

مکانیک کوانتومی

جلد چهارم

کلود کوهن - تانوجی

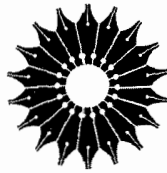
برنارد دیو

فرانک لالوئه

ترجمه

محمد فرهاد رحیمی

محسن سریش‌ای



مکانیک کوانتومی

جلد چهارم

کلود کوهن - تانوجی، برنارد دیو، فرانک لالوئه

ترجمه

محمد فرهاد رحیمی، محسن سرپیشه‌ای

مرکز نشر دانشگاهی

بسم الله الرحمن الرحيم

فهرست

صفحه	عنوان
۱	پیشگفتار
۲	راهنمای استفاده از کتاب
۳	مقدمه
۷	۱۲ یک کاربرد نظریه اختلال: ساختار ریز و فوق ریز اتم هیدروژن
۸	فهرست مطالب فصل ۱۲
۱۰	۱-۱۲ مقدمه
۱۱	۲-۱۲ جملات اضافی در هامیلتونی
۱۹	۳-۱۲ ساختار ریزتراز $n = 2$
۲۸	۴-۱۲ ساختار فوق ریزتراز $n = 1$
۳۵	۵-۱۲ اثر زیمان ساختار فوق ریز حالت پایه $1s$
۵۲	مکملهای فصل ۱۲
۵۳	مکمل ۱ هامیلتونی فوق ریز مغناطیسی
۶۵	مکمل ۲ محاسبه مقادیر متوسط هامیلتونی ساختار ریز در حالت‌های $1s$ ، $2s$ و $2p$
۷۱	مکمل ۳ ساختار فوق ریز و اثر زیمان برای میونیوم و پوزیترونیوم

۸۱	مکمل ۴ تأثیر اسپین الکترونی بر اثر زیمان خط تشدید هیدروژن
۹۲	مکمل ۵ اثر اشتراک برای اتم هیدروژن
۹۷	۱۳ روشهای تقریبی برای مسائل وابسته به زمان
۹۸	فهرست مطالب فصل ۱۳
۹۹	۱-۱۳ بیان مسئله
۱۰۱	۲-۱۳ حل تقریبی معادله شرودینگر
۱۰۶	۳-۱۳ یک مورد خاص و مهم: اختلال سینوسی یا ثابت
۱۲۱	مکملهای فصل ۱۳
۱۲۳	مکمل ۱ برهم‌کنش یک اتم با یک موج الکترومغناطیسی
۱۴۶	مکمل ۲ پاسخ خطی و غیرخطی یک سیستم دوترازی به یک اختلال سینوسی
	مکمل ۳ نوسانهای یک سیستم بین دو حالت گسسته تحت تأثیر یک اختلال
۱۶۷	تشدید
	مکمل ۴ واپاشی یک حالت گسسته که به‌طور تشدیدی به پیوستاری از حالت‌های
۱۷۲	نهایی جفت شده است
۱۸۸	مکمل ۵ تمرینات
۲۰۳	۱۴ سیستمهای ذرات یکسان
۲۰۴	فهرست مطالب فصل ۱۴
۲۰۵	۱-۱۴ بیان مسئله
۲۱۳	۲-۱۴ عملگرهای جایگشت
۲۲۵	۳-۱۴ اصل موضوع مقارن‌سازی
۲۳۸	۴-۱۴ بحث فیزیکی
۲۵۴	مکملهای فصل ۱۴
۲۵۵	مکمل ۱ اتمهای چندالکترونی. پیکربندیهای الکترون
۲۶۴	مکمل ۲ ترازهای انرژی اتم هلیم: پیکربندیها، جملات، چندتابیها
۲۸۳	مکمل ۳ خواص فیزیکی یک گاز الکترون. کاربرد در جامدات
۳۰۱	مکمل ۴ تمرینات

۳۱۳	پیوست الف سری فوریه و تبدیلات فوریه
۳۲۵	پیوست ب "تابع" دی دیراک
۳۴۱	پیوست ج لاگرانژی و هامیلتونی در مکانیک کلاسیک
۳۶۲	کتابنامه
۳۷۹	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. به‌عنوان مثال، برای یک درس مکانیک کوانتومی مقدماتی، ما استفاده از مهمترین فصلها را همراه با ساده‌ترین مکملهای آنها توصیه می‌کنیم. برای یک درس پیشرفته‌تر، می‌توان فصلهای باقیمانده و مکملهای مشکلتر را مطالعه کرد. امید است که بعضی از مکملهای پیشرفته‌تر برای دانشجویانی که پس از مطالعهٔ این درس به موضوعات تحقیقاتی جدید در زمینه‌های مختلف فیزیک می‌پردازند مفید باشد.

ک. کوهن-تانوجی

ب. دیو

ف. لالوته

راهنمای استفاده از کتاب

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

مکملها متفاوت اند: برخی به منظور بررسی گسترده تر مطالب فصل یا بحث مفصلتر پیرامون بعضی نکات آمده اند؛ بعضی دیگر به توصیف مثالهای مشخصی می پردازند یا مفاهیم فیزیکی گوناگونی را مطرح می کنند. معمولاً آخرین مکمل هر فصل مجموعه ای از تمرینهاست. سطح مطالب مکملها نیز متفاوت است. برخی از آنها مثالهای خیلی ساده یا ادامه مطالب فصل اند، بعضی مشکلترند (و در مواردی در سطحی بالاتر از مطالب دوره لیسانس ارائه شده اند)؛ به هر حال، خواننده باید پیش از استفاده از مکملها، مطالب هر فصل را خوانده باشد. دانشجو نباید الزاماً تمام مکملهای یک فصل را در دور اول بخواند. بلکه باید بتابه 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 برچسب زده می شود که عدد فصل متناظر را می دهد (برای مثال، مکملهای فصل پنجم (V) به ترتیب عبارتند از AV، BV، CV، و ...). مکملها سریعاً توسط نماد • که در سر هر کدام از صفحاتش ظاهر می شود، مشخص می گردند.

مقدمه

ساختار و سطح کتاب

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

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

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

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

را در چند سال گذشته به عهده داشته‌ایم. جز در تعداد کمی از مکملها، ما از این حد تجاوز نکرده‌ایم. علاوه بر این، سعی کرده‌ایم که مشکلات دانشجویان را در ادراک و جذب مکانیک کوانتومی، و نیز پرسشهای آنان را در نظر بگیریم. البته، امیدواریم که این کتاب برای سایر خوانندگان، نظیر دانشجویان دوره فوق‌لیسانس، 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 شبهتهای ساده اپتیکی استفاده کرده‌ایم، با یک روش سیستماتیک ابتدا ابرار 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 نودهایی از مکانیک کوانتومی را با ارائه مثالهای متعددی در زمینه‌های متفاوت مانند فیزیک اتمی، فیزیک مولکولی، و فیزیک حالت جامد به دست بدهیم. در این مثالها عمدتاً به جنبه‌های کوانتومی پدیده‌ها توجه می‌کنیم، و غالباً از جزئیات خاصی که در کتابهای تخصصیتر بررسی می‌شوند چشمپوشی خواهیم کرد. هرگاه ممکن باشد، نتایج کوانتومی را با نتایج کلاسیک مقایسه می‌کنیم تا خواننده بتواند ادراک خود را از آثار کوانتومی عمیقتر کند.

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

مکانیک کوانتومی، یعنی ارائه و بحث واقعیت‌های تجربی‌ای که به رد ایده‌های کلاسیک انجامیده‌اند، خودداری کنیم. بنابراین ناگزیر بوده‌ایم که از روش استقرایی صرف‌نظر کنیم. البته ما هم معتقدیم که در توصیف فیزیک به‌عنوان علمی که به‌خاطر مواجهه دائم با واقعیت‌های تجربی دائماً در حال تکامل است، استفاده از روش استقرایی اهمیت دارد، اما به‌نظر می‌رسد چنین روشی برای یک کتاب درسی فیزیک اتمی یا یک درس مقدماتی فیزیک کوانتومی در سطح پایینتر، مناسبتر باشد. همچنین، ما 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 نظریهٔ "پذیرفته‌شده" مکانیک کوانتومی (که موفقیت‌های آن در تمام زمینه‌های فیزیک و شیمی این پذیرش را ایجاب کرده است) مفید خواهد بود.

۱۲

یک کاربرد نظریهٔ اختلال: ساختار ریز و فوق
ریز اتم هیدروژن

۲-۱۲ جملات اضافی
در هامیلتونی

۱-۲-۱۲ هامیلتونی ساختار ریز
الف) معادلهٔ دیراک در حوزهٔ نسبیتی ضعیف
ب) تعبیر جملات مختلف در هامیلتونی
ساختار ریز
۲-۲-۱۲ برهم‌کنشهای مغناطیسی مربوط به اسپین
پروتون: هامیلتونی فوق ریز
الف) اسپین و گشتاور مغناطیسی پروتون
ب) هامیلتونی فوق ریز مغناطیسی W_{hf}
ج) تعبیر فیزیکی جملات مختلف W_{hf}
د) مرتبه‌های بزرگی

۳-۱۲ ساختار فوق ریز
تراز $n = 2$

۱-۳-۱۲ بیان مسئله
الف) واگنی تراز $n = 2$
ب) هامیلتونی اختلال
۲-۳-۱۲ نمایش ماتریسی هامیلتونی ساختار ریز W_f
در داخل تراز $n = 2$
الف) خواص عمومی
ب) نمایش ماتریسی W_f در زیر تراز $2s$
ج) نمایش ماتریسی W_f در زیر تراز $2p$
۳-۳-۱۲ نتایج: ساختار ریز تراز $n = 2$
الف) نمادگذاری طیف‌نمایی
ب) مکان ترازهای $2s_{1/2}$ ، $2p_{1/2}$ و $2p_{3/2}$

۴-۱۲ ساختار ریز
تراز $n = 1$

۱-۴-۱۲ بیان مسئله
الف) واگنی تراز $1s$
ب) تراز $1s$ دو ساختار ریز ندارد
۲-۴-۱۲ نمایش ماتریسی W_{hf} در تراز $1s$
الف) جملات غیر از جملهٔ تماسی
ب) جملهٔ تماسی
ج) ویژه‌حالتها و ویژه‌مقدارهای جملهٔ تماسی
۳-۴-۱۲ ساختار فوق ریز تراز $1s$
الف) مکان ترازها
ب) اهمیت ساختار فوق ریز تراز $1s$

۵-۱۲ اثر زیمان ساختار
فوق ریز حالت پایه ۱s

۱-۵-۱۲ بیان مسئله

الف) هامیلتونی زیمان W_Z

ب) اختلالی که توسط تراز ۱s دیده می‌شود

ج) حوزه‌های مختلف قدرت میدان

۲-۵-۱۲ اثر زیمان در میدان ضعیف

الف) نمایش ماتریسی S_z در پایه $\{|F, m_F\rangle\}$

ب) ویژه‌حالتها و ویژه‌مقدارهای میدان ضعیف

ج) بسامدهای بور مؤثر در تحول $\langle F \rangle$ و

$\langle S_z \rangle$. مقایسه با مدل برداری اتم

۳-۵-۱۲ اثر زیمان در میدان قوی

الف) ویژه‌حالتها و ویژه‌مقدارهای جمله

زیمان

ب) اثرات جمله فوق ریز، به‌عنوان یک اختلال

ج) بسامدهای بور مؤثر در تحول $\langle S_z \rangle$

۴-۵-۱۲ اثر زیمان در میدان متوسط

الف) ماتریسی که معرف اختلال کل در پایه

$\{|F, m_F\rangle\}$ است

ب) مقادیر انرژی در یک میدان دلخواه

ج) واجفتیدگی جزئی فوق ریز

۱-۱۲ مقدمه

مهمترین نیروهای داخل اتمها، نیروهای الکتروستاتیکی کولنی هستند. در فصل ۷، با انتخاب هامیلتونی اتم هیدروژن به صورت زیر این نیروها را منظور کردیم

$$H_0 = \frac{P^2}{2\mu} + V(R) \quad (1-12)$$

جملهٔ اول، معرف انرژی جنبشی اتم در دستگاه مختصات مرکز جرم است (μ جرم کاهش یافته است). جملهٔ دوم

$$V(R) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{R} = -\frac{e^2}{R} \quad (2-12)$$

نشان دهندهٔ انرژی برهم‌کنش الکتروستاتیکی بین الکترون و پروتون است. (q بار الکترون است). در بخش ۳-۷ به تفصیل ویژه‌حالت‌های خاص و ویژه‌مقدارهای H_0 را محاسبه کردیم.

