_a - z_b)^2}} \quad (63)$$

همگن از درجه -۱ است.

قضیه اویلر حاکی از این است که هر تابع  $f$  همگن از درجه  $s$  در تساوی زیر صدق می کند

$$\sum_{i=1}^n x_i \frac{\partial f}{\partial x_i} = s f(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (64)$$

برای اثبات این قضیه از دو طرف (۶۱) نسبت به  $\lambda$  مشتق می گیریم. طرف چپ می دهد

$$\sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i} (\lambda x_1, \dots, \lambda x_n) \times \frac{\partial}{\partial \lambda} (\lambda x_i) = \sum_i x_i \frac{\partial f}{\partial x_i} (\lambda x_1, \dots, \lambda x_n) \quad (65)$$

و طرف راست می دهد

$$S \lambda^{s-1} f(x_1, \dots, x_n) \quad (66)$$

اگر (۶۵) را مساوی (۶۶) قرار بدهیم و  $\lambda$  را برابر با ۱ بگیریم، رابطه (۶۴) به دست می آید.

قضیه اویلر به آسانی می تواند در مثالهای (۶۲) و (۶۳) تأیید شود.

۲. قضیه هلمن-فاینمن

فرض کنید  $H(\lambda)$  یک عملگر هرمیتی وابسته به یک پارامتر حقیقی  $\lambda$ ، و  $\langle \psi(\lambda) |$  یک ویژه‌بردار بهنجار  $H(\lambda)$  با ویژه‌مقدار  $E(\lambda)$  باشد

$$H(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle \quad (۶۷)$$

$$\langle \psi(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle = 1 \quad (۶۸)$$

قضیه هلمن-فاینمن می‌گوید که

$$\frac{d}{d\lambda}E(\lambda) = \langle \psi(\lambda) | \frac{d}{d\lambda}H(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle \quad (۶۹)$$

این رابطه را می‌توان به صورت زیر اثبات کرد. بنابر (۶۷) و (۶۸)، داریم

$$E(\lambda) = \langle \psi(\lambda) | H(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle \quad (۷۰)$$

اگر از این رابطه نسبت به  $\lambda$  مشتق بگیریم، به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\lambda}E(\lambda) &= \langle \psi(\lambda) | \frac{d}{d\lambda}H(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle \\ &+ \left[ \frac{d}{d\lambda} \langle \psi(\lambda) | \right] H(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle + \langle \psi(\lambda) | H(\lambda) | \left[ \frac{d}{d\lambda} | \psi(\lambda) \rangle \right] \end{aligned} \quad (۷۱)$$

یعنی، با استفاده از (۶۸) و رابطه‌ی الحاقی آن [چون  $H(\lambda)$  هرمیتی است،  $E(\lambda)$  حقیقی است]

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\lambda}E(\lambda) &= \langle \psi(\lambda) | \frac{d}{d\lambda}H(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle \\ &+ E(\lambda) \left\{ \left[ \frac{d}{d\lambda} \langle \psi(\lambda) | \right] | \psi(\lambda) \rangle + \langle \psi(\lambda) | \left[ \frac{d}{d\lambda} | \psi(\lambda) \rangle \right] \right\} \end{aligned} \quad (۷۲)$$

در طرف راست، عبارت داخل آکولاد مشتق  $\langle \psi(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle$  است، که صفر است زیرا  $\langle \psi(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle$  بهنجار است؛ بنابراین (۶۹) به دست می‌آید.

۳. مقدار متوسط جابه‌جاگر  $[H, A]$  در یک ویژه‌حالت  $H$  فرض کنید  $\langle \psi | \psi \rangle$  یک ویژه‌بردار بهنجار عملگر هرمیتی  $H$ ، با ویژه‌مقدار  $E$  باشد. برای هر عملگر  $A$

$$\langle \psi | [H, A] | \psi \rangle = 0 \quad (۷۳)$$

زیرا، چون  $\langle \psi | H = E \langle \psi |$  و  $H | \psi \rangle = E | \psi \rangle$

$$\langle \psi | (HA - AH) | \psi \rangle = E \langle \psi | A | \psi \rangle - E \langle \psi | A | \psi \rangle = 0 \quad (۷۴)$$

ج) کاربرد قضیهٔ ویریا در مورد مولکولها:

۱. انرژی پتانسیل سیستم

یک مولکول دلخواه متشکل از  $N$  هسته و  $Q$  الکترون را در نظر بگیرید. مکانهای کلاسیک هسته‌ها را با  $\mathbf{r}_k^n$  ( $k = 1, 2, \dots, N$ ) و مکانها و تکانه‌های کلاسیک الکترونها را به ترتیب با  $\mathbf{r}_i^e$  و  $\mathbf{p}_i^e$  ( $i = 1, 2, \dots, Q$ ) نمایش می‌دهیم. مؤلفه‌های این بردارها را به صورت  $x_k^n, y_k^n, z_k^n$  و غیره می‌نویسیم.

در اینجا از تقریب بورن-اپنهايم استفاده می‌کنیم،  $\mathbf{r}_k^n$ ها را به عنوان پارامترهای کلاسیک معلوم در نظر خواهیم گرفت. در محاسبهٔ کوانتومی، فقط  $\mathbf{r}_i^e$  و  $\mathbf{p}_i^e$  به عملگرهای  $\mathbf{R}_i^e$  و  $\mathbf{P}_i^e$  تبدیل می‌شوند. بنابراین، باید معادلهٔ ویژه‌مقدار هامیلتونی  $H$ ، یعنی،

$$H(\mathbf{r}_1^n, \dots, \mathbf{r}_N^n) | \psi(\mathbf{r}_1^n, \dots, \mathbf{r}_N^n) \rangle = E(\mathbf{r}_1^n, \dots, \mathbf{r}_N^n) | \psi(\mathbf{r}_1^n, \dots, \mathbf{r}_N^n) \rangle \quad (۷۵)$$

را که بستگی به پارامترهای  $\mathbf{r}_1^n, \dots, \mathbf{r}_N^n$  دارد و در فضای حالت الکترونها عمل می‌کند، حل کنیم. عبارت  $H$  را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$H = T_e + V(\mathbf{r}_1^n, \dots, \mathbf{r}_N^n) \quad (۷۶)$$

که در آن  $T_e$  عملگر انرژی جنبشی الکترونهاست

$$T_e = \sum_{i=1}^Q \frac{1}{2m} (\mathbf{P}_i^e)^2 \quad (۷۷)$$

و  $V(\mathbf{r}_1^n, \dots, \mathbf{r}_N^n)$  عملگری است که از قرار دادن عملگرهای  $\mathbf{R}_i^e$  به جای  $\mathbf{r}_i^e$  در عبارت انرژی پتانسیل کلاسیک به دست می‌آید. این انرژی پتانسیل عبارت است از مجموع انرژی دافعهٔ  $V_{ee}$



بین الکترونها، انرژی جاذبه  $V_{en}$  بین الکترونها و هسته‌ها، و انرژی دافعه  $V_{nn}$  بین هسته‌ها به طوری که

$$V(\mathbf{r}_1^n, \dots, \mathbf{r}_N^n) = V_{ee} + V_{en}(\mathbf{r}_1^n, \dots, \mathbf{r}_N^n) + V_{nn}(\mathbf{r}_1^n, \dots, \mathbf{r}_N^n) \quad (۷۸)$$

در حقیقت، چون  $V_{nn}$  فقط بستگی به  $\mathbf{r}_1^n$  دارد و شامل  $\mathbf{R}_i^e$  نیست،  $V_{nn}$  یک عملگر عمل‌کننده در فضای حالت الکترونها نیست بلکه یک عدد است. از این رو، تنها اثر  $V_{nn}$  این است که تمام انرژیها را به طور مساوی انتقال دهد، زیرا معادله (۷۵) هم‌ارز معادله زیر است

$$H_e(\mathbf{r}_1^n, \dots, \mathbf{r}_N^n) |\psi(\mathbf{r}_1^n, \dots, \mathbf{r}_N^n)\rangle = E_e(\mathbf{r}_1^n, \dots, \mathbf{r}_N^n) |\psi(\mathbf{r}_1^n, \dots, \mathbf{r}_N^n)\rangle \quad (۷۹)$$

که در آن

$$H_e(\mathbf{r}_1^n, \dots, \mathbf{r}_N^n) = T_e + V_{ee} + V_{en}(\mathbf{r}_1^n, \dots, \mathbf{r}_N^n) = H - V_{nn}(\mathbf{r}_1^n, \dots, \mathbf{r}_N^n) \quad (۸۰)$$

و انرژی الکترونی  $E_e$  طبق رابطه زیر به انرژی کل  $E$  مربوط است

$$E_e(\mathbf{r}_1^n, \dots, \mathbf{r}_N^n) = E(\mathbf{r}_1^n, \dots, \mathbf{r}_N^n) - V_{nn}(\mathbf{r}_1^n, \dots, \mathbf{r}_N^n) \quad (۸۱)$$

می‌توانیم قضیهٔ اویلر را بر انرژی پتانسیل کلاسیک اعمال کنیم، زیرا این یک تابع همگن درجهٔ ۱- از مجموعه مختصات الکترونی و هسته‌ای است. چون همهٔ عملگرهای  $\mathbf{R}_i^e$  با هم جابه‌جا می‌شوند، می‌توانیم رابطهٔ میان عملگرهای کوانتومی را پیدا کنیم

$$\sum_{k=1}^N \mathbf{r}_k^n \cdot \nabla_k^n V + \sum_{i=1}^Q \mathbf{R}_i^e \cdot \nabla_i^e V = -V \quad (۸۲)$$

که در آن  $\nabla_k^n$  و  $\nabla_i^e$  معرف عملگرهایی هستند که از قرار دادن  $\mathbf{R}_i^e$  به جای  $\mathbf{r}_i^e$  در گرادیانهای نسبت به  $\mathbf{r}_k^n$  و  $\mathbf{r}_i^e$  در عبارت کلاسیک انرژی پتانسیل به دست می‌آیند. رابطه (۸۲) به عنوان اساس اثبات قضیهٔ ویریال به کار خواهد رفت.

۲. اثبات قضیه ویریا  
 رابطه (۷۳) را برای یک مورد خاص که در آن

$$A = \sum_{i=1}^Q \mathbf{R}_i^e \cdot \mathbf{P}_i^e \quad (۸۳)$$

است، به کار می‌بندیم. برای این منظور، جابه‌جاگر  $H$  با  $A$  را پیدا می‌کنیم

$$\begin{aligned} \left[ H, \sum_{i=1}^Q \mathbf{R}_i^e \cdot \mathbf{P}_i^e \right] &= \sum_{i=1}^Q \sum_{x,y,z} \{ [H, X_i^e] P_{xi}^e + X_i^e [H, P_{xi}^e] \} \\ &= i\hbar \sum_{i=1}^Q \left\{ -\frac{(\mathbf{P}_i^e)^2}{m} + \mathbf{R}_i^e \cdot \nabla_i^e V \right\} \end{aligned} \quad (۸۴)$$

(روابط جابه‌جایی یک تابع از تکانه با مکان، یا بالعکس، را به کار برده‌ایم؛ مکمل ۲ از فصل ۲، بخش ۴-ج) جمله اول داخل کروشه، متناسب با انرژی جنبشی  $T_e$  است. بنابر (۸۲)، جمله دوم برابر است با

$$-V - \sum_{k=1}^N \mathbf{r}_k^n \cdot \nabla_k^n V \quad (۸۵)$$

در نتیجه، بنابر رابطه (۷۳) خواهیم داشت

$$2\langle T_e \rangle + \langle V \rangle + \sum_{k=1}^N \mathbf{r}_k^n \cdot \langle \nabla_k^n V \rangle = 0 \quad (۸۶)$$

یعنی، چون هامیلتونی  $H$  تنها از طریق  $V$  به پارامترهای  $\mathbf{r}_k^n$  بستگی دارد داریم

$$2\langle T_e \rangle + \langle V \rangle = - \sum_{k=1}^N \mathbf{r}_k^n \cdot \langle \nabla_k^n H \rangle \quad (۸۷)$$

مؤلفه‌های  $\mathbf{r}_k^n$  در اینجا نقشی شبیه به پارامتر  $\lambda$  در (۶۹) دارند. در این حال، اعمال قضیه هلمن-فایتنن به طرف راست معادله (۸۷) نتیجه می‌دهد

$$2\langle T_e \rangle + \langle V \rangle = - \sum_{k=1}^N \mathbf{r}_k^n \cdot \nabla_k^n E(\mathbf{r}_1^n, \dots, \mathbf{r}_k^n, \dots, \mathbf{r}_N^n) \quad (۸۸)$$

به علاوه، به وضوح داریم

$$\langle T_e \rangle + \langle V \rangle = E(\mathbf{r}_1^n, \dots, \mathbf{r}_N^n) \quad (۸۹)$$

سپس به آسانی از (۸۸) و (۸۹) به دست می آوریم

$$\begin{aligned} \langle T_e \rangle &= -E - \sum_{k=1}^N \mathbf{r}_k^n \cdot \nabla_k^n E \\ \langle V \rangle &= 2E + \sum_{k=1}^N \mathbf{r}_k^n \cdot \nabla_k^n E \end{aligned} \quad (۹۰)$$

به این ترتیب، نتیجه بسیار ساده‌ای به دست می آوریم: قضیهٔ ویرال در مورد مولکولها. در صورتی که تغییرات انرژی کل را نسبت به مکانهای هسته‌ها بدانیم، می‌توانیم با استفاده از این قضیه، متوسط انرژیهای جنبشی و پتانسیل را محاسبه کنیم.

یادداشت:

انرژی الکترونی کل  $E_e$  و انرژی پتانسیل الکترونی  $\langle V_e \rangle$  نیز طبق رابطهٔ زیر به هم مربوطاند

$$\langle V_e \rangle = 2E_e + \sum_{k=1}^N \mathbf{r}_k^n \cdot \nabla_k^n E_e \quad (۹۱)$$

این رابطه را می‌توانیم با قراردادن (۸۱) و رابطهٔ صریح  $V_{nn}$  برحسب  $\mathbf{r}_k^n$  در رابطهٔ دوم (۹۰)، اثبات کنیم. لیکن، ساده‌تر است که توجه کنیم که انرژی پتانسیل الکترونی  $V_e = V_{ee} + V_{en}$ ، مانند انرژی پتانسیل کل  $V$ ، یک تابع همگن درجهٔ  $-۱$  از مختصات سیستم ذرات است. در نتیجه، استدلالهای قبلی هم بر  $H_e$  جاری هستند و هم بر  $H$ ، و می‌توانیم به‌طور همزمان در دو رابطهٔ (۹۰)،  $E$  را با  $E_e$  و  $V$  را با  $V_e$  جایگزین کنیم.

۳. یک مورد خاص: مولکول دواتمی

وقتی تعداد  $N$  هسته‌ها برابر با ۲ باشد، انرژیها فقط به فاصلهٔ بین هسته‌های  $R$  بستگی دارند. این

عبارت قضیهٔ ویریا را باز هم ساده‌تر می‌کند، که می‌شود

$$\begin{aligned} \langle T_e \rangle &= -E - R \frac{dE}{dR} \\ \langle V \rangle &= 2E + R \frac{dE}{dR} \end{aligned} \quad (92)$$

چون  $E$  فقط از طریق  $R$  به مختصات هسته‌ای بستگی دارد، داریم

$$\frac{\partial E}{\partial x_k^n} = \frac{dE}{dR} \frac{\partial R}{\partial x_k^n} \quad (93)$$

و در نتیجه

$$\sum_{k=1,2} \sum_{x,y,z} x_k^n \frac{\partial E}{\partial x_k^n} = \frac{dE}{dR} \sum_{k=1,2} \sum_{x,y,z} x_k^n \frac{\partial R}{\partial x_k^n} \quad (94)$$

حال، فاصلهٔ  $R$  بین هسته‌ها یک تابع همگن درجهٔ ۱ از مختصات هسته‌هاست. اعمال قضیهٔ اوپلر بر این تابع، امکان می‌دهد تا جمع‌بندی مضاعف طرف راست (۹۴) را با  $R$  جایگزین کنیم، و بالاخره به دست می‌آوریم

$$\sum_{k=1,2} \mathbf{r}_k^n \cdot \nabla_k^n E = R \frac{dE}{dR} \quad (95)$$

وقتی این نتیجه را در (۹۰) قرار دهیم، روابط (۹۲) حاصل می‌شوند.

می‌توانیم، نظیر (۹۰)، در (۹۲) نیز  $E$  را با  $E_e$  و  $V$  را با  $V_e$  جایگزین کنیم.

#### د) بحث

۱. پیوند شیمیایی ناشی از پایین آمدن انرژی پتانسیل الکترونی است. فرض کنید  $E_\infty$ ، مقدار انرژی کل سیستم در وقتی باشد که هسته‌های مختلف از هم بینهایت دورند. اگر امکان داشته باشد که با نزدیک کردن هسته‌ها به یکدیگر یک مولکول پایدار تشکیل دهیم، بایستی یک آرایش نسبی از این هسته‌ها وجود داشته باشد که برای آن انرژی کل  $E$  از یک مینیموم  $E_\infty < E_0$  عبور کند. در این صورت، برای مقادیر مربوط  $\mathbf{r}_k^n$ ، داریم

$$\nabla_k^n E = 0 \quad (96)$$

آنگاه، روابط (۹۰) نشان می‌دهند که، برای این آرایش تعادل، انرژی جنبشی و انرژی پتانسیل برابرند با

$$\begin{aligned}\langle T_e \rangle_0 &= -E_0 \\ \langle V \rangle_0 &= 2E_0\end{aligned}\quad (97)$$

به علاوه، وقتی هسته‌ها از یکدیگر بینهایت دور باشند، سیستم مرکب است، از تعداد معینی اتم یا یون که بین آنها برهم‌کنشی وجود ندارد (انرژی دیگر به  $\mathbf{r}_{jk}^{-1}$  وابسته نیست). برای هر یک از این زیرسیستمها، قضیه ویريال نشان می‌دهد که  $\langle T_e \rangle = -E$ ، و  $\langle V \rangle = 2E$ ، و از این رو، برای سیستم به صورت یک کل نیز باید داشته باشیم

$$\begin{aligned}\langle T_e \rangle_\infty &= -E_\infty \\ \langle V \rangle_\infty &= 2E_\infty\end{aligned}\quad (98)$$

در این صورت، با کم کردن (۹۸) از (۹۷) داریم

$$\begin{aligned}\langle T_e \rangle_0 - \langle T_e \rangle_\infty &= -(E_0 - E_\infty) > 0 \\ \langle V \rangle_0 - \langle V \rangle_\infty &= 2(E_0 - E_\infty) < 0\end{aligned}\quad (99)$$

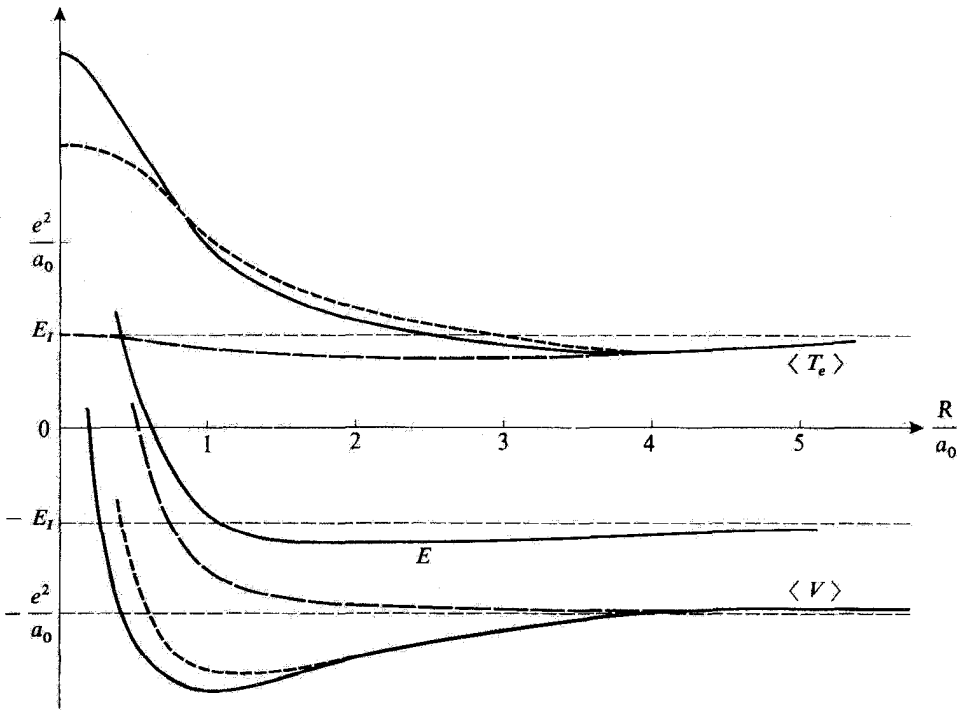
بنابراین، تشکیل مولکول پایدار، همواره با افزایش انرژی جنبشی الکترونها و کاهش انرژی پتانسیل کل همراه است. علاوه بر این، انرژی پتانسیل الکترونی باید، حتی بیشتر کاهش یابد زیرا مقدار متوسط  $\langle V_{nm} \rangle$  (دافعه بین هسته‌ها)، که در بینهایت صفر است، همواره مثبت است. لذا، آنچه که عامل پیوند شیمیایی است، پایین آمدن انرژی پتانسیل الکترونی  $\langle V_{ee} + V_{en} \rangle$  است. در وضع تعادل، این پایین آمدن بایستی از افزایش در  $\langle T_e \rangle$  و  $\langle V_{nm} \rangle$  زیادتر باشد.

## ۲. مورد خاص یون $H_2^+$

۱. کاربرد قضیه ویريال در مورد انرژی وردشی تقریبی.

به بررسی تغییرات  $\langle T_e \rangle$  و  $\langle V \rangle$  برای یون  $H_2^+$  برمی‌گردیم. در ابتدا، پیش‌بینیهای مدل وردشی بخش ۲ را، که منجر به روابط تقریبی (۵۲) و (۵۳) شدند، بررسی می‌کنیم. از رابطه دوم، نتیجه می‌شود که

$$\Delta T_e = \langle T_e \rangle - \langle T_e \rangle_\infty = \frac{1}{1+S}(A - 2SE_I) \quad (100)$$



شکل ۱۳ انرژی جنبشی الکترونی  $\langle T_e \rangle$  و انرژی پتانسیل  $\langle V \rangle$  یون  $H_1^+$  به صورت تابعی از  $\rho = R/a_0$  (به منظور مقایسه، انرژی کل  $E = \langle T_e \rangle + \langle V \rangle$  را نیز نشان داده‌ایم).

خطوط پر: مقادیر دقیق (پیوند شیمیایی ناشی از این واقعیت است که کاهش  $\langle V \rangle$  کمی سریعتر از افزایش  $\langle T_e \rangle$  صورت می‌گیرد).

خط چینهای بلند: مقادیر متوسط که از تابع موج پیوندی حاصل از روش وردشی ساده بخش ۲، محاسبه شده‌اند.

خط چینهای کوتاه: مقادیر به دست آمده از اعمال قضیه ویریا بر انرژی داده شده با همان محاسبه وردشی.

چون  $S$  همیشه بزرگتر از  $A/2E_I$  است (شکل ۳)، این محاسبه نشان می‌دهد که  $\Delta T_e$  همواره منفی است. علاوه بر این، شکل ۱۳ نیز، که در آن منحنیهای خط چین معرف تغییرات عبارات تقریبی (۵۲) و (۵۳) هستند، این مطلب را نشان می‌دهد. به‌ویژه، از روی این شکل، ملاحظه می‌کنیم که بنابر محاسبه وردشی،  $\Delta T_e$  در تعادل (۲٫۵  $\rho \approx$ ) منفی، و  $\Delta V$  مثبت است. بنابر (۹۹)، این نتایج، هر دو نادرست‌اند. در اینجا محدودیت‌های محاسبه وردشی را، که برای انرژی کل  $\langle T_e + V \rangle$  مقداری قابل قبول، اما برای هر کدام از  $\langle T_e \rangle$  و  $\langle V \rangle$  به‌طور جداگانه مقادیر غیرقابل قبولی را می‌دهد، مشاهده می‌کنیم. مقادیر متوسط کمیت‌های اخیر شدیداً به تابع موج بستگی دارند.

قضیه ویریاال به ما امکان می دهد، بدون اینکه مجبور باشیم به محاسبه دقیق مندرج در بخش ۱-ج متوسل شویم، تقریب خیلی بهتری برای  $\langle T_e \rangle$  و  $\langle V \rangle$  به دست بیاوریم. آنچه باید انجام دهیم این است که روابط دقیق (۹۲) را بر انرژی  $E$  که توسط روش وردشی محاسبه می شود، اعمال کنیم. باید انتظار داشته باشیم که نتیجه قابل قبولی به دست بیاوریم، زیرا تقریب وردشی اینک فقط برای تعیین انرژی کل  $E$  به کار می رود. مقادیری که به این ترتیب برای  $\langle T_e \rangle$  و  $\langle V \rangle$  به دست می آیند در شکل ۱۳ با خط چینهای کوتاه نشان داده شده اند. به منظور مقایسه، مقادیر دقیق  $\langle T_e \rangle$  و  $\langle V \rangle$  را (که از اعمال قضیه ویریاال بر منحنی خط پر شکل ۲ به دست می آیند) با خطوط پر نشان داده ایم. ابتدا، ملاحظه می کنیم که برای  $\rho = ۲.۵$ ، منحنی خط چین کوتاه، همان گونه که انتظار می رود، نشان می دهد که  $\Delta T_e$  مثبت و  $\Delta V$  منفی است. به علاوه، شکل عمومی این منحنیها، نسبتاً همان شکل عمومی منحنیهای خط پر است. تا وقتی که  $\rho \geq ۱.۵$  باشد، اعمال قضیه ویریاال بر انرژی وردشی، مقادیری را می دهد که خیلی به واقعیت نزدیک اند. این، یک بهبود قابل توجهی را نسبت به محاسبه مستقیم مقادیر متوسط در حالتهای تقریبی، نشان می دهد.

## ۲. رفتار $\langle T \rangle$ و $\langle V \rangle$

منحنیهای خط پر شکل ۱۳ (منحنیهای دقیق) نشان می دهند که وقتی  $R$  به سمت صفر میل کند،  $\langle T_e \rangle \rightarrow ۴E_I$  و  $\langle V \rangle \rightarrow +\infty$ . در واقع، وقتی  $R = 0$  باشد، ما با هم ارز یون  $He^+$  که انرژی جنبشی الکترونی آن  $۴E_I$  است، مواجه هستیم. واگرایی  $\langle V \rangle$  ناشی از جمله  $\langle V_{nn} \rangle = e^2/R$  است، که وقتی  $R$  به سمت صفر میل می کند بینهایت می شود (انرژی پتانسیل الکترونی  $\langle V_e \rangle = \langle V \rangle - e^2/R$  متناهی باقی می ماند و به سمت  $-۸E_I$  میل می کند، که در واقع، مقدار آن در یون  $He^+$  است).