در واقع، رابطهٔ (۱-۱۲) فقط یک تقریب است، زیرا هیچ‌گونه اثر نسبیتی در آن منظور نشده و بخصوص، از تمام آثار مغناطیسی مربوط به اسپین الکترون صرف‌نظر شده است. علاوه بر این، اسپین پروتون و برهم‌کنش‌های مغناطیسی مربوط به آن را نیز در نظر نگرفته‌ایم. در حقیقت، این خطا بسیار ناچیز است، زیرا اتم هیدروژن یک سیستم نسبیتی ضعیف است (می‌دانیم که در مدل بور، سرعت، v ، الکترون در مدار اول $n = 1$ در رابطهٔ $1 \ll v/c = e^2/\hbar c = 1/137$ صدق می‌کند). به علاوه، گشتاور مغناطیسی پروتون بسیار کوچک است.

با این همه، دقت قابل ملاحظهٔ آزمایش‌های طیف‌نمایی، مشاهدهٔ آثاری را ممکن می‌سازد که نمی‌توانیم آنها را برحسب هامیلتونی (۱-۱۲) توضیح دهیم. بنابراین، تصحیحاتی را که هم‌اکنون برشمردیم، با نوشتن هامیلتونی کامل اتم هیدروژن به صورت زیر منظور خواهیم کرد

$$H = H_0 + W \quad (3-12)$$

که در آن، H_0 با رابطهٔ (۱-۱۲) داده می‌شود و W معرف تمام جملاتی است که تا به حال از آنها صرف‌نظر کرده‌ایم. چون W خیلی کوچکتر از H_0 است، می‌توان اثرات آن را با استفاده از نظریهٔ اختلال (فصل ۱۱) محاسبه کرد. این همان چیزی است که در این فصل می‌خواهیم انجام دهیم. نشان خواهیم داد که، W عامل ظاهر شدن "ساختار ریز" و همچنین "ساختار فوق ریز" ترازهای مختلف انرژی است که در فصل ۷ محاسبه کردیم. به علاوه، این ساختارها را می‌توانیم با

دقت بسیار زیادی به طور تجربی اندازه‌گیری کنیم (ساختار فوق ریز حالت پایه ۱۸ اتم هیدروژن، یک کمیت فیزیکی است که در حال حاضر تا بزرگترین رقم معنی‌دار شناخته شده است). در این فصل و مکملهای آن، همچنین تأثیر یک میدان مغناطیسی یا الکتریکی ایستای خارجی را بر روی ترازهای مختلف اتم هیدروژن بررسی خواهیم کرد (اثر زیمان و اثر اشتارک).

در واقع این فصل دو هدف دارد. از یک طرف، می‌خواهیم یک مورد واقعی و محکم را برای تشریح و نمایش نظریه عام اختلال مانا که در فصل قبل مورد بحث قرار دادیم، به‌کار ببریم. از طرف دیگر، این مطالعه، که در مورد یکی از اساسیترین سیستمهای فیزیکی است (اتم هیدروژن)، مفاهیمی را که در فیزیک اتمی اساسی هستند، روشن می‌سازد. به‌عنوان مثال، بخش ۱۲-۲ به بحث کامل تصحیحات نسبیتی و مغناطیسی مختلف اختصاص داده شده است. این فصل، در عین حال که برای مطالعه دو فصل آخر ضروری نیست، مفاهیمی را ارائه می‌دهد که برای فیزیک اتمی بنیادی هستند.

۱۲-۲ جملات اضافی در هامیلتونی

اولین مسئله‌ای که باید حل کنیم یافتن رابطه‌ای برای W است.

۱۲-۲-۱ هامیلتونی ساختار ریز

الف) معادله دیراک در حوزه نسبیتی ضعیف

در فصل ۹ توضیح دادیم که وقتی می‌خواهیم معادله‌ای برای الکترون به‌دست آوریم که هم اصول موضوع نسبیت خاص و هم اصول موضوع مکانیک کوانتومی را در بر داشته باشد، اسپین به‌طور طبیعی ظاهر می‌شود. یک چنین معادله‌ای وجود دارد: این معادله، معادله دیراک است که توضیح پدیده‌های متعددی را ممکن می‌سازد (اسپین الکترون، ساختار ریز هیدروژن، و غیره) و وجود پوزیترون را پیش‌بینی می‌کند.

از این رو، دقیقترین راه برای یافتن رابطه‌ای برای تصحیحات نسبیتی [که در جمله W از رابطه (۱۲-۳) پدیدار می‌شود] عبارت از این است که ابتدا معادله دیراک را برای الکترونی که در پتانسیل $V(r)$ ناشی از حضور پروتون (که بینهایت سنگین و بی‌حرکت در مبدأ مختصات در نظر گرفته می‌شود) قرار دارد، بنویسیم. سپس، به جستجوی شکل حدی آن، وقتی سیستم به‌طور ضعیف نسبیتی است، می‌پردازیم. در این صورت متوجه می‌شویم که توصیف حالت الکترون باید شامل یک اسپینور دومؤلفه‌ای باشد (بخش ۹-۳-۱). در این صورت، عملگرهای اسپین S_x ، S_y ، S_z که در فصل ۹ معرفی کردیم، به‌طور طبیعی ظاهر می‌شوند. بالاخره، رابطه‌ای نظیر (۱۲-۳) برای هامیلتونی H به‌دست می‌آوریم، که در آن W یک بسط رشته‌توانی از v/c است که می‌توانیم آن را حساب کنیم.

در اینجا، مطالعهٔ معادلهٔ دیراک، یا پیدا کردن شکل آن در حوزهٔ نسبیتی ضعیف، خارج از بحث ماست. ما مطالعهٔ خود را به پیدا کردن چند جملهٔ اول بسط رشتهٔ توانی W نسبت به v/c و تعبیر فیزیکی آنها محدود می‌کنیم.

$$H = m_e c^2 + \underbrace{\frac{\mathbf{P}^2}{2m_e}}_{H_0} + V(R) - \underbrace{\frac{\mathbf{P}^2}{\lambda m_e^2 c^2}}_{W_{mv}} + \underbrace{\frac{1}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{R} \frac{dV(R)}{dR}}_{W_{SO}} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} + \underbrace{\frac{\hbar^2}{\lambda m_e^2 c^2} \Delta V(R)}_{W_D} + \dots \quad (4-12)$$

در رابطهٔ (۴-۱۲) انرژی جرم در حال سکون $m_e c^2$ الکترون (جملهٔ اول) و هامیلتونی غیرنسبیتی H_0 (جملات دوم و سوم) را شناسایی می‌کنیم. جملات بعدی جملات ساختار ریز نامیده می‌شوند.

یادداشت:

توجه کنید که می‌توان معادلهٔ دیراک را برای الکترون واقع در یک پتانسیل کولنی، دقیقاً حل کرد. به این ترتیب، ترازهای انرژی اتم هیدروژن را بدون اینکه مجبور باشیم ویژه‌حالتها و ویژه‌مقدارهای H را به صورت یک رشتهٔ توانی محدود از v/c بنویسیم، به دست می‌آوریم. با وجود این، نظریهٔ "اختلال" که ما در اینجا آن را می‌پذیریم در استخراج شکل و تعبیر و معنای فیزیکی برهم‌کنشهای مختلف موجود در داخل یک اتم، بسیار مفید است. این روش بعداً امکان تعمیم به مورد اتمهای چندالکترونی را (که نمی‌دانیم چگونه هم‌ارز معادلهٔ دیراک را برای آنها بنویسیم) فراهم خواهد ساخت. ■

ب) تعبیر جملات مختلف هامیلتونی ساختار ریز

۱. تغییر جرم با سرعت (جملهٔ W_{mv})

۱. منشأ فیزیکی

پیدا کردن منشأ فیزیکی جملهٔ W_{mv} بسیار راحت است. اگر از رابطهٔ نسبیتی برای انرژی یک

۱. رابطهٔ (۴-۱۲) با این فرض که پروتون بینهایت سنگین است به دست آمده است. به این دلیل است که جرم m_e الکترون ظاهر می‌شود و نه مانند (۱-۱۲)، جرم کاهش‌یافتهٔ μ ی اتم. تا جایی که به H_0 مربوط است، اثر متناهی بودن جرم پروتون، با قرار دادن m_e به جای μ منظور می‌شود. اما این اثر را در جملات بعدی H ، که فعلاً جملات تصحیحی هستند، نادیده خواهیم گرفت. به علاوه، مشکل خواهد بود که آن را برآورد کنیم. زیرا تشریح نسبیتی یک سیستم از دو ذرهٔ برهم‌کنشی، مسائل جدی را مطرح می‌کند. [کافی نیست که به جای m_e در آخرین جمله (۴-۱۲)، μ قرار دهیم].

ذره کلاسیک با جرم در حال سکون m_e و تکانه \mathbf{p}

$$E = c\sqrt{\mathbf{p}^2 + m_e^2 c^2} \quad (5-12)$$

شروع کنیم و بسط محدود E را برحسب توانهای $|\mathbf{p}|/m_e c$ بنویسیم، به دست می آوریم:

$$E = m_e c^2 + \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} - \frac{\mathbf{p}^4}{8m_e^3 c^2} + \dots \quad (6-12)$$

علاوه بر انرژی جرم سکون ($m_e c^2$) و انرژی جنبشی غیرنسبیتی ($\mathbf{p}^2/2m_e$)، جمله $-\mathbf{p}^4/8m_e^3 c^2$ را، که در (۴-۱۲) ظاهر می شود، نیز پیدا می کنیم. این جمله معرف اولین تصحیح انرژی است که از تغییر نسبیتی جرم با سرعت ناشی می شود.

۲. مرتبه بزرگی

برای تعیین اندازه این تصحیح، مرتبه بزرگی نسبت W_{mv}/H_0 را محاسبه می کنیم

$$\frac{W_{mv}}{H_0} \simeq \frac{\frac{\mathbf{p}^4}{8m_e^3 c^2}}{\frac{\mathbf{p}^2}{2m_e}} = \frac{\mathbf{p}^2}{4m_e^2 c^2} = \frac{1}{4} \left(\frac{v}{c}\right)^2 \simeq \alpha^2 \simeq \left(\frac{1}{137}\right)^2 \quad (7-12)$$

زیرا قبلاً گفتیم که برای اتم هیدروژن، $v/c \simeq \alpha$. چون $v/c \simeq \alpha$ ، $H_0 \simeq 10^8 \text{ eV}$ ، ملاحظه می کنیم که $W_{mv} \simeq 10^{-2} \text{ eV}$.

۲. جفت شدگی اسپین-مدار (جمله W_{SO})

۱. منشأ فیزیکی

الکترون با سرعت $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m_e$ در میدان الکتروستاتیکی \mathbf{E} ناشی از حضور پروتون حرکت می کند. نسبیت خاص نشان می دهد که در این حال، در دستگاه مرجع الکترون، یک میدان مغناطیسی \mathbf{B}' ظاهر می شود که تا مرتبه اول نسبت به v/c برابر است با

$$\mathbf{B}' = -\frac{1}{c^2} \mathbf{v} \times \mathbf{E} \quad (8-12)$$

چون الکترون دارای یک گشتاور مغناطیسی ذاتی $\mathbf{M}_S = q\mathbf{S}/m_e$ است، با این میدان \mathbf{B}' برهم کنش می کند. انرژی برهم کنش مربوط را می توانیم به صورت زیر بنویسیم

$$W' = -\mathbf{M}_S \cdot \mathbf{B}' \quad (9-12)$$

حال W' را قدری صریحتر بیان می‌کنیم. میدان الکتروستاتیکی \mathbf{E} در (۱۲-۸) برابر است با $V(r) = -e^2/r$ ، که در آن انرژی الکتروستاتیکی الکترون است. از اینجا، به دست می‌آید

$$\mathbf{B}' = \frac{1}{qc^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \frac{\mathbf{p}}{m_e} \times \mathbf{r} \quad (10-12)$$

در عملگر مکانیک کوانتومی مربوط، خواهیم داشت

$$\mathbf{p} \times \mathbf{r} = -\mathbf{L} \quad (11-12)$$

بالاخره، به دست می‌آوریم

$$W' = \frac{1}{m_e^2 c^2} \frac{1}{R} \frac{dV(R)}{dR} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \frac{e^2}{m_e^2 c^2} \frac{1}{R^2} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad (12-12)$$

به این ترتیب، جمله اسپین-مدار W_{SO} را که در (۱۲-۴) پیدا می‌شود، با تقریب ضریب $1/2$ ، به دست می‌آوریم. در این صورت، این جمله معرف برهم‌کنش گشتاور مغناطیسی اسپین الکترون با میدان مغناطیسی است که توسط الکترون به علت حرکت آن در میدان الکتروستاتیکی پروتون، "دیده" می‌شود.