مطالعه رفتار  $R$  بزرگ، مستلزم بحث مفصلتری است. در بالا (بخش ۳-ب) دیدیم که، برای  $R \gg a$ ، انرژی  $E_-$  حالت پایه دارای رفتاری به صورت زیر است

$$E_- \simeq -E_I - \frac{a}{R^2} \quad (۱۰۱)$$

که در آن  $a$ ، یک مقدار ثابتی است که متناسب با قطبش پذیری اتم هیدروژن است. با قرار دادن این نتیجه در فرمولهای (۹۲)، به دست می آوریم

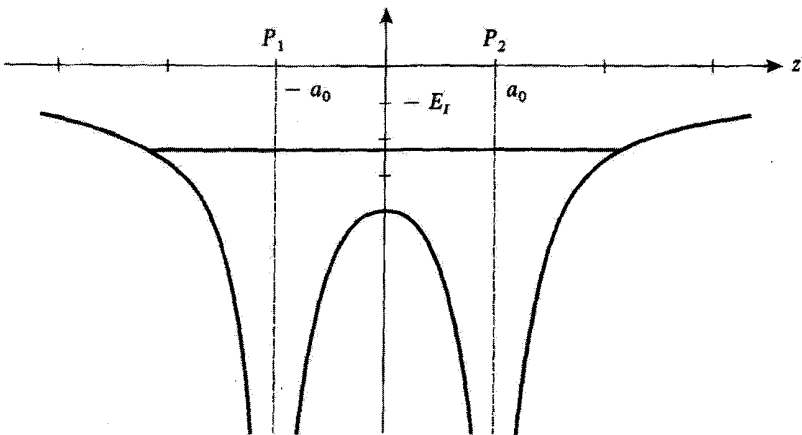
$$\begin{aligned} \langle T_e \rangle &\simeq E_I - \frac{3a}{R^2} \\ \langle V \rangle &\simeq -2E_I + \frac{2a}{R^2} \end{aligned} \quad (۱۰۲)$$

وقتی  $R$  از یک مقدار بسیار بزرگ تنزل کند،  $\langle T_e \rangle$  از مقدار مجانبی  $E_I$  خود به صورت  $1/R^2$  شروع به کاهش، و  $\langle V \rangle$  از  $-2E_I$  شروع به افزایش می کند. سپس، این تغییرات تغییر علامت می دهند (باید هم چنین باشد زیرا  $\langle T_e \rangle_\infty$  از  $\langle T_e \rangle$  بزرگتر و  $\langle V \rangle_\infty$  کوچکتر است). با ادامه کاهش  $R$  شکل ۱۳،  $\langle T_e \rangle$  از یک مینیموم می گذرد و سپس افزایش می یابد تا وقتی به ازاء  $R = 0$  به مقدار  $4E_I$  برسد. اما انرژی پتانسیل  $\langle V \rangle$ ، از یک ماکزیموم عبور می کند، سپس کاهش می یابد. از یک مینیموم می گذرد، و پس

از آن وقتی  $R$  به سمت صفر میل کند، به سمت بینهایت میل می‌کند. چگونه می‌توانیم این تغییرات را تغییر کنیم؟

همان‌طور که بارها دیده‌ایم، عناصر غیر قطری  $H_{12}$  و  $H_{21}$  در میانه (۲۱)، وقتی  $R \rightarrow \infty$ ، به طور نمایی به سمت صفر میل می‌کنند. بنابراین، در بحث تغییر انرژی یون  $H_1^+$  در فواصل زیاد بین هسته‌ای، می‌توانیم منحصراً برحسب  $H_{11}$  یا  $H_{22}$  استدلال کنیم. در این صورت، مسئله به مطالعه اختلاف یک اتم هیدروژن متمرکز در  $P_2$  توسط میدان الکتریکی پروتون  $P_1$  تقلیل می‌یابد. این میدان با کشیدن اوربیتال الکترونی در جهت  $P_1$ ، موجب تغییر شکل آن می‌شود (شکل ۶). در نتیجه، تابع موج به داخل حجم بزرگتری توسعه پیدا می‌کند. طبق روابط عدم قطعیت هایزنبرگ، این عمل موجب می‌شود که انرژی جنبشی کاهش یابد؛ به این طریق می‌توان رفتار  $\langle T_e \rangle$  برای  $R$  بزرگ را تشریح کرد.

با استدلال برحسب  $H_{22}$ ، می‌توانیم رفتار مجانبی ( $V$ ) را نیز تشریح کنیم. بحث بخش ۳-ب نشان داد که، برای  $R \gg a_0$ ، قطبش اتم هیدروژن واقع در  $P_2$ ، انرژی برهم‌کنش  $\langle -e^2/r_1 + e^2/R \rangle$  آن با  $P_1$  را کمی منفی می‌کند (متناسب با  $-1/R^2$ ). اگر  $\langle V \rangle$  مثبت باشد، به خاطر این است که وقتی  $P_1$  به  $P_2$  نزدیک می‌شود، انرژی پتانسیل  $\langle -e^2/r_2 \rangle$  اتم واقع در  $P_2$ ، سریعتر از کاهش  $\langle -e^2/r_1 + e^2/R \rangle$  افزایش می‌یابد. این افزایش در  $\langle -e^2/r_2 \rangle$ ، ناشی از این حقیقت است که جاذبه  $P_1$ ، الکترون را کمی از  $P_2$  دور می‌کند و آن را به ناحیه‌ای از فضا می‌برد که در آن پتانسیل ناشی از  $P_2$  کمتر منفی است.



شکل ۱۴ تغییر انرژی پتانسیل  $V_e$  الکترون تحت تأثیر جاذبه همزمان دو پروتون  $P_1$  و  $P_2$ ، وقتی یکی از آنها در طول خط  $P_1 P_2$  حرکت می‌کند. در حالت پیوندی، تابع موج در ناحیه بین  $P_1$  و  $P_2$  متمرکز است، و الکترون به طور همزمان تحت تأثیر جاذبه هر دو پروتون قرار دارد.



برای  $R \simeq R_0$  (موضع تعادل یون  $H_2^+$ )، تابع موج حالت پیوندی، به شدت در ناحیه بین دو پروتون جایگزیده است. کاهش در  $\langle V \rangle$  (علی‌رغم افزایش در  $e^2/R$ ) از اینجا ناشی می‌شود که الکترون در ناحیه‌ای از فضا قرار دارد که در آن، به‌طور همزمان تحت تأثیر جاذبه هر دو پروتون واقع شده است. این، انرژی پتانسیل الکترون را پایین می‌آورد (شکل ۱۴). این جاذبه مرکب دو پروتون، همچنین منجر به کاهش بسط فضایی تابع موج الکترونی، که در ناحیه میانی متمرکز است، می‌گردد. به این دلیل است که، برای  $R$  نزدیک به  $R_0$ ، وقتی  $R$  کاهش می‌یابد ( $T_e$ ) افزایش پیدا می‌کند.

### مراجع برای مطالعه بیشتر

(یون  $H_2^+$ ، مولکول  $H_2$ ، طبیعت پیوند شیمیایی و غیره):

Pauling (12.2); Pauling and Wilson (1.9), chaps. XII and XIII; Levine (12.3), chaps. 13 and 14; Karplus and Porter (12.1), chap. 5, §6; Slater (1.6), chaps. 8 and 9; Eyring et al (12.5), chaps. XI and XII; Coulson (12.6), chap. IV; Wahl (12.13).

# مکمل ۸

## تمرینات

۱. ذره‌ای به جرم  $m$ ، در یک چاه پتانسیل یک‌بعدی نامتناهی به پهنای  $a$  قرار دارد

$$V(x) = 0 \quad \text{برای} \quad 0 \leq x \leq a$$
$$V(x) = +\infty \quad x < 0, x > a$$

این ذره تحت تأثیر اختلال  $W$  به شکل

$$W(x) = aw_0 \delta\left(x - \frac{a}{2}\right)$$

است، که در آن،  $w_0$  یک ثابت حقیقی با بعد انرژی است.

الف) تغییراتی را که توسط  $W(x)$  در ترازهای انرژی ذره القا می‌شود، تا مرتبه اول نسبت به  $w_0$ ، حساب کنید.

ب) در واقع این مسئله به‌طور دقیق قابل حل است. با قرار دادن  $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ ، نشان بدهید که مقادیر ممکن انرژی از یکی از دو معادله  $\sin(ka/2) = 0$  یا  $\tan(ka/2) = -\hbar^2 k/maw_0$  به دست می‌آید (نظیر تمرین ۲ از مکمل ۱۲ از فصل ۱، مواظب ناپوستگی مشتق تابع موج در  $x = a/2$  باشید).

نتایج حاصله را نسبت به علامت و اندازه  $w_0$  مورد بحث قرار دهید. نشان دهید که در حد  $w_0 \rightarrow 0$ ، نتایج سؤال قبلی به دست می‌آید.

۲. ذره‌ای به جرم  $m$  را که در چاه پتانسیل دوبعدی نامتناهی به پهنای  $a$  قرار دارد در نظر بگیرید (مکمل ۷ از فصل ۲)

$$V(x, y) = 0 \quad 0 \leq x \leq a \quad \text{و} \quad 0 \leq y \leq a$$
$$V(x, y) = +\infty \quad \text{سایر جاها}$$

این ذره همچنین تحت تأثیر یک اختلال  $W$  است که با پتانسیل زیر بیان می‌شود

$$W(x, y) = w_0 \quad 0 \leq x \leq \frac{a}{2} \quad \text{و} \quad 0 \leq y \leq \frac{a}{2}$$

$$W(x, y) = 0 \quad \text{سایر جاها}$$

الف) انرژی مختل حالت پایه را تا مرتبه اول نسبت به  $w_0$  حساب کنید.

ب) به همین سؤال در مورد اولین حالت برانگیخته پاسخ دهید. تابع موجهای مربوط را تا مرتبه صفر نسبت به  $w_0$  بنویسید.

۳. ذره‌ای به جرم  $m$  که مقید به حرکت در صفحه  $xOy$  است دارای هامیلتونی زیر است

$$H_0 = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{P_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(X^2 + Y^2)$$

(یک نوسانگر هماهنگ دوبعدی با بسامد زاویه‌ای  $\omega$ ). می‌خواهیم اثر اختلال  $W$  را که به صورت

$$W = \lambda_1 W_1 + \lambda_2 W_2$$

است، بر روی این ذره، مطالعه کنیم،  $\lambda_1$  و  $\lambda_2$  ثابت، و  $W_1$  و  $W_2$  عبارت‌اند از

$$W_1 = m\omega^2 XY$$

$$W_2 = \hbar\omega \left( \frac{L_x^2}{\hbar^2} - 2 \right)$$

( $L_z$  عبارت است از مؤلفهٔ تکانهٔ زاویه‌ای مداری ذره روی محور  $Oz$ ).

در محاسبات اختلال، برای انرژیها فقط تصحیحات مرتبه اول و برای بردارهای حالت، تصحیحات مرتبه صفر را در نظر بگیرید.

الف) بدون انجام هرگونه محاسبه، ویژه‌مقدارهای  $H_0$ ، درجات واگنی آنها و ویژه‌بردارهای وابسته به آنها را تعیین کنید.

در آنچه به دنبال می‌آید، فقط حالت دوم برانگیخته  $H_0$  را، که انرژی آن  $3\hbar\omega$ ، و سه بار واگن است در نظر بگیرید.

ب) ماتریسهای معرف  $W_1$  و  $W_2$  به ویژه زیرفضای ویژه مقدار  $\hbar\omega$  ۳ی متعلق به  $H$  را محاسبه کنید.

ج) فرض کنید  $\lambda_2 = 0$  و  $\lambda_1 \ll 1$ .

با استفاده از نظریه اختلال، اثر جمله  $\lambda_1 W_1$  روی حالت دوم برانگیخته  $H$  را محاسبه کنید. (د) نتایج به دست آمده در  $c$  را با بسط محدود جواب دقیق، که به کمک روشهای مندرج در مکمل ۸ از فصل ۵ (مدهای ارتعاشی متعارف دو نوسانگر هماهنگ جفت شده) به دست می آید، مقایسه کنید.

ه) فرض کنید  $1 \ll \lambda_1 \ll \lambda_2$ . نتایج سؤال  $c$  را یک وضعیت نامختل جدید در نظر بگیرید و اثر جمله  $\lambda_2 W_2$  را حساب کنید.

و) حال فرض کنید که  $\lambda_1 = 0$  و  $\lambda_2 \ll 1$ .

با استفاده از نظریه اختلال، اثر جمله  $\lambda_2 W_2$  را بر روی دومین حالت برانگیخته  $H$  پیدا کنید. ز) نتایج به دست آمده در  $f$  را با حل دقیق، که می توان آن را از بحثهای مکمل ۴ از فصل ۵ به دست آورد، مقایسه کنید.

ح) بالاخره، فرض کنید  $1 \ll \lambda_2 \ll \lambda_1$ . با در نظر گرفتن نتایج سؤال  $f$  به عنوان یک وضعیت نامختل جدید، اثر جمله  $\lambda_1 W_1$  را محاسبه کنید.

۴. یک ذره  $P$  به جرم  $\mu$ ، که مقید به حرکت بر روی دایره ای به مرکز  $O$  و شعاع ثابت  $\rho$  در صفحه  $xOy$  است را در نظر بگیرید (یک دوران کننده دوبعدی). تنها متغیر سیستم، زاویه  $\alpha = (Ox, OP)$  است، و حالت کوانتومی ذره توسط تابع موج  $\psi(\alpha)$  (که نشان دهنده دامنه احتمال یافتن ذره در نقطه ای از دایره است که با زاویه  $\alpha$  تعیین می شود) تعریف می گردد. در هر نقطه از دایره،  $\psi(\alpha)$  فقط یک مقدار می تواند داشته باشد به طوری که

$$\psi(\alpha + 2\pi) = \psi(\alpha)$$

$\psi(\alpha)$  در صورتی بهنجار است که داشته باشیم

$$\int_0^{2\pi} |\psi(\alpha)|^2 d\alpha = 1$$

الف) عملگر  $M = \hbar/i d/d\alpha$  را در نظر بگیرید. آیا  $M$  هرمیتی است؟ ویژه مقدارها و ویژه توابع بهنجار  $M$  را حساب کنید. معنای فیزیکی  $M$  چیست؟

ب) انرژی جنبشی ذره را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$H_0 = \frac{M^2}{2\mu\rho^2}$$

ویژه مقادیر و ویژه توابع  $H_0$  را محاسبه کنید. آیا انرژیها واگن‌اند؟

ج) در لحظه  $t = 0$ ، تابع موج ذره عبارت است از  $N \cos^2 \alpha$  (که  $N$  ضریب بهنجارش است). جایگزیدگی ذره را بر روی دایره، در زمان بعدی  $t$ ، مورد بحث قرار دهید.

د) فرض کنید که ذره دارای بار  $q$  باشد و با یک میدان الکتریکی یکنواخت  $\mathcal{E}$  که موازی  $Ox$  است برهم‌کنش کند. در این صورت، باید به هامیلتونی  $H_0$ ، اختلال زیر را بیفزاییم

$$W = -q \mathcal{E} \rho \cos \alpha$$

تابع موج جدید حالت پایه را تا مرتبه اول نسبت به  $\mathcal{E}$  محاسبه کنید. ضریب تناسب  $\chi$  (پذیرفتاری خطی) بین دوقطبی الکتریکی موازی با  $Ox$ ، که ذره کسب می‌کند، و میدان  $\mathcal{E}$  را تعیین کنید. (ه) برای مولکول اتان  $CH_3 - CH_3$ ، دوران یک گروه  $CH_3$  نسبت به گروه دیگر را، حول خط واصل بین دو اتم کربن، در نظر بگیرید.

تا تقریب مرتبه اول، این دوران آزاد است، و هامیلتونی  $H_0$  که در  $b$  معرفی کردیم، انرژی جنبشی دورانی یکی از گروههای  $CH_3$  نسبت به دیگری را توصیف می‌کند (البته، باید  $2\mu\rho^2$  را با  $\lambda I$  جایگزین کرد، که در آن،  $I$  گشتاور لختی گروه  $CH_3$  نسبت به محور دوران و  $\lambda$  یک مقدار ثابت است). برای اینکه انرژی برهم‌کنش الکتروستاتیکی بین دو گروه  $CH_3$  را منظور کنیم، به  $H_0$ ، جمله‌ای از نوع زیر اضافه می‌کنیم

$$W = b \cos^2 \alpha$$

که  $b$  یک ثابت حقیقی است.

یک توجیه فیزیکی برای وابستگی  $W$  به  $\alpha$  ارائه دهید. انرژی و تابع موج حالت پایه جدید را حساب کنید (برای تابع موج، تا مرتبه اول نسبت به  $b$  و برای انرژی تا مرتبه دوم). برای این نتیجه یک تعبیر فیزیکی ارائه کنید.

۵. یک سیستم با تکانه زاویه‌ای  $J$  در نظر بگیرید. در این تمرین، مطالعه خود را به یک زیرفضای سه‌بعدی حاصل از سه کت  $|1, +1\rangle$ ،  $|0, 0\rangle$ ،  $|1, -1\rangle$  که ویژه‌حالت‌های مشترک  $J^2$  (ویژه‌مقدار  $2\hbar^2$ )

و  $J_z$  (ویژه مقادیر  $+\hbar, 0, -\hbar$ ) هستند، محدود می‌کنیم. هامیلتونی  $H_0$  سیستم عبارت است از

$$H_0 = aJ_z + \frac{b}{\hbar} J_z^2$$

که در آن،  $a$  و  $b$  دو ثابت مثبت، و دارای بعد بسامد زاویه‌ای هستند.

الف) ترازهای انرژی سیستم کدام‌اند؟ به‌ازاء چه مقداری از کسر  $b/a$ ، واگنی وجود دارد؟  
ب) یک میدان استاتیک  $\mathbf{B}_0$  در جهت  $\mathbf{u}$  با زوایای قطبی  $\theta$  و  $\varphi$  اعمال می‌کنیم. برهم‌کنش گشتاور مغناطیسی سیستم

$$\mathbf{M} = \gamma \mathbf{J}$$

( $\gamma$ : نسبت ژیرومغناطیسی، منفی فرض می‌شود) با  $\mathbf{B}_0$  توسط هامیلتونی زیر بیان می‌شود

$$W = \omega_0 J_u$$

که در آن،  $\omega_0 = -\gamma |\mathbf{B}_0|$  بسامد زاویه‌ای لارمور در میدان  $\mathbf{B}_0$ ، و  $J_u$  مؤلفه  $\mathbf{J}$  در امتداد  $\mathbf{u}$  است

$$J_u = J_z \cos \theta + J_x \sin \theta \cos \varphi + J_y \sin \theta \sin \varphi$$

ماتریسی را که معرف  $W$  در پایه سه ویژه‌حالت  $H_0$  است، بنویسید.

ج) فرض کنید  $b = a$  و جهت  $\mathbf{u}$  موازی  $Ox$  باشد. همچنین داریم:  $\omega_0 \ll a$ . انرژیها و ویژه‌حالت‌های سیستم را حساب کنید، برای انرژیها تا مرتبه اول نسبت به  $\omega_0$  و برای ویژه‌حالتها، تا مرتبه صفر.

د) فرض کنید که  $b = 2a$  و بار هم  $\omega_0 \ll a$ ، ولی جهت  $\mathbf{u}$  در اینجا دلخواه باشد. بسط حالت پایه  $|\psi_0\rangle$  متعلق به  $H_0 + W$  در پایه  $\{|-1\rangle, |0\rangle, |1\rangle\}$  تا مرتبه اول نسبت به  $\omega_0$  چیست؟

مقدار متوسط  $\langle \mathbf{M} \rangle$  گشتاور مغناطیسی  $\mathbf{M}$  سیستم در حالت  $|\psi_0\rangle$  را محاسبه کنید. آیا  $\langle \mathbf{M} \rangle$  و  $\mathbf{B}_0$  متوازی‌اند؟

نشان بدهید که می‌توانیم بنویسیم

$$\langle M_i \rangle = \sum_j \chi_{ij} B_j$$

که در آن  $x, y, z = i, j, z$  است. ضرایب  $\chi_{ij}$  (مؤلفه‌های تانسور پذیرفتاری) را محاسبه کنید.

۶. یک سیستم متشکل از یک اسپین الکترونی  $S$  و دو اسپین هسته‌ای  $I_1$  و  $I_2$  را در نظر بگیرید ( $S$ )، به‌عنوان مثال، اسپین الکترون جفت‌نشده یک مولکول دواتمی پارامغناطیسی، و  $I_1$  و  $I_2$  اسپینهای دو هستهٔ این مولکول‌اند).

فرض کنید که  $S, I_1, I_2$  همگی مساوی  $1/2$  باشند. فضای حالت این سیستم سه‌اسپینی توسط هشت کت راست‌هنجار  $(\epsilon_S, \epsilon_1, \epsilon_2)$ ، ویژه‌پردازهای مشترک  $S_z, I_{1z}, I_{2z}$ ، با ویژه‌مقدارهای، به‌ترتیب  $\epsilon_S \hbar/2, \epsilon_1 \hbar/2, \epsilon_2 \hbar/2$  (با  $\epsilon_S = \pm 1, \epsilon_1 = \pm 1, \epsilon_2 = \pm 1$ )، پدید می‌آید. به‌عنوان مثال، کت  $(+, -, +)$  مربوط است به ویژه‌مقدارهای  $+\hbar/2$  برای  $S_z$ ،  $-\hbar/2$  برای  $I_{1z}$  و  $+\hbar/2$  برای  $I_{2z}$ .

الف) ابتدا از هرگونه جفت‌شدگی بین سه اسپین صرف‌نظر می‌کنیم. ولی فرض می‌کنیم که اسپینها در یک میدان مغناطیسی یکنواخت  $B$  به‌موازات  $Oz$  واقع شده‌اند. چون نسبت‌های زیرومغناطیسی  $I_1$  و  $I_2$  متساویند، هامیلتونی  $H_0$  سیستم را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$H_0 = \Omega S_z + \omega I_{1z} + \omega I_{2z}$$

که در آن،  $\Omega$  و  $\omega$  ثابت‌های حقیقی مثبت و متناسب با  $|B|$ ‌اند. فرض کنید  $\Omega > 2\omega$  باشد. انرژیهای ممکن این سیستم سه‌اسپینی و درجهٔ واگنی آنها را پیدا کنید، نمودار انرژی را رسم کنید.

ب) حال، با افزودن هامیلتونی

$$W = aS \cdot I_1 + aS \cdot I_2$$

جفت‌شدگی اسپینها را منظور می‌کنیم، که در آن،  $a$  ثابت حقیقی مثبت است (جفت‌شدگی مستقیم  $I_1$  و  $I_2$  قابل اغماض است).

$\epsilon_S, \epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon'_S, \epsilon'_1, \epsilon'_2$  در چه شرایطی باید صدق کنند تا  $aS \cdot I_1$  دارای یک عنصر ماتریسی غیرصفر بین  $(\epsilon_S, \epsilon_1, \epsilon_2)$  و  $(\epsilon'_S, \epsilon'_1, \epsilon'_2)$  باشد؟ به‌همین سؤال در مورد  $aS \cdot I_2$  پاسخ دهید.

ج) فرض کنید که

$$a\hbar^2 \ll \hbar\Omega, \hbar\omega$$

به طوری که بتوان  $W$  را نسبت به  $H_0$  مانند یک اختلال در نظر گرفت. ویژه مقادیرهای هامیلتونی کل  $H = H_0 + W$  را تا مرتبه اول نسبت به  $W$  پیدا کنید. ویژه حالت‌های  $H$  را، تا مرتبه صفر نسبت به  $W$  به دست بیاورید. نمودار انرژی را رسم کنید.

(د) با استفاده از تقریب سؤال قبلی، بسامدهای بور را که موقع منظور کردن جفت‌شدگی  $W$ ی اسپینها در تحول  $\langle S_z \rangle$  ظاهر می‌شوند، تعیین کنید.

در یک آزمایش E.P.R. (تشدید پارامغناطیسی الکترونی)، بسامدهای خطوط تشدید مشاهده شده، مساوی با بسامدهای بور قبل‌اند. شکل طیف E.P.R. مشاهده شده برای سیستم سه اسپینی چگونه است؟ چگونه ثابت جفت‌شدگی  $a$  را می‌توان از این طیف تعیین کرد؟ (ه) حال فرض کنید میدان مغناطیسی  $B$  صفر باشد. بنابراین خواهیم داشت  $\Omega = \omega = 0$ . در این صورت هامیلتونی به  $W$  کاهش می‌یابد.

۱.  $I = I_1 + I_2$  را اسپین کل هسته‌ای بگیرید. ویژه مقادیرهای  $I_z$  و درجات واگنی آنها را پیدا کنید. نشان بدهید که  $W$ ، بین ویژه حالت‌هایی از  $I^2$  که دارای ویژه مقادیرهای متفاوتی هستند، دارای عنصر ماتریسی نیست.

۲.  $J = S + I$  را اسپین کل بگیرید. ویژه مقادیرهای  $J^2$  و درجات واگنی آنها را پیدا کنید. ویژه مقادیرهای انرژی و درجات واگنی سیستم سه اسپینی را تعیین کنید. آیا مجموعه  $\{J^2, J_z\}$  یک مجموعه کاملی از مشاهده پذیرهای جابه‌جای پذیر تشکیل می‌دهد؟ به همین سؤال درباره  $\{I^2, J^2, J_z\}$  پاسخ بدهید.

۷. هسته‌ای را با اسپین  $I = 3/2$ ، که فضای حالت آن توسط چهار بردار  $|m\rangle$ ،  $I_z = +3/2, +1/2, -1/2, -3/2$ ، ویژه بردارهای مشترک  $I^2$  (ویژه مقدار  $15\hbar^2/4$ ) و  $I_z$  (ویژه مقدار  $m\hbar$ )، پدید می‌آید، در نظر بگیرید.

این هسته را در مبدأ مختصات در یک میدان الکتریکی غیریکتواخت مشتق از یک پتانسیل  $U(x, y, z)$ ، قرار می‌دهیم. جهت‌های محورهای مختصات را طوری اختیار می‌کنیم که در مبدأ داشته باشیم

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2 U}{\partial y \partial z} = \frac{\partial^2 U}{\partial z \partial x} = 0$$

یادآوری می‌کنیم که  $U$  در معادله لاپلاس صدق می‌کند

$$\Delta U = 0$$



فرض خواهیم کرد که هامیلتونی برهم‌کنش بین گرادیان میدان الکتریکی در مبدأ و گشتاور چهارقطبی الکتریکی هسته را بتوان به صورت زیر نوشت

$$H_0 = \frac{qQ}{2I(2I-1)} \frac{1}{\hbar^2} [a_x I_x^2 + a_y I_y^2 + a_z I_z^2]$$

که در آن  $q$  بار الکترون،  $Q$  یک ثابت با بعد سطح و متناسب با گشتاور چهارقطبی هسته، و

$$a_x = \left( \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \right)_0 ; \quad a_y = \left( \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} \right)_0 ; \quad a_z = \left( \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} \right)_0$$

(شاخص ۰ معرف این است که مشتقها در مبدأ حساب می‌شوند).

الف) نشان بدهید که اگر  $U$  نسبت به دوران حول  $Oz$  متقارن باشد،  $H_0$  دارای شکل زیر است

$$H_0 = A[3I_z^2 - I(I+1)]$$

که در آن  $A$  مقدار ثابتی است که باید آن را مشخص کنیم. ویژه‌مقدارهای  $H_0$ ، درجات واگنی آنها و ویژه‌حالت‌های مربوط را پیدا کنید.

ب) نشان بدهید که در حالت کلی،  $H_0$  را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$H_0 = A[3I_z^2 - I(I+1)] + B(I_+^2 + I_-^2)$$

که در آن  $A$  و  $B$  مقادیر ثابتی هستند که باید برحسب  $a_x$  و  $a_y$  بیان شوند.

ماتریس معرف  $H_0$  در پایه  $\{|m\rangle\}$  چیست؟ نشان بدهید که این ماتریس را می‌توان به دو زیرماتریس  $2 \times 2$  تجزیه کرد. ویژه‌مقدارهای  $H_0$  و درجات واگنی آنها و همچنین ویژه‌حالت‌های مربوط را تعیین کنید.

ج) هسته، علاوه بر گشتاور چهارقطبی، دارای یک گشتاور مغناطیسی  $\mathbf{M} = \gamma \mathbf{I}$  نیز هست ( $\gamma$ : نسبت ژیرومغناطیسی است). به میدان الکتروستاتیکی یک میدان مغناطیسی  $\mathbf{B}_0$ ، با جهت دلخواه  $\mathbf{u}$ ، سوار شده است. قرار می‌دهیم  $\omega_0 = -\gamma |\mathbf{B}_0|$ .

چه عبارتی برای  $W$  باید انتخاب کنیم و به  $H_0$  بیفزاییم تا جفت‌شدگی بین  $\mathbf{M}$  و  $\mathbf{B}_0$  را به حساب آوریم؟ انرژی‌های سیستم را تا مرتبه اول نسبت به  $B_0$ ، محاسبه کنید.

د) فرض کنید  $B_0$  موازی  $Oz$  و آن قدر ضعیف باشد که ویژه‌حالت‌های به‌دست آمده در  $b$  و انرژی‌های به‌دست آمده تا مرتبه اول نسبت به  $\omega$  در  $c$ ، تقریب‌های خوبی باشند. بسامدهای بور که در تحول  $\langle I_x \rangle$  ظاهر می‌شوند، کدام‌اند؟ با استفاده از این بسامدها، شکل طیف تشدید مغناطیسی را که می‌توان با یک میدان بسامد رادیویی نوسان‌کننده در امتداد  $Ox$ ، مشاهده کرد، پیدا کنید.

۸. ذره‌ای به جرم  $m$  در یک چاه پتانسیل یک‌بعدی نامتناهی به پهنای  $a$  قرار دارد

$$\begin{cases} V(x) = 0 & \text{برای } 0 \leq x \leq a \\ V(x) = +\infty & \text{جاهای دیگر} \end{cases}$$

فرض کنید که این ذره، با بار  $-q$ ، تحت تأثیر یک میدان الکتریکی یکنواخت  $\mathcal{E}$  قرار بگیرد که اختلال  $W$ ی مربوط به آن به صورت زیر است

$$W = q\mathcal{E} \left( X - \frac{a}{2} \right)$$

الف) فرض کنید  $\varepsilon_1$  و  $\varepsilon_2$  تصحیحات انرژی حالت پایه تا مرتبه اول و مرتبه دوم نسبت به  $\mathcal{E}$  باشند.