۲. مرتبهٔ بزرگی

چون \mathbf{L} و \mathbf{S} از مرتبهٔ \hbar هستند، داریم

$$W_{SO} \simeq \frac{e^2}{m_e^2 c^2} \frac{\hbar^2}{R^2} \quad (13-12)$$

حال، W_{SO} را با H_0 ، که از مرتبهٔ e^2/R است مقایسه می‌کنیم

$$\frac{W_{SO}}{H_0} \simeq \frac{e^2 \hbar^2}{m_e^2 c^2 R^2} = \frac{\hbar^2}{m_e^2 c^2 R} \quad (14-12)$$

۱. می‌توان نشان داد که ضریب $1/2$ ، ناشی از این واقعیت است که حرکت الکترون حول پروتون، مستقیم‌الخط و یکنواخت نیست. بنابراین اسپین الکترون نسبت به دستگاه مرجع آزمایشگاهی دوران می‌کند (حرکت تقدیمی توماس؛ به مرجعهای زیر رجوع کنید:

R از مرتبه شعاع بور، $a_0 = \hbar^2/m_e c^2$ است. در نتیجه

$$\frac{W_{SO}}{H_0} \simeq \frac{e^{\hbar}}{\hbar^2 c^2} = \alpha^2 = \left(\frac{1}{137} \right)^2 \quad (15-12)$$

۳. جمله داروین W_D

۱. منشأ فیزیکی

در معادله دیراک، برهم‌کنش بین الکترون و پتانسیل کولنی هسته، "موضعی" است؛ فقط به مقدار میدان در مکان \mathbf{r} الکترون بستگی دارد. اما، تقریب نانسیبیتی (بسط برحسب توانهای v/c)، برای اسپینور دومولفه‌ای که حالت الکترون را توصیف می‌کند، به معادله‌ای منتهی می‌شود که در آن برهم‌کنش بین الکترون و میدان، غیرموضعی است. بنابراین، الکترون تحت تأثیر تمام مقادیری قرار می‌گیرد که میدان در حوزه متمرکز در نقطه \mathbf{r} و از مرتبه طول موج کامپتون $\hbar/m_e c$ الکترون اختیار می‌کند. این منشأ تصحیحی است که جمله داروین معرف آن است.

برای اینکه این مطلب را دقیقتر بفهمیم، فرض می‌کنیم که انرژی پتانسیل الکترون، به جای $V(\mathbf{r})$ ، با عبارتی به صورت زیر داده شود

$$\int d^3 \rho f(\rho) V(\mathbf{r} + \rho) \quad (16-12)$$

که در آن $f(\rho)$ تابعی است که انتگرال آن برابر با ۱ است، و فقط به $|\rho|$ بستگی دارد و تنها در داخل یک حجم از مرتبه $(\hbar/m_e c)^3$ ، متمرکز در $\rho = 0$ ، مقادیر قابل ملاحظه‌ای اختیار می‌کند.

اگر از تغییر $V(\mathbf{r})$ در فاصله‌ای از مرتبه $\hbar/m_e c$ صرف نظر کنیم، می‌توانیم، در (۱۶-۱۲) $V(\mathbf{r} + \rho)$ را با $V(\mathbf{r})$ جایگزین کنیم و $V(\mathbf{r})$ را از انتگرال بیرون آوریم، که در آن صورت برابر ۱ است. در این مورد (۱۶-۱۲) به $V(\mathbf{r})$ تبدیل می‌شود.

یک تقریب بهتر عبارت از این است که در (۱۶-۱۲)، $V(\mathbf{r} + \rho)$ را با بسط رشته تیلور آن در مجاورت $\rho = 0$ جایگزین کنیم. جمله مرتبه صفرم، $V(\mathbf{r})$ را می‌دهد. جمله مرتبه اول، به خاطر تقارن گروه $f(\rho)$ ، صفر است. جمله مرتبه دوم، شامل مشتقات انرژی پتانسیل $V(\mathbf{r})$ در نقطه \mathbf{r} و توابع درجه دومی از مؤلفه‌های ρ است، که توسط $f(\rho)$ توزین و بر روی $d^2 \rho$ انتگرال‌گیری شده است. این به نتیجه‌ای از مرتبه زیر منجر می‌شود

$$\left(\frac{\hbar}{m_e c} \right)^2 \Delta V(\mathbf{r})$$

بنابراین، به سهولت می‌توان پذیرفت که این جمله مرتبه دوم باید همان جمله داروین باشد.

۲. مرتبهٔ بزرگی

با قرار دادن $-e^2/R$ به جای $V(R)$ ، می‌توانیم جملهٔ داروین را به صورت زیر بنویسیم

$$-e^2 \frac{\hbar^2}{4m_e^2 c^2} \Delta \left(\frac{1}{R} \right) = \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m_e^2 c^2} \delta(\mathbf{R}) \quad (17-12)$$

(برای لاپلاسی $1/R$ از فرمول (۶۱) ی بیوست ۲، استفاده کرده‌ایم).

وقتی از (۱۷-۱۲) در یک حالت اتمی مقدار متوسط بگیریم به رابطهٔ زیر می‌رسیم

$$\frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m_e^2 c^2} |\psi(0)|^2$$

که در آن، $\psi(0)$ مقدار تابع موج در مبدأ است. از این رو، جملهٔ داروین تنها بر الکترونهای s ، که تنها الکترونهایی هستند که برای آنها $\psi(0) \neq 0$ ، تأثیر می‌گذارد (بخش ۷-۳-۴ قسمت ج). مرتبهٔ بزرگی $|\psi(0)|^2$ را می‌توان به این ترتیب به دست آورد که انتگرال مربع قدرمطلق تابع موج را بر روی حجمی از مرتبهٔ a_0^3 (شعاع بور) مساوی ۱ قرار دهیم. بنابراین به دست می‌آوریم

$$|\psi(0)|^2 \simeq \frac{1}{a_0^3} = \frac{m_e^3 e^6}{\hbar^6} \quad (18-12)$$

که مرتبهٔ بزرگی جملهٔ داروین را می‌دهد

$$W_D \simeq \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m_e^2 c^2} |\psi(0)|^2 \simeq m_e c^2 \frac{e^4}{\hbar^2 c^2} = m_e c^2 \alpha^2 \quad (19-12)$$

چون $H_0 \simeq m_e c^2 \alpha^2$ ، باز هم می‌بینیم که

$$\frac{W_D}{H_0} \simeq \alpha^2 = \left(\frac{1}{137} \right)^2 \quad (20-12)$$

به این ترتیب، کلیهٔ جملات ساختار ریز، تقریباً 10^4 بار از هامیلتونی غیرنسبیتی فصل ۷ کوچکترند.

۱۲-۲-۲ برهم‌کنشهای مغناطیسی مربوط به اسپین پروتون: هامیلتونی فوق ریز

(الف) اسپین و گساور مغناطیسی پروتون

تا به حال، پروتون را یک نقطهٔ فیزیکی به جرم M_p و بار $q_p = -q$ در نظر گرفته‌ایم. در واقع، پروتون، مانند الکترون ذره‌ای با اسپین $1/2$ است. مشاهده‌پذیر اسپین متناظر را با \mathbf{I} نمایش می‌دهیم.

به اسپین I ی پروتون، یک گشتاور مغناطیسی M_I وابسته است. اما، نسبت زیرومغناطیسی آن با نسبت زیرومغناطیسی الکترون متفاوت است

$$M_I = g_p \mu_n \frac{I}{\hbar} \quad (21-12)$$

که در آن μ_n ، مگنتون بور هسته‌ای است

$$\mu_n = \frac{q_p \hbar}{2 M_p} \quad (22-12)$$

و ضریب g_p ، برای پروتون برابر است با $g_p \simeq 5.585$. به علت وجود M_p (جرم پروتون) در مخرج (۲۲-۱۲)، μ_n نزدیک به 2000 مرتبه از مگنتون بور μ_B کوچکتر است (یادآور می‌شویم که $\mu_B = q\hbar/2m_e$). اگر چه تکانه‌های زاویه‌ای پروتون و الکترون یکی هستند، ولی به خاطر اختلاف جرم، مغناطیس هسته‌ای به مراتب کمتر از مغناطیس الکترونی اهمیت دارد. بنابراین، برهم‌کنشهای مغناطیسی ناشی از اسپین I ی پروتون بسیار ضعیف‌اند.

ب) هامیلتونی فوق ریز مغناطیسی W_{hf}

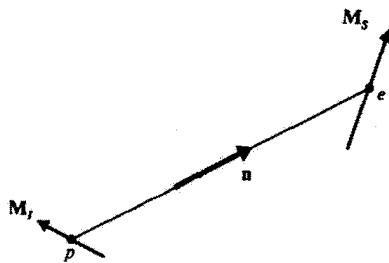
بنابراین، الکترون نه تنها در میدان الکتروستاتیکی پروتون، بلکه در میدان مغناطیسی ایجادشده توسط M_I نیز حرکت می‌کند. وقتی پتانسیل برداری مربوط را در معادله شرودینگر قرار دهیم، ملاحظه می‌کنیم که باید به هامیلتونی (۴-۱۲) یک رشته جملات اضافی زیر را بیفزاییم (مکمل ۱ از فصل ۱۲ را ببینید)

$$W_{hf} = -\frac{\mu_0}{4\pi} \left\{ \frac{q}{m_e R^3} \mathbf{L} \cdot \mathbf{M}_I + \frac{1}{R^3} [3(\mathbf{M}_S \cdot \mathbf{n})(\mathbf{M}_I \cdot \mathbf{n}) - \mathbf{M}_S \cdot \mathbf{M}_I] + \frac{8\pi}{3} \mathbf{M}_S \cdot \mathbf{M}_I \delta(\mathbf{R}) \right\} \quad (23-12)$$

در این عبارت، M_S گشتاور مغناطیسی اسپین الکترون، و \mathbf{n} بردار یکه متعلق به خط مستقیم واصل بین پروتون و الکترون است (شکل ۱-۱۲).

خواهیم دید که W_{hf} انتقال انرژی‌هایی را وارد می‌کند که در مقایسه با انتقالهای ایجادشده توسط W_f ، کوچک‌اند. به این جهت است که W_{hf} را "هامیلتونی ساختار فوق ریز" می‌نامیم.

۱. چون برهم‌کنشهای بسیار ریز جملات تصحیحی بسیار کوچکی هستند، می‌توانند با استفاده از معادله غیرنسبیتی شرودینگر به دست آیند.



شکل ۱۲-۱ موقعیت نسبی گشتاورهای مغناطیسی M_S و M_I پروتون و الکترون؛ n بردار یکه در راستای خط واصل بین دو ذره است.

ج) تعبیر فیزیکی جملات مختلف W_{hf}

اولین جمله W_{hf} ، معرف برهم‌کنش گشتاور مغناطیسی هسته‌ای M_I با میدان مغناطیسی $(\mu_o / 4\pi) q I_e / m_e r^3$ است که توسط دوران بار الکترونی در محل پروتون ایجاد می‌شود. جملهٔ دوم، نشان‌دهندهٔ برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی بین گشتاورهای مغناطیسی الکترونی و هسته‌ای است؛ یعنی برهم‌کنش گشتاور مغناطیسی اسپین الکترون با میدان مغناطیسی حاصل از M_I (مکمل ۲ از فصل ۱۱)، یا برعکس.

بالاخره جملهٔ آخر، که "جملهٔ تماسی" فرمی نیز نامیده می‌شود، از تکنیکی میدان حاصل از گشتاور مغناطیسی پروتون در $r = 0$ ، ناشی می‌شود. در حقیقت، پروتون یک نقطه نیست. می‌توان نشان داد (مکمل ۱ از فصل ۱۲) که شکل میدان مغناطیسی داخل پروتون با شکل میدانی که توسط M_I (که برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی حرکت می‌کند) در خارج آن ایجاد می‌شود یکی نیست. جملهٔ تماسی، برهم‌کنش گشتاور مغناطیسی اسپین الکترون با میدان مغناطیسی داخل پروتون را توصیف می‌کند (تابع "دلتا" بیان‌کنندهٔ این حقیقت است که این جمله تماسی همان‌طوری که از اسمش پیداست، تنها زمانی وجود دارد که توابع موج الکترون و پروتون روی هم بیفتند).

د) مرتبه‌های بزرگی

به آسانی می‌توان نشان داد که مرتبهٔ بزرگی دو جملهٔ اول W_{hf} برابر است با

$$\frac{q^2 \hbar^2}{m_e M_p R^3} \frac{\mu_o}{4\pi} = \frac{e^2 \hbar^2}{m_e M_p c^2} \frac{1}{R^3} \quad (12-24)$$

با استفاده از (۱۲-۱۳) ملاحظه می‌کنیم که این جملات تقریباً 2000 مرتبه کوچکتر از W_{SO} هستند.

و اما در مورد جمله آخر (۱۲-۲۳)؛ این جمله نیز 2000 مرتبه از جمله داروین، که شامل یک تابع $\delta(R)$ نیز هست کوچکتر است.

۱۲-۳ ساختار ریز تراز ۲ $n = 2$

۱۲-۳-۱ بیان مسئله

الف) واگنی تراز ۲ $n = 2$

در فصل ۷ دیدیم که انرژی اتم هیدروژن فقط به عدد کوانتومی n بستگی دارد. از این رو، انرژی حالت‌های $(n=2, l=0)$ و $(n=2, l=1)$ یکسان و مقدار آن برابر است با

$$-\frac{E_I}{4} = -\frac{1}{8}\mu c^2 \alpha^2$$

اگر از اسپینها صرف نظر کنیم، زیرتراز ۲s متشکل است از یک حالت منفرد، و زیرتراز ۲p، از سه حالت متمایز تشکیل شده است که اختلاف آنها در ویژه مقدار $m_L \hbar$ مؤلفه L_z تکانه زاویه‌ای مداری L آنهاست. $(m_L = 1, 0, -1)$. به خاطر وجود اسپینهای الکترون و پروتون، واگنی تراز ۲ $n = 2$ از مداری که در فصل ۷ محاسبه کردیم بیشتر است. مؤلفه‌های S_z و I_z این دو اسپین هر کدام می‌توانند دو مقدار: $m_S = \pm 1/2, m_I = \pm 1/2$ را اختیار کنند. در این صورت، یک پایه راست‌هنجار ممکن در تراز ۲ $n = 2$ عبارت است از

$$\left\{ |n=2; l=0; m_L=0; m_S=\pm \frac{1}{2}; m_I=\pm \frac{1}{2} \rangle \right\} \quad (12-25)$$

(زیرتراز ۲s، با ابعاد ۴)

$$\left\{ |n=2; l=1; m_L=-1, 0, +1; m_S=\pm \frac{1}{2}; m_I=\pm \frac{1}{2} \rangle \right\} \quad (12-26)$$

(زیرتراز ۲p، با ابعاد ۱۲)

در این صورت، تراز ۲ $n = 2$ دارای واگنی کل ۱۲ است.

بنابر نتایج فصل ۱۱ (بخش ۱۱-۳)، برای اینکه اثر اختلال W بر روی تراز ۲ $n = 2$ را حساب کنیم، لازم است که ماتریس 16×16 ی معرف محدود بودن W به این تراز را قطر می‌کنیم. ویژه مقدارهای این ماتریس، تصحیحات مرتبه اول انرژی، و ویژه حالت‌های متناظر ویژه حالت‌های هامیلتونی تا مرتبه صفرند.

(ب) هامیلتونی اختلال

در تمام این بخش، فرض خواهیم کرد که هیچ میدان خارجی به اتم اعمال نشود. اختلاف، W ، بین هامیلتونی دقیق H و هامیلتونی H_0 فصل ۷ (بخش ۷-۳) شامل جملات ساختار ریز، آمده در بخش ۱۲-۲-۱ در بالا، یعنی

$$W_f = W_{mv} + W_{SO} + W_D \quad (27-12)$$

و همچنین شامل جملات ساختار فوق ریز W_{hf} ، که در بخش ۱۲-۲-۲ معرفی کردیم نیز هست. بنابراین داریم

$$W = W_f + W_{hf} \quad (28-12)$$

چون W_f نزدیک 2000 مرتبه بزرگتر از W_{hf} است (بخش ۱۲-۲-۲ قسمت د)، واضح است که باید قبل از بررسی اثر W_{hf} ، ابتدا اثر W_f بر روی تراز $n = 2$ را مطالعه کنیم. خواهیم دید که واگنی $n = 16$ این تراز، به طور جزئی توسط W_f برطرف می‌شود. ساختاری که به این طریق ظاهر می‌شود، "ساختار ریز" نامیده می‌شود.

سپس W_{hf} می‌تواند باقیماندهٔ واگنی ترازهای ساختار ریز را برطرف کند و موجب شود که یک "ساختار فوق ریز" در داخل هر یک از این ترازها ظاهر شود. در این بخش (۱۲-۳)، مطالعهٔ خود را به بررسی ساختار ریز تراز $n = 1$ محدود خواهیم کرد. این محاسبات را می‌توانیم به راحتی به سایر ترازها تعمیم دهیم.

۱۲-۳-۲ نمایش ماتریسی هامیلتونی ساختار ریز W_f در داخل تراز $n = 2$
الف) خواص عمومی

خواص W_f ، همان طوری که خواهیم دید، به ما امکان می‌دهند تا نشان دهیم که ماتریس 16×16 معرف آن در تراز $n = 2$ را می‌توانیم به یک رشته زیرماتریسهای مربعی با ابعاد کوچکتر بشکنیم. این کار تعیین ویژه‌مقادیر و ویژه‌بردارهای این ماتریس را به طور قابل ملاحظه‌ای ساده خواهد کرد.

۱. W_f بر متغیرهای اسپینی پروتون اثر نمی‌کند

از (۱۲-۴) می‌دانیم که جملات ساختار ریز به \mathbf{I} بستگی ندارند. از این رو، نتیجه می‌گیریم که در مطالعهٔ ساختار ریز، می‌توانیم از اسپین پروتون صرف نظر کنیم (بعداً، کلیهٔ درجات واگنی به دست آمده را در ۲ ضرب می‌کنیم). بنابراین، ابعاد ماتریسی که باید قطری کنیم از ۱۶ به ۸ کاهش می‌یابد.

۲. W_f ، زیرترازهای $2p$ و $2s$ را به هم متصل نمی‌کند

ابتدا ثابت می‌کنیم که L^2 با W_f جابه‌جا می‌شود. عملگر L^2 با مؤلفه‌های مختلف L ، با $R(L^2)$ فقط روی متغیرهای مداری اثر می‌کند، با P^z [فرمول (۷-۱۶)]، و با $S(L^2)$ روی متغیرهای اسپین اثر نمی‌کند (جابه‌جا می‌شود). بنابراین، L^2 با W_{mv} (که متناسب است با P^z)، با W_{SO} (که فقط به R ، L ، S بستگی دارد) و با W_D (که فقط به R بستگی دارد) جابه‌جا می‌شود.

حالت‌های $2s$ و $2p$ ، ویژه‌حالت‌های L^2 با ویژه‌مقدارهای مختلف (0 و $2\hbar^2$) هستند. بنابراین، W_f ، که با L^2 جابه‌جا می‌شود، بین یک حالت $2s$ و یک حالت $2p$ دارای عناصر ماتریسی نیست. در نتیجه، ماتریس 8×8 معرف W_f در داخل تراز $n=2$ را می‌توانیم به یک ماتریس 2×2 ی مربوط به حالت $2s$ و یک ماتریس 6×6 مربوط به حالت $2p$ تقسیم کنیم.

$$(W_f)_{n=2} = \begin{array}{cc} & \begin{array}{c} 2s \\ 2p \end{array} \\ \begin{array}{c} 2s \\ 2p \end{array} & \begin{array}{|c|c|} \hline \text{diagonal} & 0 \\ \hline 0 & \text{diagonal} \\ \hline \end{array} \end{array}$$

یادداشت:

خاصیت قبلی را همچنین می‌توان به عنوان نتیجه‌ای از این حقیقت که W_f زوج است، نیز در نظر گرفت. بر اثر انعکاس، R به $R = |R| - R$ (بدون تغییر می‌ماند)، P به $-P$ ، L به L ، و S به S تبدیل می‌شود. در این صورت به آسانی ملاحظه می‌کنیم که W_f ناورد باقی می‌ماند. بنابراین، بین حالت‌های $2s$ و $2p$ ، که دارای پارته‌های مخالف هم هستند، هیچ عنصر ماتریسی ندارد (مکمل F ، فصل ۲، جلد اول، کتاب فارسی).

ب) نمایش ماتریسی W_f در زیرتراز $2s$

دو بعدی بودن زیرفضای $2s$ نتیجه‌ای از این واقعیت است که برای S_z دو مقدار ممکن $m_s = \pm 1/2$ وجود دارد (چون در حال حاضر از I_z صرف نظر می‌کنیم).

W_{mv} و W_D به S بستگی ندارند. بنابراین ماتریسهای معرف این دو عملگر در زیرفضای $2s$ مضاربی از ماتریس یکه هستند، و ضرایب تناسب به ترتیب، برابرند با عناصر ماتریسی مداری محض

$$\left\langle n=2; l=0; m_L=0 \left| -\frac{P^z}{\lambda m_e c^2} \right| n=2; l=0; m_L=0 \right\rangle$$

$$\langle n = 2; l = 0; m_L = 0 \left| \frac{\hbar^2}{\lambda m_e^2 c^2} q \Delta V(R) \right| n = 2; l = 0; m_L = 0 \rangle$$

چون ویژه‌توابع H_0 را می‌شناسیم، محاسبهٔ این عناصر ماتریسی هیچ مشکل نظریی ایجاد نمی‌کند. در نتیجه (مکمل ۲ فصل ۱۲)

$$\langle W_{mv} \rangle_{rs} = -\frac{13}{128} m_e c^2 \alpha^4 \quad (29-12)$$

$$\langle W_D \rangle_{rs} = \frac{1}{16} m_e c^2 \alpha^4 \quad (30-12)$$

سرانجام، محاسبهٔ عناصر ماتریسی W_{SO} شامل عناصر ماتریسی "زاویه‌ای" از نوع $\langle l = 0, m_L = 0 | L_{x,y,z} | l = 0, m_L = 0 \rangle$ است، که به خاطر صفر بودن عدد کوانتومی l صفرند و از این رو

$$\langle W_{SO} \rangle_{rs} = 0 \quad (31-12)$$

بنابراین، زیرتراز $2s$ ، تحت تأثیر جملات ساختار ریز به صورت یک کل، نسبت به مکانی که در فصل ۷ محاسبه کردیم، به اندازه $5m_e c^2 \alpha^4 / 128 -$ انتقال می‌یابد.

ج) نمایش ماتریسی W_f در زیرتراز $2p$

۱. جملات W_D و W_{mv}

جملات W_D و W_{mv} با مؤلفه‌های مختلف L جابه‌جا می‌شوند، زیرا L فقط روی متغیرهای زاویه‌ای عمل می‌کند و با R و P^2 (که تنها از طریق L^2 به این متغیرها بستگی دارند؛ فصل ۷) جابه‌جا می‌شود. بنابراین، L با W_D و W_{mv} جابه‌جا می‌شود. و در نتیجه، W_D و W_{mv} نسبت به متغیرهای مداری، عملگرهای نرده‌ای هستند (مکمل ۲ از فصل ۶ بخش ۵ قسمت ب). چون W_D و W_{mv} روی متغیرهای اسپینی عمل نمی‌کنند، نتیجه می‌شود که ماتریسهای معرف W_{mv} و W_D در داخل زیرفضای $2p$ ، مضاربی از ماتریس یک‌هاند. محاسبهٔ ضریب تناسب در مکمل ۲ از فصل ۱۲ داده شده و منجر به مقادیر زیر می‌شود

$$\langle W_{mv} \rangle_{rp} = -\frac{7}{384} m_e c^2 \alpha^4 \quad (32-12)$$

$$\langle W_D \rangle_{rp} = 0 \quad (33-12)$$

نتیجه (۳۳-۱۲) از آنجا ناشی می شود که W_D متناسب با $\delta(\mathbf{R})$ است و از این رو، فقط در یک حالت s می تواند مقدار متوسط غیر صفر داشته باشد (به ازای $l \geq 1$ ، تابع موج در مبدأ صفر است).