نشان بدهید که  $\varepsilon_1$  صفر است. عبارتی به صورت یک رشته برای  $\varepsilon_2$  بنویسید و جملات آن را برحسب  $q$ ،  $\mathcal{E}$ ،  $m$ ،  $a$ ، و  $\hbar$  محاسبه کنید (می‌توانید از انتگرال‌های آخر این تمرین استفاده کنید).  
ب) با پیدا کردن حدهای بالای جملات رشته  $\varepsilon_2$ ، حد بالای  $\varepsilon_2$  را پیدا کنید (بخش ۱۱-۲-۲-ج از فصل ۱۱). همچنین، حد پایین  $\varepsilon_2$  را که با نگهداشتن فقط جمله اصلی رشته به دست می‌آید، پیدا کنید.

دو حد قبلی با چه دقتی امکان می‌دهند تا مقدار دقیق انتقال  $\Delta E$  را در حالت پایه، تا مرتبه دوم نسبت به  $\mathcal{E}$  محدود کنیم؟

ج) اکنون می‌خواهیم انتقال  $\Delta E$  را با استفاده از روش وردشی محاسبه کنیم. تابع زیر را به‌عنوان یک تابع آزمایشی انتخاب کنید

$$\psi_\alpha(x) \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \left[ 1 + \alpha q \mathcal{E} \left( x - \frac{a}{2} \right) \right]$$

که در آن  $\alpha$  پارامتر وردشی است. این انتخاب توابع آزمایشی را توضیح بدهید.

انرژی متوسط  $\langle H \rangle(\alpha)$  حالت پایه را تا مرتبه دوم نسبت به  $\mathcal{E}$  محاسبه کنید [با این فرض که بسط  $\langle H \rangle(\alpha)$  تا مرتبه دوم  $\mathcal{E}$  کافی باشد]. مقدار بهین  $\alpha$  را تعیین کنید. مقدار  $\Delta E_{\text{var}}$  را، نتیجه حاصل از روش وردشی برای انتقال حالت پایه تا مرتبه دوم نسبت به  $\mathcal{E}$  است، پیدا کنید. با مقایسه  $\Delta E_{\text{var}}$  با نتیجه  $b$ ، دقت روش وردشی را که در این مثال به کار رفت، برآورد کنید. انتگرالهای زیر داده شده‌اند

$$\frac{2}{a} \int_0^a \left(x - \frac{a}{2}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) dx = -\frac{16na}{\pi^2} \frac{1}{(1-4n^2)^2}$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\frac{2}{a} \int_0^a \left(x - \frac{a}{2}\right)^2 \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx = \frac{a^2}{2} \left(\frac{1}{6} - \frac{1}{\pi^2}\right)$$

$$\frac{2}{a} \int_0^a \left(x - \frac{a}{2}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx = -\frac{a}{2\pi}$$

برای کلیه محاسبات عددی،  $\pi^2$  را مساوی ۹٫۸۷ اختیار کنید.

۹. می‌خواهیم انرژی حالت پایه اتم هیدروژن را با روش وردشی محاسبه کنیم، به این ترتیب که توابع با تقارن کروی  $\varphi_\alpha(r)$  را، که وابستگی آنها به  $r$  به صورت زیر است

$$\begin{cases} \varphi_\alpha(r) = C \left(1 - \frac{r}{\alpha}\right) & \text{برای } r \leq \alpha \\ \varphi_\alpha(r) = 0 & \text{برای } r > \alpha \end{cases}$$

به عنوان توابع آزمایشی انتخاب کنیم؛  $C$  ثابت بهنجارش و  $\alpha$  پارامتر وردشی است.

الف) مقدار متوسط انرژی جنبشی و انرژی پتانسیل الکترون در حالت  $\langle \varphi_\alpha \rangle$  را حساب کنید. برای اجتناب از "توابع دلنا" که در  $\Delta\varphi$  ظاهر می‌شوند، مقدار متوسط انرژی جنبشی را برحسب  $\nabla\varphi$  بیان کنید (چون  $\nabla\varphi$  ناپیوسته است).

ب) مقدار بهین  $\alpha$  را پیدا کنید و آن را  $\alpha_0$  بنامید.  $\alpha_0$  را با شعاع بور  $a_0$  مقایسه کنید.

ج) مقدار تقریبی به دست آمده برای انرژی حالت پایه را با مقدار دقیق  $-E_I$  آن مقایسه

کنید.

۱۰. می‌خواهیم روش وردشی را برای تعیین انرژیهای ذره‌ای به جرم  $m$  در چاه پتانسیل نامتناهی زیر، به‌کار ببریم

$$V(x) = 0 \quad -a \leq x \leq a$$

$$V(x) = \infty \quad \text{هر جای دیگر}$$

الف) ابتدا، تابع موج حالت پایه را در فاصله  $[-a, +a]$ ، به‌طور تقریبی مساوی با ساده‌ترین چندجمله‌ای زوجی که در  $x = \pm a$  صفر می‌شود، انتخاب می‌کنیم

$$\psi(x) = a^2 - x^2 \quad -a \leq x \leq a$$

$$\psi(x) = 0 \quad \text{تمام جاهای دیگر}$$

(یک مجموعه وردشی، فقط به یک تابع آزمایشی کاهش یافته است).

مقدار متوسط هامیلتونی  $H$  را در این حالت حساب کنید. نتیجه حاصل را با مقدار واقعی مقایسه کنید.

ب) با انتخاب یک چندجمله‌ای زوج درجه چهار، که در  $x = \pm a$  صفر می‌شود؛ مجموعه توابع آزمایشی را گسترش دهید

$$\psi_\alpha(x) = (a^2 - x^2)(a^2 - \alpha x^2) \quad -a \leq x \leq a$$

$$\psi_\alpha(x) = 0 \quad \text{تمام جاهای دیگر}$$

(مجموعه وردشی‌ای که به پارامتر حقیقی  $\alpha$  بستگی دارد).

۱. نشان دهید که مقدار متوسط  $H$  در حالت  $\psi_\alpha(x)$  برابر است با

$$\langle H \rangle(\alpha) = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{33\alpha^2 - 42\alpha + 105}{2\alpha^2 - 12\alpha + 42}$$

۲. نشان دهید که مقادیری از  $\alpha$  که  $\langle H \rangle(\alpha)$  را مینیموم یا ماکزیموم می‌کنند، ریشه‌های

معادله زیرند

$$13\alpha^2 - 98\alpha + 21 = 0$$

۳. نشان بدهید که یکی از ریشه‌های این معادله، وقتی در  $(\alpha) \langle H \rangle$  گذاشته شود، برای انرژی حالت پایه مقداری به دست می‌دهد که بسیار دقیقتر از انرژی به دست آمده در  $a$  است.
۴. وقتی ریشه دوم معادله به دست آمده در  $b-\beta$  را به کار ببریم، چه ویژه مقدار تقریبی دیگری حاصل می‌شود؟ آیا این می‌توانست قابل انتظار باشد؟ دقت این محاسبه را برآورد کنید.
- ج) توضیح بدهید که چرا ساده‌ترین چندجمله‌ای که تقریب تابع موج اولین حالت برانگیخته را ممکن می‌سازد،  $x(a^2 - x^2)$  است. چه مقدار تقریبی‌ای برای انرژی این حالت به دست می‌آید؟

# پیوست الف

## سری فوریه و تبدیلات فوریه

۱. سری فوریه

الف. توابع تناوبی

ب. بسط یک تابع تناوبی به سری فوریه

ج. رابطه پسل-پارسوال

۲. تبدیلات فوریه

الف. تعاریف

ب. خواص ساده

ج. فرمول پارسوال-پلانشرل

د. مثالها

ه. تبدیلات فوریه در فضای سه بعدی

در این پیوست، چند تعریف، فرمول و خاصیت را که در مکانیک 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 می‌گوئیم 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، بنا بر 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، بنا بر 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:

$$e^{\pm 2i\pi x/L} \quad (۶)$$

که علاوه بر این، به توابع مثلثاتی (۳) که دوره تناوبهای یکسانی دارند، نیز مربوطاند:

$$e^{\pm 2i\pi x/L} = \cos 2\pi \frac{x}{L} \pm i \sin 2\pi \frac{x}{L} \quad (۷)$$

تابع نمایی  $e^{2i\pi x/L}$  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:

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n e^{ik_n x} \quad (۸)$$

که:

$$k_n = n \frac{2\pi}{L} \quad (۹)$$

ضرایب  $c_n$  سری فوریه (۸) از فرمول زیر به دست می آیند:

$$c_n = \frac{1}{L} \int_{x_0}^{x_0+L} dx e^{-ik_n x} f(x) \quad (۱۰)$$

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  $p \neq n$  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  $x_0$  انتخابی 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:

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{1}{L} \int_{x_0}^{x_0+L} dx f(x) \\ a_n &= \frac{2}{L} \int_{x_0}^{x_0+L} dx f(x) \cos k_n x \\ b_n &= \frac{2}{L} \int_{x_0}^{x_0+L} dx f(x) \sin k_n x \end{aligned} \quad (16)$$

اگر  $f(x)$  پاریته معینی داشته باشد. بسط (۱۴) مخصوصاً راحت است، زیرا:

$$b_n = 0 \quad \text{اگر } f(x) \text{ زوج باشد} \quad (17)$$

$$a_n = 0 \quad \text{اگر } f(x) \text{ فرد باشد}$$

به علاوه، اگر  $f(x)$  حقیقی باشد، ضرایب  $a_n$  و  $b_n$  حقیقی اند.

ج. رابطه بسل-پارسوال

با توجه به سری فوریه (۸) به راحتی می‌توان نشان داد که:

$$\frac{1}{L} \int_{x_0}^{x_0+L} dx |f(x)|^2 = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |c_n|^2 \quad (18)$$

این مطلب را می‌توان با استفاده از معادله (۸) نشان داد:

$$\frac{1}{L} \int_{x_0}^{x_0+L} dx |f(x)|^2 = \sum_{n,p} c_p^* c_n \frac{1}{L} \int_{x_0}^{x_0+L} dx e^{i(k_n - k_p)x} \quad (19)$$

نظیر (۱)، انتگرال طرف راست برابر است با  $L\delta_{np}$ ، که رابطه (۱۸) را اثبات می‌کند.

وقتی بسط (۱۴) را به کار می‌بریم، رابطه بسل-پارسوال (۱۸) را می‌توانیم به صورت زیر نیز

بنویسیم:

$$\frac{1}{L} \int_{x_0}^{x_0+L} dx |f(x)|^2 = |a_0|^2 + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} [|a_n|^2 + |b_n|^2] \quad (20)$$

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 برحسب  $(k_{n+1} - k_n)$  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  $k$  جایگزین کنیم.

ب. خواص ساده

روابط (۲۸) و (۲۹) را در نمادگذاری فشرده به صورت زیر بیان می کنیم:

$$\bar{\psi}(p) = \mathcal{F}[\psi(x)] \quad (\text{الف-۳۲})$$

$$\psi(x) = \overline{\mathcal{F}}[\bar{\psi}(p)] \quad (\text{ب-۳۲})$$

خواص زیر را می توان 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 می شود.

$$(II) \quad \bar{\psi}(p) = \mathcal{F}[\psi(x)] \implies \mathcal{F}[\psi(cx)] = \frac{1}{|c|} \bar{\psi}\left(\frac{p}{c}\right) \quad (۳۴)$$

برای پی بردن به این خاصیت، کافی است متغیر انتگرال گیری 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  $\psi$  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:

$$\mathcal{F}[\psi^{(n)}(x)] = \left(\frac{ip}{\hbar}\right)^n \bar{\psi}(p) \quad (\text{الف-۳۸})$$

$$\bar{\psi}^{(n)}(p) = \mathcal{F}\left[\left(-\frac{ix}{\hbar}\right)^n \psi(x)\right] \quad (\text{ب-۳۸})$$

پیمش دو تابع  $\psi_1(x)$  و  $\psi_2(x)$  بنا بر 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  $\psi(x)$  با 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:

$$\{x, y\} \implies \{u = x - y, y\} \quad (۴۲)$$

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 قل‌ای با پهنای  $\Delta x$  باشد، پهنای  $\Delta p$  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 C<sub>III</sub> را ببینید).

ج. فرمول پارسوال-پلانشرل

هنجار یک تابع و تبدیل فوریه آن یکسان است:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x)|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dp |\bar{\psi}(p)|^2 \quad (45)$$

برای اثبات این مطلب، کافی است (۲۸) و (۲۹) را به طریق زیر مورد استفاده قرار دهیم:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x)|^2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{ipx/\hbar} \bar{\psi}(p) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dp \bar{\psi}(p) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{ipx/\hbar} \psi^*(x) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dp \bar{\psi}^*(p) \bar{\psi}(p) \end{aligned} \quad (46)$$

مانند بخش ۱، فرمول پارسوال-پلانشرل را می‌توان به صورت زیر تعمیم داد:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \varphi^*(x) \psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \bar{\varphi}^*(p) \bar{\psi}(p) \quad (47)$$

د. مثالها

مطالعه خود را به سه مثال از تبدیلات فوریه، که برای آنها محاسبات سراسر است. محدود خواهیم ساخت.

(۱) تابع مربعی

$$\left. \begin{aligned} \bar{\psi}(x) &= \frac{1}{a} \quad \text{برای} \quad -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ &= 0 \quad \text{برای} \quad |x| > \frac{a}{2} \end{aligned} \right\} \iff \bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{\sin\left(\frac{pa}{2\hbar}\right)}{\frac{pa}{2\hbar}} \quad (48)$$

(۲) تابع نمایی نزولی

$$\psi(x) = e^{-|x|/a} \iff \bar{\psi}(p) = \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \frac{1/a}{(p^2/\hbar^2) + (1/a^2)} \quad (49)$$

## (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  $\Delta p$  و  $\Delta x$  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 سه‌بعدی

برای توابع موج  $\psi(\mathbf{r})$  که به سه متغیر فضایی  $x$ ،  $y$ ، و  $z$  بستگی دارند. (۲۸) و (۲۹) توسط روابط زیر جایگزین می‌شوند:

$$\bar{\psi}(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \psi(\mathbf{r}) \quad (51\text{-الف})$$

$$\bar{\psi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \bar{\psi}(\mathbf{p}) \quad (51\text{-ب})$$

خواص مذکور در بالا (بخشهای ۲-b و ۲-c در جلد اول فارسی) را می‌توان به آسانی به سه بعد تعمیم داد.