۲. جمله W_{SO}

باید عناصر ماتریسی مختلف زیر را حساب کنیم

$$\langle n = 2; l = 1; s = \frac{1}{2}; m'_L; m'_S | \xi(R) \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} | n = 2; l = 1; s = \frac{1}{2}; m_L; m_S \rangle \quad (34-12)$$

که در آن

$$\xi(R) = \frac{e^{\alpha R}}{2m_e^2 c^2 R^2} \quad (35-12)$$

اگر از نمایش $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ استفاده کنیم، می توانیم قسمت شعاعی عنصر ماتریسی (۳۴-۱۲) را از قسمت های زاویه ای و اسپینی جدا کنیم. بنابراین به دست می آوریم

$$\xi_{2p}(l = 1; s = \frac{1}{2}; m'_L; m'_S | \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} | l = 1; s = \frac{1}{2}; m_L; m_S) \quad (36-12)$$

که در آن ξ_{2p} عددی برابر با انتگرال شعاعی زیر است

$$\xi_{2p} = \frac{e^{\alpha r}}{2m_e^2 c^2} \int_0^{\infty} \frac{1}{r^2} |R_{21}(r)|^2 r^2 dr \quad (37-12)$$

چون تابع شعاعی $R_{21}(r)$ حالت $2p$ را می دانیم، می توانیم ξ_{2p} را محاسبه کنیم. در نتیجه (رک مکمل ۲ از فصل ۱۲).

$$\xi_{2p} = \frac{1}{48\hbar^2} m_e c^2 \alpha^2 \quad (38-12)$$

به این ترتیب، متغیرهای شعاعی ناپدید می شوند. برطبق (۳۶-۱۲)، مسئله، به قطری کردن عملگر $\xi_{2p} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ ، که فقط روی متغیرهای زاویه ای و اسپینی عمل می کند، کاهش می یابد. برای نمایش عملگر $\xi_{2p} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ توسط یک ماتریس می توانیم چندین پایه متفاوت انتخاب کنیم:

— قبل از همه، پایه

$$\left\{ |l = 1; s = \frac{1}{2}; m_L; m_S \rangle \right\} \quad (39-12)$$

را انتخاب می‌کنیم که از ویژه‌حالت‌های مشترک L^z, S^z, L^2, S^2 ساخته می‌شود و تا به حال آن را به‌کار برده‌ایم؛

— یا، با معرفی تکانهٔ زاویه‌ای کل

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (40-12)$$

پایه

$$\left\{ |l = 1; s = \frac{1}{2}; J; m_J \rangle \right\} \quad (41-12)$$

که از ویژه‌حالت‌های مشترک بین L^z, S^z, J^z, L^2, S^2 ساخته می‌شود. بنابر نتایج فصل ۱۰، چون $l = 1$ و $s = 1/2$ ؛ J می‌تواند دو مقدار $J = 3/2$ و $J = 1 + 1/2 = 3/2$ و $J = 1 - 1/2 = 1/2$ را اختیار کند. از طرف دیگر می‌دانیم که چگونه به کمک ضرایب کلبش-گوردن [فرمول‌های (۳۶)]، مکمل ۱ از فصل ۱۰] از یک پایه به پایهٔ دیگر برویم.

اکنون نشان خواهیم داد که برای مسئله‌ای که در اینجا مطرح است، پایهٔ دوم (۴۱-۱۲) از پایهٔ اول بهتر است، زیرا $\xi_{r_p} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ در پایهٔ (۴۱-۱۲) قطری است. برای مشاهدهٔ این مطلب، دو طرف (۴۰-۱۲) را مجذور می‌کنیم. در نتیجه (\mathbf{L} و \mathbf{S} جابه‌جا می‌شوند)

$$\mathbf{J}^2 = (\mathbf{L} + \mathbf{S})^2 = \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + 2\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad (42-12)$$

که می‌دهد

$$\xi_{r_p} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2} \xi_{r_p} (\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2) \quad (43-12)$$

هر یک از بردارهای پایهٔ (۴۱-۱۲) یک ویژه‌حالت L^z, S^z, J^z است؛ از این رو داریم

$$\begin{aligned} \xi_{r_p} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} |l = 1; s = \frac{1}{2}; J; m_J \rangle \\ = \frac{1}{2} \xi_{r_p} \hbar^2 \left[J(J+1) - 2 - \frac{3}{4} \right] |l = 1; s = \frac{1}{2}; J; m_J \rangle \end{aligned} \quad (44-12)$$

از (۴۴-۱۲) مشاهده می‌کنیم که ویژه‌مقدارهای $\xi_{2p} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ به m_J بستگی ندارند و فقط به J وابسته هستند. به‌ازای $J = 1/2$ این ویژه‌مقدارها برابرند با

$$\frac{1}{2} \xi_{2p} \left[\frac{3}{4} - 2 - \frac{3}{4} \right] \hbar^2 = -\xi_{2p} \hbar^2 = -\frac{1}{48} m_e c^2 \alpha^2 \quad (45-12)$$

و به‌ازای $J = 3/2$

$$\frac{1}{2} \xi_{2p} \left[\frac{15}{4} - 2 - \frac{3}{4} \right] \hbar^2 = +\frac{1}{2} \xi_{2p} \hbar^2 = \frac{1}{96} m_e c^2 \alpha^2 \quad (46-12)$$

بنابراین، واگنی ۶-لای تراز $2p$ ، جزئاً توسط W_{SO} از بین می‌رود. یک تراز واگن ۴-لای مربوط به $J = 3/2$ ، و یک تراز واگن ۲-لای مربوط به $J = 1/2$ به‌دست می‌آوریم. واگنی $(2J + 1)$ -لای هر حالت J یک واگنی اساسی است که به ناوردایی W_J تحت تأثیر دوران مربوط است.

یادداشتها:

۱. در زیر فضای $2s$ ($l = 0, s = 1/2$)، فقط می‌تواند یک مقدار $J = 1/2 = 0 + 1/2$ را بپذیرد.

۲. در زیر فضای $2p$ ، W_{mv} و W_D با مضاربی از ماتریس یک‌ه نشان داده می‌شوند. این ویژگی در هر پایه‌ای معتبر باقی می‌ماند زیرا ماتریس یک‌ه بر اثر تغییر پایه، ناورداست. بنابراین، انتخاب پایه (۴۱-۱۲) که جمله W_{SO} ایجاب می‌کند، با جملات W_D و W_{mv} نیز سازگار است. ■

۳-۳-۱۲ نتایج: ساختار ریز تراز $n = 2$

الف) نمادگذاری طیف‌نمایی

علاوه بر اعداد کوانتومی n, l (و s)، در بحث پیش، عدد کوانتومی J نیز معرفی شد، که تصحیح انرژی مربوط به جفت‌شدگی اسپین مدار به آن وابسته است.

برای تراز $2s$ ، داریم $J = 1/2$ و برای تراز $2p$ ، $J = 1/2$ یا $J = 3/2$. عموماً تراز وابسته به یک مجموعه مقادیر n, l, J را با افزودن شاخص J به نماد معرف زیر پوسته (n, l) در نمادگذاری طیف‌نمایی مشخص می‌کنیم (فصل ۷ بخش ۷-۳-۴ قسمت ب)

که در آن، l نماینده حرف s برای $l = 0$ ، برای p ، $l = 1$ ، برای d ، $l = 2$ ، برای f ، $l = 3$ و ... است. بنابراین، تراز $n = 2$ اتم هیدروژن ترازهای $2s_{1/2}$ ، $2p_{1/2}$ ، $2p_{3/2}$ را می‌دهد.

(ب) مکان ترازهای $2s_{1/2}$ ، $2p_{1/2}$ و $2p_{3/2}$

اکنون می‌توانیم با دسته‌بندی مجدد نتایج بخش ۱۲-۳-۲ مکان ترازهای $2s_{1/2}$ ، $2p_{1/2}$ و $2p_{3/2}$ را نسبت به انرژی "مختل نشده" تراز $n = 2$ که در فصل ۷ محاسبه کردیم و مقدار $-\mu c^2 \alpha^2 / 8$ را برای آن به دست آوردیم، محاسبه کنیم.

بنابر نتایج بخش ۱۲-۳-۲ قسمت ب تراز $2s_{1/2}$ به اندازه

$$-\frac{5}{128} m_e c^2 \alpha^4 \quad (48-12)$$

پایین می‌آید.

بر طبق نتایج بخش ۱۲-۳-۲ قسمت ج، تراز $2p_{1/2}$ به اندازه

$$\left(-\frac{7}{384} - \frac{1}{48} \right) m_e c^2 \alpha^4 = -\frac{5}{128} m_e c^2 \alpha^4 \quad (49-12)$$

پایین می‌آید. از این رو، می‌بینیم که ترازهای $2s_{1/2}$ و $2p_{1/2}$ دارای انرژی یکسانی هستند. بنابر نظریه‌ای که در اینجا مطرح می‌شود، این واگنی برخلاف واگنی اساسی $(1 + 2J)$ -لای هر تراز J ، باید به‌عنوان یک واگنی تصادفی تلقی شود.

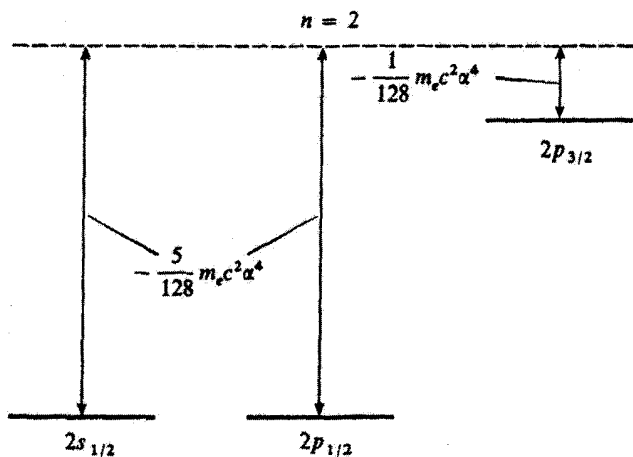
سرانجام، تراز $2p_{3/2}$ به اندازه

$$\left(-\frac{7}{384} + \frac{1}{96} \right) m_e c^2 \alpha^4 = -\frac{1}{128} m_e c^2 \alpha^4 \quad (50-12)$$

پایین می‌آید. این نتایج در شکل ۱۲-۲ نشان داده شده‌اند.

یادداشتها:

۱. تنها جفت‌شدگی اسپین-مدار است که عامل جدایی بین ترازهای $2p_{1/2}$ و $2p_{3/2}$ است، زیرا W_D و W_{ms} تمامی تراز $2p$ را به‌صورت یک کل انتقال می‌دهد.
۲. اتم هیدروژن می‌تواند با گسیل یک فوتون α لیمان ($\lambda = 1216 \text{ \AA}$) از حالت $2p$ به حالت $1s$ برود. مطالب ارائه شده در این فصل نشان می‌دهند که، به خاطر جفت‌شدگی اسپین-مدار،



شکل ۱۲-۲ ساختار ریز تراز $n = 2$ اتم هیدروژن تحت تأثیر هامیلتونی ساختار ریز W_f ، تراز $n = 2$ به سه تراز ساختار ریز تجزیه می‌شود، که آنها را به صورت $2s_{1/2}$ و $2p_{1/2}$ و $2p_{3/2}$ می‌نویسیم. مقادیر جبری انتقالها را، که تا مرتبه اول نسبت به W_f محاسبه شده‌اند، نشان داده‌ایم. انتقالها برای ترازهای $2s_{1/2}$ و $2p_{1/2}$ یکی است (نتیجه‌ای که علاوه بر این، برای تمام مرتبه‌های W_f معتبر است). وقتی طبیعت کوانتومی میدان الکترومغناطیسی را در نظر بگیریم، ملاحظه می‌کنیم که واگنی بین $2s_{1/2}$ و $2p_{1/2}$ برطرف می‌شود (انتقال لمب؛ شکل ۱۲-۴ را ببینید).

خط α -ی لیمان در واقع شامل دو خط نزدیک به هم $1s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$ و $1s_{1/2} \rightarrow 2p_{3/2}$ است که با اختلاف انرژی

$$\frac{4}{128} m_e c^2 \alpha^4 = \frac{1}{32} m_e c^2 \alpha^4$$

از هم جدا شده‌اند. بنابراین، وقتی با قدرت تفکیک کافی به آنها نگاه کنیم، خطوط طیفی هیدروژن یک "ساختار ریز" نشان می‌دهند.

۳. در شکل ۱۲-۲ ملاحظه می‌شود که دو تراز با J ی یکسان دارای انرژیهای متساوی هستند. این نتیجه، نه تنها تا مرتبه اول نسبت به W_f ، بلکه برای تمام مرتبه‌ها معتبر است. حل دقیق معادله دیراک، برای

۱. در حالت پایه، $l = 0$ و $s = 1/2$ بنابراین J فقط می‌تواند مقدار $J = 1/2$ را بپذیرد و از این رو، W_f واگنی حالت $1s$ را از بین نمی‌برد و فقط یک تراز ساختار ریز، تراز $1s_{1/2}$ وجود دارد. این یک مورد خاص است، زیرا حالت پایه تنها حالتی است که برای آن l لزوماً صفر است. به همین دلیل، در اینجا تراز برانگیخته $n = 2$ را جهت مطالعه انتخاب کرده‌ایم.

انرژی ترازوی که توسط اعداد کوانتومی J, s, l, m مشخص می‌شود. مقدار زیر را می‌دهد

$$E_{n,J} = m_e c^2 \left[1 + \alpha^2 \left(n - J - \frac{1}{2} + \sqrt{\left(J + \frac{1}{2} \right)^2 - \alpha^2} \right)^{-2} \right]^{-1/2} \quad (51-12)$$

می‌بینیم که انرژی فقط به n و J بستگی داشته و به l بستگی ندارد. اگر رابطه (۵۱-۱۲) را نسبت به توانهای α بسط محدود دهیم داریم

$$E_{n,J} = m_e c^2 - \frac{1}{2} m_e c^2 \alpha^2 \frac{1}{n^2} - \frac{m_e c^2}{2n^3} \left(\frac{n}{J + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \alpha^4 + \dots \quad (52-12)$$

جملهٔ اول، انرژی جرم سکون الکترون است. جملهٔ دوم، از نظریهٔ فصل ۷ نتیجه می‌شود. جملهٔ سوم، تصحیح تا مرتبهٔ اول نسبت به W_f را که در این فصل محاسبه کردیم، به دست می‌دهد.

۴. حتی در غیاب یک میدان خارجی و فوتونهای فرودی، باید وجود یک میدان الکترومغناطیسی افت‌وخیزکننده را در فضا در نظر بگیریم (مکمل ۱۰ از فصل ۵، بخش ۳-۴). این پدیده به طبیعت کوانتومی میدان الکترومغناطیسی مربوط است، که ما آن را در اینجا بررسی نمی‌کنیم. جفت‌شدگی بین اتم و این افت‌وخیزهای میدان الکترومغناطیسی، واگنی بین ترازهای $2s_{1/2}$ و $2p_{1/2}$ را برطرف می‌کند. تراز $2s_{1/2}$ نسبت به تراز $2p_{1/2}$ به اندازه کمیته که "انتقال لمب" نامیده می‌شود و از مرتبهٔ ۱۰۶۰ MHz است بالا می‌رود (شکل ۱۲-۴).

مطالعهٔ نظری و تجربی این پدیده، که در سال ۱۹۴۹ کشف شد، موضوع پژوهشهای زیادی بوده و به توسعهٔ الکترودینامیک کوانتومی نوین منجر شده است.

۱۲-۴ ساختار فوق ریز تراز $n = 1$

اینک منطقی به نظر می‌رسد که اثر W_{hf} را بر ترازهای ساختار ریز $2s_{1/2}$ ، $2p_{1/2}$ و $2p_{3/2}$ بررسی کنیم تا ببینیم که آیا برهم‌کنشهای مربوط به اسپین I پروتون باعث آشکار شدن یک ساختار فوق ریز در هر یک از این ترازها می‌شود یا خیر. اما، چون W_f واگنی حالت پایهٔ $1s$ را از بین نمی‌برد، ساده‌تر است که اثر W_{hf} را بر این حالت مطالعه کنیم. نتایجی که در این مورد خاص به دست می‌آید را می‌توانیم به آسانی به ترازهای $2s_{1/2}$ ، $2p_{1/2}$ و $2p_{3/2}$ تعمیم دهیم.

۱۲-۴-۱ بیان مسئله

الف) واگنی تراز $1s$

برای تراز $1s$ ، واگنی مداری وجود ندارد ($l = 0$). از طرف دیگر، مؤلفه‌های S_z و I_z متعلق به S و I هنوز می‌توانند دو مقدار بپذیرند: $m_S = \pm 1/2$ و $m_I = \pm 1/2$. از این رو، واگنی تراز $1s$

برابر با چهار است، و یک پایه ممکن در این تراز، توسط بردارهای زیر داده می شود

$$\left\{ \left| n = ۱; l = ۰; m_L = ۰; m_S = \pm \frac{1}{2}; m_I = \pm \frac{1}{2} \right\rangle \right\} \quad (۵۳-۱۲)$$

(ب) تراز ۱s ساختار ریز ندارد

نشان خواهیم داد که جمله W_f واگنی تراز ۱s را برطرف نمی کند.

جملات W_{mv} و W_D بر m_S و m_I عمل نمی کنند، و در زیر فضای ۱s توسط مضاربی از ماتریس یک‌گانه نشان داده می شوند. در نتیجه (مکمل ۲ از فصل ۱۲)

$$\langle W_{mv} \rangle_{1s} = -\frac{5}{8} m_e c^2 \alpha^4 \quad (۵۴-۱۲)$$

$$\langle W_D \rangle_{1s} = \frac{1}{4} m_e c^2 \alpha^4 \quad (۵۵-۱۲)$$

سرانجام، محاسبه عناصر ماتریسی جمله W_{SO} شامل عناصر ماتریسی "زاویه‌ای" $\langle l = ۰, m_L = ۰ | L_{x,y,z} | l = ۰, m_L = ۰ \rangle$ است، که مسلماً صفرند ($l = ۰$)؛ از این رو

$$\langle W_{SO} \rangle_{1s} = ۰ \quad (۵۶-۱۲)$$

در نتیجه، W_f صرفاً تراز ۱s را به صورت یک کل به اندازه مقدار زیر انتقال می دهد، بدون اینکه آن را تجزیه کند

$$\left(-\frac{5}{8} + \frac{1}{4} \right) m_e c^2 \alpha^4 = -\frac{1}{8} m_e c^2 \alpha^4 \quad (۵۷-۱۲)$$

این نتیجه را از قبل می توانستیم پیش بینی کنیم: چون $l = ۰$ و $s = 1/2$ ، J فقط می تواند یک مقدار، $J = 1/2$ بپذیرد و از این رو تراز ۱s فقط به یک تراز ساختار ریز، $1s_{1/2}$ منتهی می شود. چون هامیلتونی W_f ، تراز ۱s را تجزیه نمی کند، اکنون می توانیم اثر جمله W_{hf} را بررسی کنیم. برای این منظور، ابتدا باید ماتریسی را که معرف W_{hf} در تراز ۱s است محاسبه کنیم.

۱۲-۴-۲ نمایش ماتریسی W_{hf} در تراز ۱s

الف) جملات غیر از جمله تماسی

حال، نشان می دهیم که دو جمله اول W_{hf} [فرمول (۱۲-۲۳)] هیچ سهمی ندارند.

محاسبه سهم اولین جمله، $\mathbf{L} \cdot \mathbf{M}_I$ ، $-\frac{\mu_0}{4\pi} \frac{q}{m_e R^3}$ ، به عناصر ماتریسی "زاویه‌ای" $\langle l=0, m_L=0 | \mathbf{L} | l=0, m_L=0 \rangle$ منجر می‌شود، که مسلماً صفرند ($l=0$). همین‌طور، می‌توان نشان داد (مکمل ۲ از فصل ۱۱، بخش ۳) که عناصر ماتریسی جمله دوم (برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی) به خاطر تقارن کروی حالت ۱s، صفرند.

(ب) جمله تماسی

عناصر ماتریسی جمله آخر (۱۲-۲۳)، یعنی، جمله تماسی، به صورت زیر هستند

$$\left. \langle n=1; l=0; m_L=0; m'_S; m'_I \right| - \frac{2\mu_0}{3} \mathbf{M}_S \cdot \mathbf{M}_I \delta(\mathbf{R}) \left| n=1; l=0; m_L=0; m_S; m_I \right\rangle \quad (58-12)$$

اگر به نمایش $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ برویم، می‌توانیم قسمتهای مداری و اسپینی این عنصر ماتریسی را جدا کنیم و آن را به صورت زیر بنویسیم

$$\mathcal{A} \langle m'_S; m'_I | \mathbf{I} \cdot \mathbf{S} | m_S; m_I \rangle \quad (59-12)$$

که در آن \mathcal{A} یک عدد است که با رابطه زیر داده می‌شود

$$\begin{aligned} \mathcal{A} &= \frac{q^2}{3\epsilon_0 c^2} \frac{g_p}{m_e M_p} \langle n=1; l=0; m_L=0 | \delta(\mathbf{R}) | n=1; l=0; m_L=0 \rangle \\ &= \frac{q^2}{3\epsilon_0 c^2} \frac{g_p}{m_e M_p} \frac{1}{4\pi} |R_{10}(0)|^2 \\ &= \frac{4}{3} g_p \frac{m_e}{M_p} m_e c^2 \alpha^2 \left(1 + \frac{m_e}{M_p}\right)^{-2} \frac{1}{\hbar^2} \quad (60-12) \end{aligned}$$

در اینجا از روابطی که \mathbf{M}_I و \mathbf{M}_S را به \mathbf{I} و \mathbf{S} مربوط می‌کنند [۱۲-۲۱]، و همچنین از عبارتی که در بخش ۳-۴ قسمت ج از فصل ۷ برای تابع شعاعی $R_{10}(r)$ به دست آوردیم استفاده کرده‌ایم.^۱
۱. ضرب $(1 + m_e/M_p)^{-2}$ به خاطر این واقعیت در (۱۲-۶۰) ظاهر می‌شود که در $R_{10}(0)$ جرم کاهش یافته μ وارد شده است. اتفاقاً، برای جمله تماسی، صحیح است که اثر متناهی بودن جرم هسته‌ای را به این طریق منظور کنیم.

بنابراین، متغیرهای مداری کاملاً ناپدید می‌شوند، و مسئله‌ای که می‌ماند عبارت است از مسئله دو اسپین $1/2$ ، I و S ، که توسط برهم‌کنشی به صورت

$$\mathcal{H} \mathbf{I} \cdot \mathbf{S} \quad (61-12)$$

به هم جفت شده‌اند؛ \mathcal{H} یک ثابت است.

(ج) ویژه‌حالتها و ویژه‌مقدارهای جمله تماسی تا اینجا، برای نمایش عملگر $\mathcal{H} \mathbf{I} \cdot \mathbf{S}$ فقط پایه

$$\left\{ \left| s = \frac{1}{2}; I = \frac{1}{2}; m_S; m_I \right\rangle \right\} \quad (62-12)$$

را که از ویژه‌بردارهای مشترک بین S^z ، I^z ، S^2 ، I^2 تشکیل یافته است در نظر گرفته‌ایم. می‌توانیم همچنین با معرفی تکانه زاویه‌ای کل^۱

$$\mathbf{F} = \mathbf{S} + \mathbf{I} \quad (63-12)$$

پایه

$$\left\{ \left| s = 1; I = \frac{1}{2}; m_F; m_I \right\rangle \right\} \quad (64-12)$$

را که از ویژه‌حالت‌های مشترک S^z ، F^z ، I^z ، S^2 ، F^2 تشکیل شده است، به‌کار ببریم. چون $s = I = 1/2$ ، F می‌تواند فقط دو مقدار $F = 0$ و $F = 1$ را بپذیرد. می‌توانیم به کمک (۴۳-۱۰) و (۴۴-۱۰) در فصل ۱۰ به آسانی از یک پایه به پایه دیگر برویم.