اگر  $\psi$  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 (51-الف)، 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  $\psi$  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 ناورد است. 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:

$$\begin{aligned} \bar{\psi}(p) &= \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^{3/2}} \int d^3 r e^{-ipz/\hbar} \psi(r) \\ &= \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^{3/2}} \int_0^\infty r^2 dr \psi(r) \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin\theta e^{-ipr \cos\theta/\hbar} \\ &= \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^{3/2}} \int_0^\infty r^2 dr \psi(r) 2\pi \frac{\hbar}{pr} \sin \frac{pr}{\hbar} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{2}{p} \int_0^\infty r dr \psi(r) \sin \frac{pr}{\hbar} \end{aligned} \quad (59)$$

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“ $\delta$ ی دیراک

۱. مقدمه: خواص اصلی  
الف. آشنایی با ”تابع“  $\delta$   
ب. توابعی که به  $\delta$  میل می‌کنند  
ج. خواص  $\delta$   
۲. ”تابع“  $\delta$  و تبدیل فوریه  
الف. تبدیل فوریه  $\delta$   
ب. کاربردها  
۳. انتگرال و مشتقات ”تابع“  $\delta$   
الف.  $\delta$  به عنوان مشتق ”تابع پله‌ای واحد“  
ب. مشتقات  $\delta$   
۴. ”تابع“  $\delta$  در فضای سه‌بعدی

تابع  $\delta$ ، 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):

$$\delta^{(\epsilon)}(x) = \frac{1}{\epsilon} \quad \text{برای} \quad -\frac{\epsilon}{2} < x < \frac{\epsilon}{2}$$

$$= 0 \quad \text{برای} \quad |x| > \frac{\epsilon}{2} \quad (1)$$

که ε عددی مثبت است. انتگرال زیر را برآورد می کنیم:

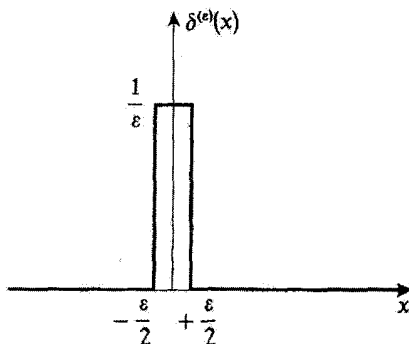
$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta^{(\epsilon)}(x) f(x) \quad (2)$$

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  $f(x)$  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.  $\delta$  دقیقاً به صورت یک توزیع تعریف شده است نه به صورت یک تابع. از نظر فیزیکی، این تمایز اساسی نیست چون به محض اینکه  $\varepsilon$  در مقایسه با تمام فواصل دخیل در یک مسأله 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  $\varepsilon$  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  $\varepsilon$  فوق‌العاده کوچک است ولی دقیقاً صفر نیست.

۲. برای حدود انتگرال‌گیری دلخواه  $a$  و  $b$ ، داریم:

$$\int_a^b dx \delta(x) f(x) = f(0) \quad \text{اگر } 0 \in [a, b]$$

$$= 0 \quad \text{اگر } 0 \notin [a, b] \quad (6)$$

ب. توابعی که به  $\delta$  میل می‌کنند

به آسانی می‌توان نشان داد که، علاوه بر  $\delta^{(\varepsilon)}(x)$  که توسط (۱) تعریف کردیم، توابع زیر نیز، وقتی پارامتر  $\varepsilon$  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 ( $10^{-16} \text{m} = 1$  فرمی) بررسی کنیم.

$$(iv) \quad \frac{1}{\pi} \frac{\sin\left(\frac{x}{\varepsilon}\right)}{x} \quad (10)$$

$$(v) \quad \frac{\varepsilon}{\pi} \frac{\sin^2\left(\frac{x}{\varepsilon}\right)}{x^2} \quad (11)$$

همچنین اتحادی را ذکر می‌کنیم که اغلب در مکانیک کوانتومی (بخصوص در نظریه برخورد)

مفید است:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \mathcal{P} \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x) \quad (12)$$

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:

$$\mathcal{P} \int_{-A}^{+B} \frac{dx}{x} f(x) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left[ \int_{-A}^{-\eta} + \int_{+\eta}^{+B} \right] \frac{dx}{x} f(x); \quad A, B > 0 \quad (13)$$

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:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \mp i \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} = \mp i\pi \delta(x) \quad (15)$$

\* 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  $f_-(x) = [f(x) - f(-x)]/2$  قسمت فرد  $f(x)$  است. این فرمولها به ما اجازه می‌دهند تا واگرایی در مبدأ را به‌طور صریح حذف کنیم.

اما برای قسمت حقیقی، آنرا 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 $\delta$

خواصی را که اکنون بیان خواهیم کرد می‌توان با استفاده از  $(\delta)$  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:

$$\begin{aligned} g(x_j) &= 0 \\ g'(x_j) &\neq 0 \end{aligned} \quad (22)$$

جمع بندی، روی تمام صفرهای ساده  $g(x)$  انجام می گیرد. اگر  $g(x)$  دارای چندین صفر باشد [که، برای آنها  $g'(x_j)$  نیز صفر است]، عبارت  $\delta[g(x)]$  بی معناست.

$$(iii) \quad x\delta(x - x_0) = x_0\delta(x - x_0) \quad (23)$$

و بخصوص:

$$x\delta(x) = 0 \quad (24)$$

عکس آن نیز درست است و می توان 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.

به طور عمومیتر:

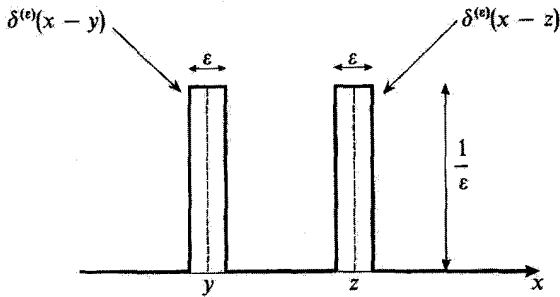
$$g(x)\delta(x - x_0) = g(x_0)\delta(x - x_0) \quad (27)$$

$$(iv) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x - y)\delta(x - z) = \delta(y - z) \quad (28)$$

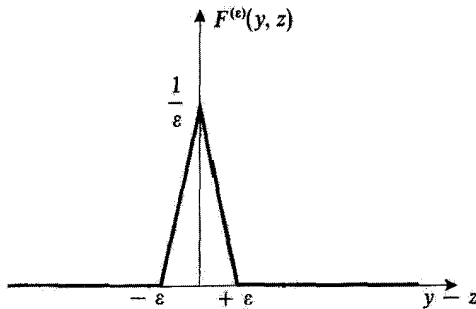
معادله (28) را می توان با بررسی توابع  $\delta^{(\epsilon)}(x)$  مانند تابع نشان داده شده در شکل ۱، درک کرد.

انتگرال:

$$F^{(\epsilon)}(y, z) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta^{(\epsilon)}(x - y)\delta^{(\epsilon)}(x - z) \quad (29)$$



شکل ۲. توابع  $\delta^{(\varepsilon)}(x-y)$  و  $\delta^{(\varepsilon)}(x-z)$ : دو تابع مربعی با پهنای  $\varepsilon$  و ارتفاع  $1/\varepsilon$ ، که به ترتیب در  $x=y$  و  $x=z$  متمرکزند.



شکل ۳. تغییرات حاصلضرب اسکالر  $F^{(\varepsilon)}(y, z)$  دو تابع مربعی نمایش یافته در شکل ۲، نسبت به  $y-z$ . این حاصلضرب وقتی دو تابع همپوشی نکنند ( $|y-z| \geq \varepsilon$ )، صفر و وقتی بر هم منطبق باشند ماکزیمم است. وقتی  $\varepsilon \rightarrow 0$ ،  $F^{(\varepsilon)}(y, z)$  به  $\delta(y-z)$  میل می‌کند.

مادامی که  $|y-z| < \varepsilon$ ، 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  $1/\varepsilon$ . تغییرات  $F^{(\varepsilon)}(y, z)$  نسبت به  $y-z$  بین این مقدار ماکزیمم و صفر، خطی است (شکل ۳). بلافاصله می‌بینیم که وقتی  $\varepsilon \rightarrow 0$ ،  $F^{(\varepsilon)}(y, z)$  به  $\delta(y-z)$  میل می‌کند.

یادداشت:

مجموع توابع  $\delta$ 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" $\delta$ و تبدیل فوریه

الف. تبدیل فوریه  $\delta$

تعریف (۲۸) پیوست I و معادله (۵) ما را قادر می سازند تا مستقیماً تبدیل فوریه  $\bar{\delta}_{x_0}(p)$   $\delta(x - x_0)$  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:

$$\delta(x - x_0) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{ip(x-x_0)/\hbar} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{ik(x-x_0)} \quad (34)$$

این نتیجه را می توان با به کار بردن تابع  $\delta^{(\epsilon)}(x)$  که توسط (۱) تعریف کردیم، یا هر یک از توابع داده شده در بخش ۱-b جلد اول فارسی نیز، به دست آورد. مثلاً رابطه (۲۸) پیوست I ما را قادر می سازد تا بنویسیم:

$$\delta^{(\epsilon)}(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{ipx/\hbar} \frac{\sin\left(\frac{p\epsilon}{2\hbar}\right)}{\frac{p\epsilon}{2\hbar}} \quad (35)$$

اگر  $\epsilon$  را به سمت صفر میل دهیم. یقیناً به رابطه (۳۴) می رسیم.

ب. کاربردها

عبارت (۳۴) برای تابع  $\delta$ ، اغلب اوقات بسیار مناسب است. مثلاً نشان خواهیم داد که این عبارت چگونه یافتن تبدیل فوریه عکس و رابطهٔ بارسوال-پلانشرل [فرمولهای (۲۹) و (۴۵) پیوست I] را ساده می‌کند.

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:

$$|\bar{\psi}(p)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{ipx/\hbar} \psi^*(x) \int_{-\infty}^{+\infty} dx' e^{-ipx'/\hbar} \psi(x') \quad (۳۹)$$

اگر از این عبارت روی  $p$  انتگرال بگیریم، خواهیم داشت:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp |\bar{\psi}(p)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \psi(x') \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{ip(x-x')/\hbar} \quad (۴۰)$$

یعنی، بنابر (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" $\delta$

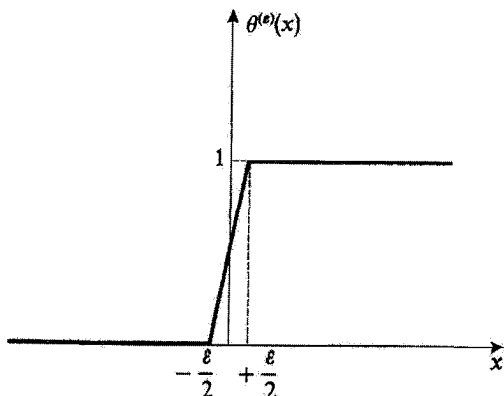
الف.  $\delta$  به عنوان مشتق "تابع پله‌ای واحد" انتگرال زیر را برآورد می‌کنیم:

$$\theta^{(\varepsilon)}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta^{(\varepsilon)}(x') dx' \quad (42)$$

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 بنا بر 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  $\delta(x)$



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.

مشتق  $\theta(x)$  است:

$$\frac{d}{dx}\theta(x) = \delta(x) \quad (۴۴)$$

حال، یک تابع  $g(x)$  را در نظر بگیرید که در  $x = 0$  دارای ناپیوستگی  $\sigma_0$  باشد:

$$\lim_{x \rightarrow 0^+} g(x) - \lim_{x \rightarrow 0^-} g(x) = \sigma_0. \quad (۴۵)$$

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  $\delta$ ، به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} g'(x) &= g'_1(x)\theta(x) + g'_2(x)\theta(-x) + g_1(x)\delta(x) - g_2(x)\delta(-x) \\ &= g'_1(x)\theta(x) + g'_2(x)\theta(-x) + \sigma_0\delta(x) \end{aligned} \quad (۴۶)$$

یعنی، برای یک تابع ناپیوسته، به مشتق معمولی [دو جمله اول (۴۶)]، جمله‌ای متناسب با تابع  $\delta$  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:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \theta(k)e^{ikx} dk = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_0^{\infty} dk e^{ik(x+i\epsilon)} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{i}{x+i\epsilon} = i\mathcal{P}\frac{1}{x} + \pi\delta(x) \quad (۴۷)$$

ب. مشتقهای  $\delta$

با مقایسه با عبارت انتگرال‌گیری جزء به جزء، مشتق تابع  $\delta$ ،  $\delta'(x)$ ، توسط رابطه زیر تعریف

\* البته، اگر تابع در  $x = x_0$  ناپیوسته باشد، جمله اضافی به صورت زیر است:

$$[g_1(x_0) - g_2(x_0)]\delta(x - x_0)$$

می شود\*

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta'(x) f(x) = - \int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x) f'(x) = -f'(0) \quad (48)$$

از این تعریف، بلافاصله داریم:

$$\delta'(-x) = -\delta'(x) \quad (49)$$

و

$$x\delta'(x) = -\delta(x) \quad (50)$$

برعکس، می توان نشان داد که جواب عمومی معادله:

$$xu(x) = \delta(x) \quad (51)$$

را می توان به صورت زیر نوشت:

$$u(x) = -\delta'(x) + c\delta(x) \quad (52)$$

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:

$$\delta'(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \left( \frac{ip}{\hbar} \right) e^{ipx/\hbar} = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} k dk e^{ikx} \quad (53)$$

مشتق مرتبه  $m$ ،  $\delta^{(n)}(x)$ ، را می توان به همین طریق تعریف کرد:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta^{(n)}(x) f(x) = (-1)^n f^{(n)}(0) \quad (54)$$

روابط (۴۹) و (۵۰) را می توانیم به شکلهای زیر تعمیم دهیم:

$$\delta^{(n)}(-x) = (-1)^n \delta^{(n)}(x) \quad (55)$$

\*  $\delta'(x)$  را می توان به عنوان حد مشتق یکی از توابع داده شده در بخش ۱-b، در جلد اول فارسی به ازا  $\epsilon \rightarrow 0$  در نظر گرفت.

$$x\delta^{(n)}(x) = -n\delta^{(n-1)}(x) \quad (۵۶)$$

#### ۴. "تابع" $\delta$ در فضای سه بعدی

"تابع"  $\delta$  در فضای سه بعدی، که آن را به صورت  $\delta(\mathbf{r})$  می نویسیم توسط عبارتی مشابه با (۴) تعریف می شود:

$$\int d^3r \delta(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{0}) \quad (۵۷)$$

و به طور عمومیتر:

$$\int d^3r \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}_0) \quad (۵۸)$$

$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$  را می توان به حاصلضرب سه تابع یک بعدی تجزیه کرد:

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(z - z_0) \quad (۵۹)$$

یا، اگر از مختصات قطبی استفاده کنیم:

$$\begin{aligned} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) &= \frac{1}{r^2 \sin \theta} \delta(r - r_0) \delta(\theta - \theta_0) \delta(\varphi - \varphi_0) \\ &= \frac{1}{r^2} \delta(r - r_0) \delta(\cos \theta - \cos \theta_0) \delta(\varphi - \varphi_0) \end{aligned} \quad (۶۰)$$

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:

$$\Delta \left( \frac{1}{r} \right) = -4\pi \delta(\mathbf{r}) \quad (۶۱)$$

که در آن  $\Delta$ ، عملگر لاپلاسی است.