پایه $\{|F, m_F\rangle\}$ بهتر از پایه $\{|m_S, m_I\rangle\}$ به کار مطالعه عملگر $\mathcal{H} \mathbf{I} \cdot \mathbf{S}$ می‌خورد، زیرا این عملگر در پایه $\{|F, m_F\rangle\}$ توسط یک ماتریس قطری نشان داده می‌شود (برای سهولت، صریحاً نمی‌نویسیم $s = 1/2$ و $I = 1/2$). این مطلب درست است، زیرا از (۶۳-۱۲) به‌دست می‌آوریم

$$\mathcal{H} = \mathbf{I} \cdot \mathbf{S} = \frac{\mathcal{H}}{2} (\mathbf{F}^2 - \mathbf{I}^2 - \mathbf{S}^2) \quad (65-12)$$

۱. تکانه زاویه‌ای کل در حقیقت عبارت است از $\mathbf{F} = \mathbf{L} + \mathbf{S} + \mathbf{I}$ ، یعنی $\mathbf{F} = \mathbf{J} + \mathbf{I}$. لیکن برای حالت پایه، تکانه زاویه‌ای مداری صفر است. بنابراین \mathbf{F} به (۶۳-۱۲) کاهش می‌یابد.

نتیجه اینکه، حالت‌های $|F, m_F\rangle$ ، ویژه‌حالت‌های $\mathcal{A} \mathbf{I} \cdot \mathbf{S}$ هستند

$$\mathcal{A} \mathbf{I} \cdot \mathbf{S} \left| F, m_F \right\rangle = \frac{\mathcal{A} \hbar^2}{2} [F(F+1) - I(I+1) - S(S+1)] \left| F, m_F \right\rangle \quad (۶۶-۱۲)$$

از (۶۶-۱۲) ملاحظه می‌کنیم که ویژه‌مقدارها فقط به F بستگی دارند و مستقل از m_F می‌باشند. این ویژه‌مقدارها به‌ازای $F = ۱$ برابرند با

$$\frac{\mathcal{A} \hbar^2}{2} \left[2 - \frac{3}{4} - \frac{3}{4} \right] = \frac{\mathcal{A} \hbar^2}{4} \quad (۶۷-۱۲)$$

و به‌ازای $F = ۰$ برابرند با

$$\frac{\mathcal{A} \hbar^2}{2} \left[۰ - \frac{3}{4} - \frac{3}{4} \right] = -\frac{3\mathcal{A} \hbar^2}{4} \quad (۶۸-۱۲)$$

بنابراین واگنی ۴-لای تراز $۱s$ به‌طور جزئی توسط W_{hf} از بین می‌رود. آنچه به‌دست می‌آوریم عبارت است از یک تراز با واگنی ۳-لای $F = ۱$ و یک تراز ناواگن $F = ۰$. واگنی $(2F+1)$ -لای تراز $F = ۱$ اساسی بوده و به ناوردایی W_{hf} تحت دوران سیستم کل مربوط می‌شود.

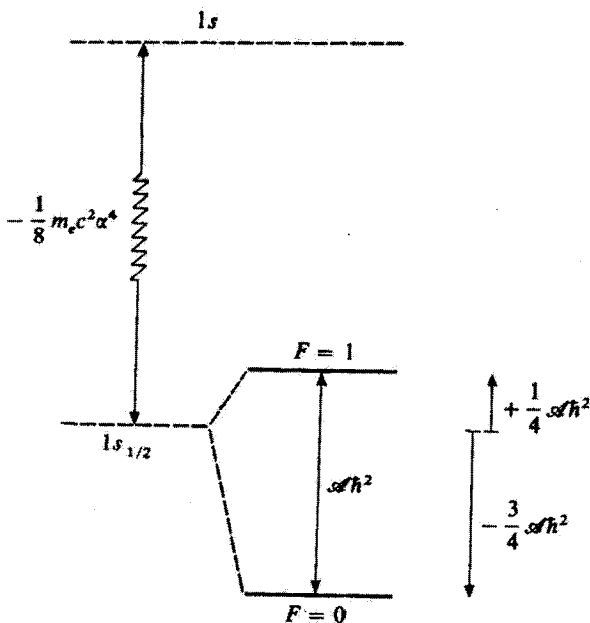
۱۲-۴-۳ ساختار فوق ریز تراز $۱s$

الف) مکان ترازاها

انرژی تراز $۱s$ تحت تأثیر W_f به اندازه $m_e c^2 \alpha^4 / 8$ نسبت به مقدار $\mu c^2 \alpha^2 / 2$ که در فصل ۷ محاسبه کردیم، پایین می‌رود. در این صورت، W_{hf} تراز $۱s_{1/2}$ را به دو تراز فوق ریز، که با انرژی $\mathcal{A} \hbar^2$ از یکدیگر جدا شده‌اند، تجزیه می‌کند (شکل ۱۲-۳). غالباً "ساختار فوق ریز حالت پایه" نامیده می‌شود.

یادداشت:

به‌طور مشابه می‌توان پی برد که، W_{hf} هر یک از ترازهای ساختار ریز $۲s_{1/2}$ ، $۲p_{1/2}$ و $۲p_{3/2}$ را به یک رشته ترازهای فوق ریز تجزیه می‌کند؛ این ترازاها با تمام مقادیر F که بین $J+I$ و $|J-I|$ واقع‌اند و به اندازهٔ یک واحد با هم اختلاف دارند متناظرند. برای ترازهای $۲s_{1/2}$ و $۲p_{1/2}$ ، داریم $J = ۱/2$. از این رو، F فقط دو مقدار $F = ۱$ و $F = ۰$ را می‌پذیرد. برای تراز $۲p_{3/2}$ ، داریم $J = 3/2$ ، و در نتیجه $F = ۲$ و $F = ۱$ (شکل ۱۲-۴) را نگاه کنید). ■



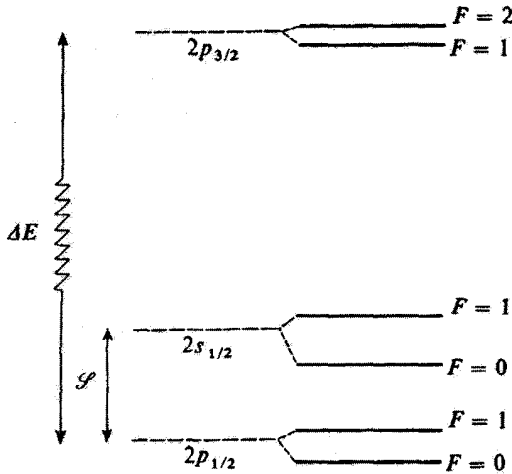
شکل ۳-۱۲ ساختار فوق ریز تراز ۱ n اتم هیدروژن. تراز ۱ m، تحت اثر W_F ، یک انتقال کلی پیدا می‌کند که برابر است با $-m_e c^2 \alpha^4 / 8$ ؛ $J = -m_e c^2 \alpha^4 / 8$ فقط می‌تواند یک مقدار بپذیرد، $J = 1/2$. وقتی جفت‌شدگی فوق ریز W_{hf} را منظور می‌کنیم، تراز $1s_{1/2}$ به دو تراز فوق ریز $F=0$ و $F=1$ تجزیه می‌شود. انتقال فوق ریز $F=1 \leftrightarrow F=0$ (خط طیفی ۲۱ سانتی‌متری بررسی شده در اخترشناسی رادیویی) دارای بسامدی است که به‌طور تجربی تا ۱۲ رقم با معنی شناخته شده است (به کمک میز هیدروژنی).

ب) اهمیت ساختار فوق ریز تراز ۱s

ساختار فوق ریز حالت پایه اتم هیدروژن یک کمیت فیزیکی است که در حال حاضر تا بالاترین رقم معنی‌دار شناخته شده است. این کمیت برحسب Hz برابر است با^۱

$$\frac{\omega \hbar}{2\pi} = 1420405751.768 \pm 0.001 \text{ Hz} \quad (69-12)$$

چنین درجه بالایی از دقت تجربی، در سال ۱۹۶۳ با ابداع "میزر هیدروژنی" امکان‌پذیر شد. اساس این وسیله، به‌طور بسیار طرح‌وار، به شرح زیر است: انتهای هیدروژنی را که در تراز فوق ریز ۱ بدیهی است که محاسبات آمده در این فصل از پیش‌بینی تمام این ارقام معنی‌دار کاملاً ناتوان است. به‌علاوه، حتی پیشرفته‌ترین نظریه‌ها، در حال حاضر، نمی‌توانند بیش از پنج یا شش رقم (۶۹-۱۲) را تشریح کنند.



شکل ۱۲-۴ ساختار فوق ریز تراز $n=2$ اتم هیدروژن. فاصله \mathcal{M} بین دو تراز $2s_{1/2}$ و $2p_{1/2}$ انتقال لمب است، که در حدود ده مرتبه از شکافتگی ساختار ریز ΔE که دو تراز $2p_{1/2}$ و $2p_{3/2}$ را از هم جدا می‌کند، کوچکتر است ($\Delta E \approx 10969.1 \text{ MHz}$; $\mathcal{M} \approx 1057.8 \text{ MHz}$). وقتی جفت شدگی فوق ریز $W_{H,F}$ را منظور می‌کنیم، هر تراز به دو زیرتراز فوق ریز تجزیه می‌شود (مقدار متناظر عدد کوانتومی F در سمت راست شکل نشان داده شده است). شکافتگیهای فوق ریز برای تراز $2p_{3/2}$ برابر با 237 MHz ، برای تراز $2s_{1/2}$ برابر 177.56 MHz و برای تراز $2p_{1/2}$ برابر با 59.19 MHz است (جهت واضح ساختن شکل، مقیاس رعایت نشده است).

بالایی $F=1$ قرار دارند، قبلاً (با یک گزینش مغناطیسی از نوع اشترن-گرلاخ) جدا و در یک ظرف شیشه‌ای ذخیره می‌کنند (آرایش، نظیر آرایشی است که در شکل ۶ از مکمل ۶ فصل ۴ آمده است). این امر، یک محیط تقویت‌کننده برای بسامد فوق ریز $[E(F=1) - E(F=0)]/h$ ایجاد می‌کند. اگر ظرف را در کاواکی که در بسامد فوق ریز کوک شده است، قرار دهیم، و اگر بهره کاواک بیش از اتلاف آن باشد، سیستم ناپایدار می‌شود و می‌تواند نوسان کند؛ در این صورت یک «نوسانگر اتمی» (یک میزرا) تولید می‌شود. بسامد نوسانگر، بسیار پایدار و از خلوص طیفی بالایی برخوردار است. اندازه‌گیری آن مستقیماً مقدار شکافتگی فوق ریز را برحسب Hz به دست می‌دهد. بالاخره، توجه کنید که اتمهای هیدروژن در فضای میان ستاره‌ای، با تابشی که به طور خودبه‌خود هنگام رفتن از تراز فوق ریز $F=1$ به تراز فوق ریز $F=0$ حالت پایه گسیل می‌کنند (این گذار متناظر است با یک طول موج ۲۱ سانتی‌متر)، در اخترشناسی رادیویی آشکارسازی می‌شوند. اغلب اطلاعاتی که درباره ابرهای هیدروژنی میان ستاره‌ای داریم، از مطالعه این خط ۲۱ سانتی‌متری فراهم شده است.

۵-۱۲ اثر زیمان ساختار فوق ریز حالت پایه ۱s

۱-۵-۱۲ بیان مسئله

الف) هامیلتونی زیمان W_Z

اکنون فرض می‌کنیم که اتم در یک میدان مغناطیسی یکنواخت ایستای B_0 که موازی Oz است قرار داده شده باشد. این میدان، با گشتاورهای مغناطیسی مختلفی که در اتم وجود دارند (گشتاورهای مغناطیسی مداری و اسپینی الکترون، $M_L = q/2m_e L$ و $M_S = q/m_e S$ و گشتاور مغناطیسی هسته، $M_I = -qg_p/2M_p I$) [رابطه (۱۲-۲۱)]، برهم‌کنش می‌کند.