اگر به خاطر آوریم که در الکتروستاتیک، بار الکتریکی نقطه ای  $q$  واقع در مبدأ را می توان توسط یک چگالی حجمی  $\rho(\mathbf{r})$  به صورت

$$\rho(\mathbf{r}) = q\delta(\mathbf{r}) \quad (۶۲)$$

توصیف کرد، معادله (۶۱) را می‌توان به آسانی فهمید می‌دانیم 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 تکینه 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  $S_\epsilon$ ، به مرکز  $O$  و شعاع  $\epsilon$ ، 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 به‌ازاء  $\epsilon \rightarrow 0$ ، پیدا می‌کنیم. بنابر (۶۵)، این انتگرال می‌تواند فقط سهمهایی از داخل کره  $S_\epsilon$  دریافت دارد، و:

$$I(\epsilon) = \int_{r \leq \epsilon} d^3r f(\mathbf{r}) \Delta g_\epsilon(\mathbf{r}) \quad (67)$$

$\epsilon$  را آن قدر کوچک انتخاب می‌کنیم که تغییرات  $f(\mathbf{r})$  در داخل  $S_\epsilon$  ناچیز باشد. در این صورت:

$$I(\epsilon) \simeq f(\mathbf{0}) \int_{r \leq \epsilon} d^3r \Delta g_\epsilon(\mathbf{r}) \quad (68)$$

با تبدیل انتگرالی که به این ترتیب به دست می‌آید، به انتگرالی روی سطح  $S_\epsilon$  کره  $S_\epsilon$ ، به دست می‌آوریم:

$$I(\epsilon) \simeq f(\mathbf{0}) \int_{S_\epsilon} \nabla g_\epsilon(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{n} \quad (69)$$

حال، چون  $g_\varepsilon(\mathbf{r})$  روی سطح  $\mathcal{S}_\varepsilon$  پیوسته است، داریم:

$$[\nabla g_\varepsilon(\mathbf{r})]_{r=\varepsilon} = \left[ -\frac{1}{r^2} \right]_{r=\varepsilon} \mathbf{e}_r = -\frac{1}{\varepsilon^2} \mathbf{e}_r \quad (70)$$

(که بردار یکه  $\mathbf{e}_r/r$  است). از اینجا حاصل می‌شود:

$$\begin{aligned} I(\varepsilon) &\simeq f(\circ) \times 4\pi\varepsilon^2 \times \left[ -\frac{1}{\varepsilon^2} \right] \\ &\simeq -4\pi f(\circ) \end{aligned} \quad (71)$$

یعنی:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int d^3r \Delta g_\varepsilon(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) = -4\pi f(\circ) \quad (72)$$

مطابق تعریف (57)، این رابطه، همان (61) است.

معادله (61) را می‌توان، به‌عنوان مثال، برای به‌دست آوردن عبارتی که در نظریه 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

$$\begin{aligned} \nabla(e^{\pm ikr}) &= \pm ik e^{\pm ikr} \mathbf{r}/r \\ \Delta(e^{\pm ikr}) &= -k^2 e^{\pm ikr} \pm \frac{2ik}{r} e^{\pm ikr} \end{aligned} \quad (75)$$

بنابراین، نهایتاً، بر طبق (27)، خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} (\Delta + k^2) \frac{e^{\pm ikr}}{r} &= \left[ -\frac{k^2}{r} \pm \frac{2ik}{r^2} - 4\pi \delta(\mathbf{r}) - \frac{2}{r^2} \times (\pm ik) + \frac{k^2}{r} \right] e^{\pm ikr} \\ &= -4\pi e^{\pm ikr} \delta(\mathbf{r}) \\ &= -4\pi \delta(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (76)$$



به علاوه، معادله (۶۱) را می توان تعمیم داد: لاپلاسی تابع  $Y_l^m(\theta, \varphi)/r^{l+1}$  شامل مشتقهای مرتبه  $l$ ام  $\delta(\mathbf{r})$  است. مثلاً  $\cos\theta/r^2$  را در نظر بگیرید. می دانیم 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  $a$  فاصله بین آنها باشد، مدول  $D$ ی گشتاور دوقطبی برابر حاصلضرب  $qa$  خواهد بود و چگالی بار مربوط را می توان به صورت زیر نوشت:

$$\rho(\mathbf{r}) = q\delta\left(\mathbf{r} - \frac{q}{r}\mathbf{e}_z\right) - q\delta\left(\mathbf{r} + \frac{a}{r}\mathbf{e}_z\right) \quad (۷۷)$$

(که در آن  $\mathbf{e}_z$  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، می شود:

$$\rho(\mathbf{r}) \xrightarrow{a \rightarrow 0} D \frac{\partial}{\partial z} \delta(\mathbf{r}) \quad (۷۸)$$

از این رو، در حدی که  $a \rightarrow 0$ ، معادله پواسن (۶۴)، می دهد:

$$\Delta\left(\frac{\cos\theta}{r^2}\right) = -4\pi \frac{\partial}{\partial z} \delta(\mathbf{r}) \quad (۷۹)$$

البته، این فرمول را می توانیم، به همان طریقی که (۶۱) را توجیه کردیم، توجیه، یا توسط نظریه توزیع، ثابت کنیم. استدلال مشابهی را می توانیم 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 می دهد، (مکمل  $E_{1x}$ )، به کار ببریم.

مراجع و پیشنهادات برای مطالعه بیشتر

مرجمهای 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 همیوگ مختصات
  - ب. معادلات بندادی هامیلتون-ژاکوبی
۴. مثالهایی از کاربرد صورتبندی هامیلتونی
  - الف. ذره در یک 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 لاگراژ به عنوان نتیجه‌ای از اصل کمترین کنش

در اینجا تعریف و خواص اصلی لاگراژی 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 کوانتشی (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 ذره نقطه‌ای

مکانیک کلاسیک غیرنسبیتی بر این فرضیه مبتنی است که لااقل یک چارچوب هندسی به نام چارچوب گالیله‌ای یا لختی وجود دارد که قانون زیر در آن معتبر است:

قانون اساسی دینامیک: یک ذره نقطه‌ای همیشه دارای شتابی برابر  $\gamma$  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.

به‌سهولت می‌توان نشان داد که اگر یک چارچوب گالیله‌ای وجود داشته باشد، تمام چارچوبهایی که نسبت به آن حرکت انتقالی یکنواخت دارند، نیز چارچوبهای گالیله‌ای‌اند. این مطلب به اصل نسبیت گالیله‌ای 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 نسبییتی 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  $\nabla$  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؛ بنابراین تعریف:

$$\dot{u} = \frac{du}{dt}, \ddot{u} = \frac{d^2u}{dt^2}, \dots$$

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 درگشتاور 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:

$$\sum_{i=1}^n m_i \dot{\mathbf{r}}_i \quad (12)$$

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:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\mathbf{r}_i, \dot{\mathbf{r}}_i) &= T - V \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2 - V(\mathbf{r}_i) \end{aligned} \quad (13)$$

بی‌درنگ می‌توان نشان داد که معادلات حرکت (۵)، با معادلات لاگرانژ یکسان‌اند:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_i} &= 0 \\ \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{y}_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y_i} &= 0 \\ \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{z}_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial z_i} &= 0 \end{aligned} \quad (14)$$

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 شکل اند. علاوه بر این، این معادلات را می توان در مورد سیستمهایی که کلی تر از سیستمهای ذرات هستند، به کار برد. بسیاری از سیستمهای فیزیکی (از جمله، به عنوان مثال، یک یا چند جسم جامد) را می توان در یک لحظه معین  $t$  توسط مجموعه ای از  $N$  پارامتر مستقل  $q_i (i = 1, 2, \dots, N)$ ، به نام مختصات تعمیم یافته توصیف کرد. با دانستن  $q_i$  مکان هر نقطه از سیستم را در فضا می توان محاسبه کرد. از این رو با معین کردن  $N$  تابع نسبت به زمان  $q_i(t)$ ، حرکت این سیستم مشخص می شود. مشتقهای زمانی  $\dot{q}_i(t)$ ، سرعتهای تعمیم یافته نامیده می شوند. بنابراین، حالت سیستم در یک لحظه معین  $t_0$  توسط مجموعه  $q_i(t_0)$  و  $\dot{q}_i(t_0)$  تعریف می شود. 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  $V$ . می توان نشان داد که معادلات حرکت، برای هر مختصات انتخابی  $q_i$ ، همواره به صورت زیر نوشته می شود:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = 0 \quad (15)$$

که  $d/dt$  معرف مشتق کامل نسبت به زمان است

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^n \dot{q}_i \frac{\partial}{\partial q_i} + \sum_{i=1}^N \ddot{q}_i \frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} \quad (16)$$

معذک 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 می تواند 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 پیش می آید 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 همیوگ مختصات

تکانه همیوگ  $p_i$  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 همیوگ متغیرهای مکانی  $\Gamma_i(x_i, y_i, z_i)$  [رابطه (۱۳)]، همان تکانه‌های مکانیکی‌اند:

$$p_i = m_i \dot{x}_i \quad (19)$$

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 برمی گردد 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:

$$\mathcal{H}(q_i, p_i; t) \quad (22)$$

دیرانسیل 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:

$$\begin{aligned} d\mathcal{H} &= \sum_i [p_i d\dot{q}_i + \dot{q}_i dp_i] - \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} dq_i - \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt \\ &= \sum_i \dot{q}_i dp_i - \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} dp_i - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt \end{aligned} \quad (24)$$

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 (۲۵-الف)، 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 (۲۵-ب) 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 بندادی 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:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_{i=1}^n \mathbf{p}_i \cdot \dot{\mathbf{r}}_i - \mathcal{L} \\ &= \sum_{i=1}^n \mathbf{p}_i \cdot \dot{\mathbf{r}}_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2 + V(\mathbf{r}_i) \end{aligned} \quad (۲۸)$$

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 پندادی:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} &= \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} \\ \frac{d\mathbf{p}_i}{dt} &= -\nabla_i V \end{aligned} \quad (30)$$

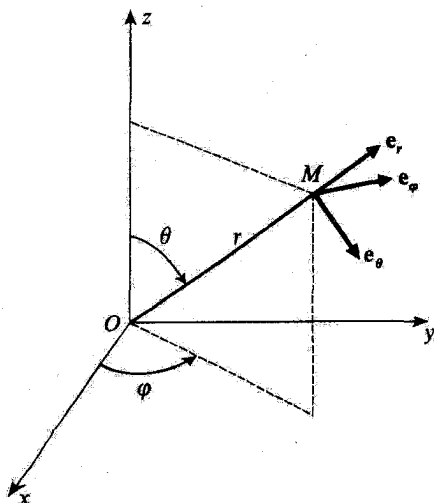
با معادلات نیوتون (۳) هم‌ارزند.

#### ۴. مثالهایی از کاربرد صورتبندی هامیلتونی

الف. ذره در یک 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  $(r, \theta, \varphi)$ ، 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  $e_r, e_\theta, e_\varphi$  محورهای موضعی وابسته به نقطه  $M$ ، که  $M$  با مختصات کروی  $(r, \theta, \varphi)$  آن مشخص می‌شود.

به طوری که لاگرانژی (۱۳)، را می توان به صورت زیر نوشت:

$$\mathcal{L}(r, \theta, \varphi; \dot{r}, \dot{\theta}, \dot{\varphi}) = \frac{1}{2} m [\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2 + r^2 \sin^2 \theta \dot{\varphi}^2] - V(r) \quad (۳۲)$$

به این ترتیب، تکانه های همیوگ سه متغیر  $r, \theta, \varphi$  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  $r, \theta, \varphi$  و  $p_r, p_\theta, p_\varphi$  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:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_r &= 0 \\ \mathcal{L}_\theta &= -mr v_\varphi = -mr^2 \sin \theta \dot{\varphi} = -\frac{p_\varphi}{\sin \theta} \\ \mathcal{L}_\varphi &= mr v_\theta = mr^2 \dot{\theta} = p_\theta \end{aligned} \quad (37)$$

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  $\mathcal{L}_0$  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

$$V_{\text{مؤثر}}(r) = V(r) + \frac{\mathcal{L}_0^2}{2mr^2} \quad (40)$$

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 محورهای ثابت  $Oz$ ،  $Ox$ ،  $Oy$  به دست آورد.

ب. ذرهٔ 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.

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (۴۱-الف)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (۴۱-ب)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (۴۱-ج)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j} + \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (۴۱-د)$$

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 معادلهٔ (۴۱-ج) حاکی از آن است که یک میدان برداری وجود دارد که:

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (۴۲)$$

لذا (۴۱-ب) 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 آن‌را پیمانه توصیف میدان الکترومغناطیسی، می‌نامیم. میدانهای الکتریکی و مغناطیسی را می‌توان از پیمانه  $\{\mathbf{A}, U\}$ ، توسط

روابط زیر محاسبه کرد:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (۴۵-الف)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla U(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (۴۵-ب)$$

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، به این 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:

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \nabla \chi(\mathbf{r}, t) \quad (۴۶-الف)$$

$$U'(\mathbf{r}, t) = U(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \chi(\mathbf{r}, t) \quad (۴۶-ب)$$

که  $\chi(\mathbf{r}, t)$  یک تابع اسکالر دلخواه است.

قبل از هر چیز، می‌توان به آسانی 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 بنا به 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  $\mathbf{A}' - \mathbf{A}$ ، گزاردیان 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 به دست 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 به دست 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 به صورت 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 به طور 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:

$$m\ddot{x} = q \left[ -\frac{\partial U}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial t} + \dot{y} \left( \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) - \dot{z} \left( \frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) \right] \quad (62)$$

### ۳. تکانه هامیلتونی کلاسیک

لاگرانژی (۵۸) 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 HIII 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 JIII 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. به طور کلیتر، سیستمی فیزیکی را مطالعه می‌کنیم که با  $N$  مختصه تعمیم‌یافته  $q_i$  توصیف می‌شود (برای یک سیستم  $n$  ذره‌ای در فضای سه‌بعدی،  $N = 3n$ ). بهتر است که  $q_i$ ها را به عنوان مختصات نقطه‌ای مانند  $Q$  در فضای اقلیدسی  $N$  بعدی،  $R_N$ ، تعبیر کنیم. در این صورت، بین مواضع سیستم و نقاط  $R_N$  تناظری یک به یک وجود دارد. با هر حرکت سیستم، یک حرکت از نقطه  $Q$  در  $R_N$  وابسته است، که با تابع برداری  $N$  بعدی  $Q(t)$  که مؤلفه‌های آن  $q_i(t)$  هستند، مشخص می‌شود. مانند مورد ساده‌ی یک ذره منفرد که در یک بعد حرکت می‌کند، حرکت نقطه  $Q$ ، 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. بیان اصل کمترین کنش

$q_i(t)$  را می‌توان به دلخواه مشخص کرد؛ به این ترتیب، نقطه  $Q$  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 به طور 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.

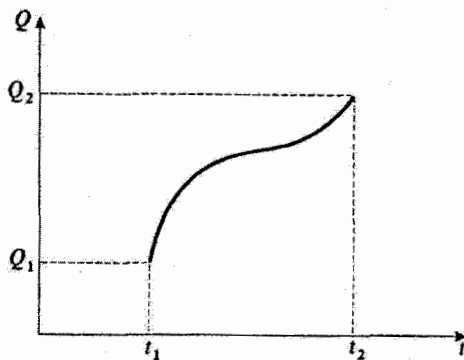
مسیر  $\Gamma$  را در جایگاه در نظر بگیرید، و فرض کنید که این مسیر توسط تابع برداری  $Q(t)$  که در (۶۷) صدق می‌کند، مشخص می‌شود، اگر:

$$\mathcal{L}(q_1, q_2, \dots, q_N; \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_N; t) \equiv \mathcal{L}(Q, \dot{Q}; t) \quad (68)$$

لاگرائزی سیستم باشد، کنش  $S_\Gamma$  که با مسیر  $\Gamma$  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، با استثناء منحنیهایی که «به عقب برمی‌گردند» یعنی، آنهایی که بازاء یک زمان معین  $t$ ، دو نقطه متمایز  $Q$  را می‌دهند.



شکل ۲. مسیر وابسته به یک حرکت مفروض از سیستم فیزیکی در جلگاه. محور  $t$ ها معرف زمان و "محور  $Q$ ها" 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 نتیجه ای 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 واصل نقاط  $(Q_1, t_1)$  و  $(Q_2, t_2)$  در فضا-زمان  $F$  مشخص شده باشد. حال یک مسیر دیگر  $F'$  را در نظر بگیرید که بینهایت به آن نزدیک است (شکل ۳)، و مختصات تعمیم یافته آن عبارت اند از:

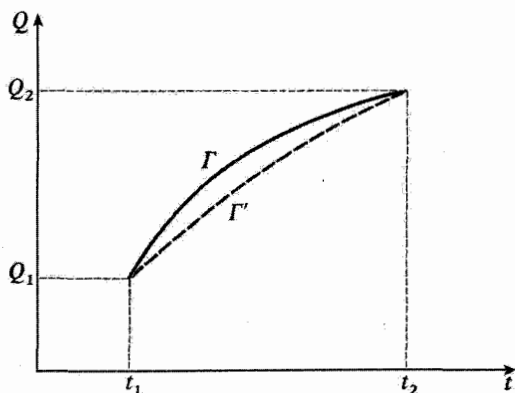
$$\dot{q}'_i(t) = \dot{q}_i(t) + \delta q_i(t) \quad (70)$$

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  $F'$  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 خط‌پر مسیر وابسته به حرکت واقعی سیستم، و منحنی خط‌چین یک مسیر دیگر بینهایت نزدیک به آن است.

بنابراین، نمو‌های  $\delta \dot{q}_i(t)$  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  $\Gamma$  به مسیر  $\Gamma'$  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، به‌خاطر شرایط (۷۱)، جمله انتگرال گرفته‌شده صفر است.

اگر  $\Gamma$  مسیری در فضا-زمان باشد که عملاً در خلال حرکت واقعی سیستم طی می‌شود، بنابر اصل کمترین کنش، نمو کنش،  $\delta S$ ، صفر است. بدین‌منظور، 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  $i$ ، غیر صفر می‌بود،  $\delta q_i(t)$  را می‌توانستیم طوری انتخاب کنیم که نمود  $\delta S$  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:

Feynman II(7.2), chap. 19.

برای صورتبندی لاگرانژی که به یک میدان کلاسیک اعمال شده است به مأخذ زیر مراجعه کنید:

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 Particules*, 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. WITTKÉ, *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).



- (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).

## متفرقه

- (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. GOLDBABER, "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 فوتوالکترونیکی؛ 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).

متغیرهای مخفی و "پارادوکسها":

- (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. 1: 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. 1: 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. 1: 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*, 2<sup>nd</sup> ed. Wiley, New York (1975).
- (7.6) W. K. H. PANOFKY 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<sup>e</sup> 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<sup>e</sup> 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، به‌ویژه 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. LIDTHILL, *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).

### نظریهٔ 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 مقدمهٔ کوتاهی در مورد گروههای پیوسته در فیزیک دارد ببینید.  
ریاضی‌تر

- (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. PONTRYAGIN, *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. BADI, *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. WOOTEEN 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 VOË, P. M. MC INTYRE, A. MAGNON, D. Y. STOWELL, R. A. SWANSON and V. L. TELEGDI, "Measurement of the muonium Hfs Splitting and of the muon moment by double resonance, and new value of  $\alpha$ ", *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).

همچنین 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*, 3<sup>rd</sup> 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-TANNOUDJI 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 می دهد و دسته بندی می کند:

- (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).

## نمایه

- اتصال بی دررو ۴۳، ۲۰  
 اتمهای میونی ۳۲۰  
 اثر تونل ۳۳۵  
 اثر زیمان در تراز چندتابی اختیاری ۲۰۴، ۹۱  
 اختلال مانا ۲۵۳  
 ارتعاشات مولکولها ۲۸۳  
 اسپین ۸۷  
 ~ الکترون ۸۷  
 توصیف کوانتوم مکانیکی ~ ۹۲  
 سیستمی از دو ذره با  $\frac{1}{3}$  ۱۵۵، ۱۴۸، ۱۳۴  
 ۲۴۵  
 اسپینور دو مؤلفه‌ای ۱۱۶، ۹۹  
 اصل ۴۴۷  
 امواج تخت ۶۳، ۳۳  
 امواج کروری آزاد ۵۳، ۴۵، ۳۱  
 انتگرال روی هم‌افتادگی ۳۵۸  
 انتگرالهای کولنی ۳۵۷  
 اوربیتالها(ی)  
 ترکیب خطی ~ اتمی ۳۵۶، ۳۲۷  
 ~ مولکولی ۳۷۰، ۳۶۴
- ~ هیبرید ۳۶۹  
 بازتاب براگ ۳۴۹  
 برخوردها ۹  
 ~ با جذب ۶۸  
 پارامتر ~ ۸۲، ۳۷  
 برهم‌کنش تانسوری ۲۸۹  
 برهم‌کنش دوقطبی - دوقطبی بین دو گشتاور مغناطیسی  
 ۳۰۴  
 بسته موجهای الکترون در یک جامد ۳۴۷  
 پارادوکس اینشتن - بودولسکی - روزن ۲۴۲  
 پارامتر برخورد ۷۲، ۳۷  
 پاؤلی  
 ماتریس ~ ۹۶  
 نظریه ~ ۹۲  
 هامیلتونی ~ ۱۱۹  
 پایستگی تکانه زاویه‌ای ۱۲۹  
 پتانسیل(ها)  
 ~ اسکالر و برداری ۴۴۲  
 ~ تناوبی ۳۳۸



- ~ مرکزی ۳۱  
 پراکندگی توسط ~ ۳۱  
 ~ و میدانهای الکترومغناطیسی ۴۴۴  
 ~ یوکاوا ۷۶  
 پراکندگی  
 ~ اسپین  $\frac{1}{2}$  ذره ۲۴۵، ۲۳۸  
 تشدید ~ ۸۴، ۴۸  
 ~ توسط پتانسیل ۷  
 ~ مرکزی ۳۱  
 ~ توسط یک کره سخت ۸۳، ۸۰  
 حالت‌های مانای ~ ۴۴، ۱۴  
 دامنه ~ ۴۷، ۱۶  
 ~ در سایه ۷۰  
 سطح مقطع ~ ۴۷، ۲۲، ۱۱  
 ~ کره سخت ۸۳، ۸۰  
 ~ کشسان ۱۰  
 معادله انتگرالی ~ ۲۴  
 پیوند شیمیایی ۳۵۰  
 ~ مولکولها ۳۷۶، ۳۵۰  
 تابع  
 ~ پله‌ای ۴۲۴  
 ~ هویساید ۴۲۳  
 ~ دلتای دیراک ۴۱۴  
 تراز چندتابی در میدان مغناطیسی ۲۰۴  
 ترکیب خطی اوربیتالهای اتمی (LCAO) ۳۵۶، ۳۲۷  
 تشدید  
 انتگرال ~ ۳۵۷  
 ~ پراکندگی ۸۴، ۴۸  
 ~ کوانتومی ۳۶۱، ۳۱۱  
 ~ مغناطیسی ۳۹۶، ۲۹۷، ۲۹۲  
 تصویرگر ۲۴۶  
 تقریب بورن - اینهایمر ۳۳۴  
 تکانه  
 ~ تعمیم یافته ۴۳۶  
 ~ مکانیکی ۴۴۶، ۴۳۶  
 ~ همیوگ ۳۳۷  
 تکانه زاویه‌ای  
 بایستگی ~ ۱۲۹  
 جفت‌شدگی ~ ۲۲۵، ۱۲۹  
 جمع ~ ۲۵۰، ۲۴۶، ۱۶۶، ۱۲۷  
 ~ کلاسیک ۴۳۶  
 توابع  
 ~ بلوخ ۳۴۲  
 ~ تناوبی ۴۰۲  
 ~ کروی بسل ۶۱، ۶۰، ۵۹، ۳۵  
 ~ کروی نریمان ۶۳  
 جریان در یک آزمایش پراکندگی ۲۱  
 جفت‌شدگی تکانه‌های زاویه‌ای ۲۲۵، ۱۲۹  
 جمع تکانه‌های زاویه‌ای ۲۵۰، ۲۴۶، ۱۹۶، ۱۲۷  
 جمع همبستگیهای کروی ۱۸۶  
 چاه کروی مربعی ۸۳  
 حالت(های)  
 ~ یاد پیوندی مولکولی ۳۶۲  
 ~ پیوندی مولکولی ۳۶۲  
 ~ سه‌تابی ۱۴۰  
 دامنه پراکندگی ۴۷، ۱۶  
 دستگاه مختصات قطبی ۳۵۲  
 دوران‌کننده (صلب) ۳۹۲  
 دوتریوم ۲۴۴  
 ذره آزاد در حالت‌های مانای با تکانه خوش تعریف ۳۲  
 ذره آزاد در حالت‌های مانای با تکانه زاویه‌ای خوش تعریف  
 ۵۱، ۳۹، ۳۱  
 رابطه بسل - پارسوال ۴۰۲  
 روش وردشی ۴۰۰، ۳۹۹، ۳۵۱، ۳۴۰، ۳۲۳  
 ساختار ریز خطوط طیفی ۹۰  
 سرعت

گشتاور(های)

- ~ دوقطبی الکتریکی ۲۱۲
- ~ دوقطبی مغناطیسی ۲۱۸
- ~ چندقطبی ۲۴۹، ۲۰۸
- ~ لاپلاسی  $\frac{1}{r}$  ۴۲۷
- ~ لاپلاسی  $Y_l^m(\theta, \varphi)r^{l+3}$  ۴۲۹
- ~ لاگرانژی ۴۳۸
- ~ یک ذره در یک میدان الکترومغناطیسی ۴۲
- ~ محدودیت یک عملگر ۲۶۸
- ~ مرکز جرم ۴۳۵
- ~ مسیر (فضا - زمان) ۴۴۹
- ~ معادلات
- ~ بنادای ۴۳۹
- ~ لاگرانژ ۴۳۸، ۴۵۰
- ~ هامیلتونی - ژاکوبی ۴۳۸
- ~ منطقه بریلوئن ۳۴۲
- ~ مولکول اتان ۳۹۳
- ~ مؤلفه‌های یک عملگر برداری متعارف ۲۴۸
- ~ تیروهای وان در والسی ۳۰۰
- ~ واگنی
- ~ اصلی (یا سیستماتیک) ۲۰۴
- ~ برطرف کردن ~ به وسیله اختلال ۲۵۷
- ~ دورانی ۲۴
- ~ هامیلتونی ۴۳۹
- ~ یک ذره در یک پتانسیل برداری ۴۴۲
- ~ یک ذره در یک پتانسیل مرکزی ۴۴۱
- ~ هسته
- ~ اسپین ۲۲۳
- ~ گشتاورهای چندقطبی ۲۲۳
- ~ همبستگی بین دو سیستم ۳۰۸، ۲۴۱
- ~  $H_1^+$  (یون مولکولی) ۳۵۰

~ گروه ۳۴۸

- ~ تعمیم یافته ۴۴۸
- ~ سری فوریه و تبدیلات فوریه ۴۰۲
- ~ سطح مقطع
- ~ پراکنندگی ۷۰، ۴۷، ۲۲، ۱۱
- ~ جذب ۷۱
- ~ کل ۷۴
- ~ کشسان ۱۲، ۷۰
- ~ سیستم هیدروژن مانند ۳۱۹
- ~ ضرایب کلیش گوردن ۱۷۵، ۱۶۱
- ~ ضرب پیچشی ۴۱۰
- ~ عملگر
- ~ برداری ۲۴۸، ۱۹۳
- ~ تانسوری ۲۴۹، ۲۴۸
- ~ دوران ۱۰۹
- ~ فرمول
- ~ پارسوال - پلانشریل ۴۲۳، ۴۱۱
- ~ رادر فوردر ۷۹
- ~ فضای حالت مداری ۹۲
- ~ قسمت اصلی کوشی ۴۱۷
- ~ قضیه
- ~ بلوخ ۳۴۴
- ~ ریتز ۳۲۵
- ~ نوری ۷۴
- ~ ویربال ۳۷۷
- ~ هلن - فاینمن ۳۷۹
- ~ قواعد گزینش برای گشتاورهای چندقطبی ۲۴۸، ۲۲۱
- ~ کروی
- ~ امواج ~ آزاد ۶۳، ۵۳، ۳۵، ۳۱
- ~ توابع بسل ~ ۶۱، ۶۰، ۵۹، ۳۵
- ~ توابع ~ نیومن ۶۳
- ~ کشش ۴۵۰