بنابراین، هامیلتونی زیمان W_Z را که انرژی برهم‌کنش اتم با میدان B_0 را توصیف می‌کند می‌توانیم به صورت زیر بنویسیم

$$\begin{aligned} W_Z &= -B_0 \cdot (M_L + M_S + M_I) \\ &= \omega_0(L_z + 2S_z) + \omega_n I_z \end{aligned} \quad (70-12)$$

که در آن، ω_0 (بسامد زاویه‌ای لارمور در میدان B_0) و ω_n با روابط زیر تعریف می‌شود

$$\left\{ \begin{aligned} \omega_0 &= -\frac{q}{2m_e} B_0 \end{aligned} \right. \quad (71-12)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \omega_n &= \frac{q}{2M_p} g_p B_0 \end{aligned} \right. \quad (72-12)$$

چون $M_p \gg m_e$ ، به‌وضوح داریم

$$|\omega_0| \gg |\omega_n| \quad (73-12)$$

یادداشت:

به‌طور دقیق، W_Z شامل جمله دیگری نیز هست (جمله دیامغناطیسی) که نسبت به B_0 از درجه دوم است. این جمله روی متغیرهای اسپینی الکترونی و هسته‌ای عمل نمی‌کند و صرفاً تراز ۱s را، بدون اینکه نمودار زیمان آن را تغییر دهد، به صورت یک کل انتقال می‌دهد؛ ما این جمله را بعداً مطالعه خواهیم کرد. علاوه بر این، این جمله خیلی کوچکتر از (۱۲-۷۰) است. یادآور می‌شویم که بررسی مفصل اثر جمله دیامغناطیسی در شکل ۴ از فصل ۷ آمده است. ■

ب) اختلالی که توسط تراز $1s$ دیده می‌شود

در این بخش، می‌خواهیم اثر W_Z را بر روی حالت پایهٔ $1s$ اتم هیدروژن مطالعه کنیم (مورد تراز $n = 2$ کمی پیچیده‌تر است زیرا، در یک میدان مغناطیسی صفر، این تراز هم دارای یک ساختار ریز و هم دارای یک ساختار فوق ریز است، در حالی که تراز $n = 1$ فقط دارای یک ساختار فوق ریز است؛ با وجود این اساس محاسبه یکی است). حتی در قویترین میدانهایی که می‌توان در آزمایشگاه تولید کرد، W_Z از فاصلهٔ بین تراز $1s$ و سایر ترازها خیلی کوچکتر است؛ در نتیجه، اثر آن را می‌توان توسط نظریهٔ اختلال بررسی کرد.

اثر یک میدان مغناطیسی بر روی یک تراز انرژی اتمی را "اثر زیمن" می‌گویند. اگر B_0 را روی محور x ها و انرژیهای زیرترازهای مختلفی که این میدان ایجاد می‌کنند را روی محور y ها ببریم، یک نمودار زیمن به دست می‌آید.

اگر B_0 به قدر کافی قوی باشد، هامیلتونی زیمن W_Z می‌تواند از همان مرتبهٔ بزرگی هامیلتونی فوق ریز W_{hf} ، یا حتی بزرگتر از آن باشد. از طرف دیگر، اگر B_0 خیلی ضعیف باشد، $W_Z \ll W_{hf}$. بنابراین، عموماً، نمی‌توان اهمیت نسبی W_Z و W_{hf} را تعیین کرد. برای به دست آوردن انرژیهای زیرترازهای مختلف، باید $(W_Z + W_{hf})$ را در تراز $n = 1$ قطری کنیم. در بخش ۱۲-۴-۲ نشان دادیم که محدود بودن W_{hf} به تراز $n = 1$ را می‌توان به صورت $\mathcal{H} \cdot \mathbf{S}$ نوشت. با استفاده از رابطهٔ (۱۲-۷۰) برای W_Z ، مشاهده می‌کنیم که باید عناصر ماتریسی از نوع زیر را نیز محاسبه کنیم

$$\langle n = 1; l = 0; m_L = 0; m'_S; m'_T | \omega_0 (L_z + 2S_z) + \omega_n I_z | n = 1; l = 0; m_L = 0; m_S; m_T \rangle \quad (۱۲-۷۴)$$

سهم $\omega_0 L_z$ برابر صفر است، زیرا l و m_L صفرند. چون $\omega_0 S_z + \omega_n I_z$ فقط روی متغیرهای اسپینی عمل می‌کند، می‌توانیم، برای این جمله، قسمت مداری عنصر ماتریسی:

$$\langle n = 1; l = 0; m_L = 0 | n = 1; l = 0; m_L = 0 \rangle = 1 \quad (۱۲-۷۵)$$

را از قسمت اسپینی جدا کنیم.

در نتیجه، باید با صرف نظر کردن از اعداد کوانتومی m, l, m_L عملگر

$$\mathcal{H} \cdot \mathbf{S} + 2\omega_0 S_z + \omega_n I_z \quad (۱۲-۷۶)$$

۱. به خاطر بیاورید که W_f تراز $1s$ را به صورت یک کل انتقال می‌دهد؛ لذا نمودار زیمن را نیز به صورت یک کل انتقال خواهد داد.

را که فقط روی درجات آزادی اسپین عمل می‌کند، قطری کنیم. برای این منظور می‌توانیم از پایه $\{|m_S, m_I\rangle\}$ و یا از پایه $\{|F, m_F\rangle\}$ استفاده کنیم.

بنابر (۱۲-۷۳)، آخرین جمله (۱۲-۷۶) خیلی کوچکتر از جمله دوم آن است. برای ساده کردن بحث، از این به بعد از جمله $\omega_n I_z$ صرف‌نظر خواهیم کرد (البته، می‌توانستیم آن را هم منظور کنیم^۱). بنابراین، اختلال "دیده شده" توسط تراز ۱s را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\mathcal{H} \mathbf{I} \cdot \mathbf{S} + 2\omega_0 S_z \quad (۷۷-۱۲)$$

ج) حوزه‌های مختلف قدرت میدان

می‌توانیم با تغییر دادن B_0 ، بزرگی جمله زیمان $2\omega_0 S_z$ را به‌طور پیوسته تغییر دهیم. سه قدرت میدان مختلف را، که با مرتبه‌های بزرگی نسبی جمله فوق ریز و جمله زیمان تعیین می‌شوند، در نظر خواهیم گرفت

$$\hbar\omega_0 \ll \mathcal{H} \hbar^2 : \text{میدانهای ضعیف} \quad (۱)$$

$$\hbar\omega_0 \gg \mathcal{H} \hbar^2 : \text{میدانهای قوی} \quad (۲)$$

$$\hbar\omega_0 \simeq \mathcal{H} \hbar^2 : \text{میدانهای متوسط} \quad (۳)$$

بعداً خواهیم دید که می‌توانیم عملگر (۱۲-۷۷) را دقیقاً قطری کنیم. اما، جهت ارائه یک مثال مخصوصاً ساده از نظریه اختلال، روش نسبتاً متفاوتی را در موارد (۱) و (۲) به‌کار خواهیم برد. در مورد (۱)، $2\omega_0 S_z$ را نسبت به $\mathcal{H} \mathbf{I} \cdot \mathbf{S}$ مانند یک اختلال در نظر خواهیم گرفت. از طرف دیگر، در مورد (۲)، $\mathcal{H} \mathbf{I} \cdot \mathbf{S}$ را نسبت به $2\omega_0 S_z$ به صورت یک اختلال در نظر می‌گیریم. قطری کردن دقیق مجموعه دو عملگر، که در مورد (۳) ضروری است، به ما امکان خواهد داد تا نتایج گذشته را آزمایش کنیم.

۱۲-۵-۲ اثر زیمان در میدان ضعیف

ویژه‌حالتها و ویژه‌مقدارهای $\mathcal{H} \mathbf{I} \cdot \mathbf{S}$ را قبلاً تعیین کردیم (بخش ۱۲-۴-۲). از این رو، دو تراز مختلف به‌دست می‌آوریم: تراز با واگنی ۳-لای

$$\{|F = 1; m_F = -1, 0, +1\rangle\}$$

۱. این همان کاری است که در مکمل ۳ از فصل ۱۲ انجام می‌دهیم؛ در آنجا سیستمهای هیدروژن مانند (میونوم، پوزیترونوم) را که برای آنها نمی‌توان از گشتاور مغناطیسی یکی از دو ذره صرف‌نظر کرد، مورد مطالعه قرار می‌دهیم.

با انرژی $\mathcal{H} \hbar^2/4$ و تراز ناواگن $\{|F = 0; m_F = 0\rangle\}$ با انرژی $3\mathcal{H} \hbar^2/4$. چون $2\omega_0 S_z$ را نسبت به $\mathcal{H} \mathbf{I} \cdot \mathbf{S}$ نظیر یک اختلال در نظر می‌گیریم، اکنون باید دو ماتریس معرف $2\omega_0 S_z$ در دو تراز $F = 0$ و $F = 1$ را که متناظر با دو ویژه‌مقدار متمایز $\mathcal{H} \mathbf{I} \cdot \mathbf{S}$ هستند، جداگانه قطری کنیم.

الف) نمایش ماتریسی S_z در پایهٔ $\{|F, m_F\rangle\}$

چون بعداً به ماتریسی که معرف S_z در پایهٔ $\{|F, m_F\rangle\}$ است احتیاج داریم، ابتدا این ماتریس را می‌نویسیم (برای مسئله‌ای که در اینجا مورد نظر ماست، کافی خواهد بود که دو زیر ماتریس متناظر با زیرفضاهای $F = 0$ و $F = 1$ را بنویسیم).

با به‌کار بردن فرمولهای (۲۲-۱۰) و (۲۳-۱۰) از فصل ۱۰، به‌سادگی به‌دست می‌آوریم

$$\begin{cases} S_z |F = 1; m_F = 1\rangle &= \frac{\hbar}{2} |F = 1; m_F = 1\rangle \\ S_z |F = 1; m_F = 0\rangle &= \frac{\hbar}{2} |F = 0; m_F = 0\rangle \\ S_z |F = 1; m_F = -1\rangle &= -\frac{\hbar}{2} |F = 1; m_F = -1\rangle \\ S_z |F = 0; m_F = 0\rangle &= \frac{\hbar}{2} |F = 1; m_F = 0\rangle \end{cases} \quad (78-12)$$

که برای ماتریس معرف S_z در پایهٔ $\{|F, m_F\rangle\}$ (بردارهای پایه را به‌صورت $|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle, |0, 0\rangle$ مرتب می‌کنیم) عبارت زیر را می‌دهد

$$(S_z) = \frac{\hbar}{2} \times \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \\ \hline 0 & 0 & -1 & 0 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline \end{array} \quad (79-12)$$

یادداشت:

خوب است ماتریس بالا را با ماتریس معرف F_z در همان پایه مقایسه کنیم

$$(F_z) = \hbar \times \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & -1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline \end{array} \quad (80-12)$$

قبل از هر چیز مشاهده می‌کنیم که این دو ماتریس با یکدیگر متناسب نیستند: ماتریس (F_z) قطری است، در حالی که (S_z) قطری نیست.

اما، اگر مطالعه خود را به محدودبودنهای دو ماتریس در زیرفضای $F = 1$ [که در عبارات (۱۲-۷۹) و (۱۲-۸۰) با خطوط پر رنگتر محدود شده‌اند] محدود کنیم، ملاحظه می‌کنیم که این دو ماتریس با یکدیگر متناسب‌اند. اگر تصویرگر بر روی زیرفضای $F = 1$ را به P_1 نمایش دهیم (مکمل B ، فصل ۲، جلد اول، کتاب فارسی)، داریم

$$P_1 S_z P_1 = \frac{1}{4} P_1 F_z P_1 \quad (۸۱-۱۲)$$

به سادگی می‌توانیم نشان دهیم که همان رابطه، بین S_x و F_x از یک طرف و بین S_y و F_y از طرف دیگر، وجود دارد.

بنابراین، یک حالت خاص از قضیهٔ ویگنر-اکارت (مکمل ۴ فصل ۱۰، جلد سوم، کتاب فارسی)، به‌دست آورده‌ایم، که بنابر آن، در یک ویژه‌زیرفضای معین از تکانهٔ زاویه‌ای کل، تمام ماتریسهای معرف عملگرهای برداری، با یکدیگر متناسب‌اند. از این مثال روشن است که این تناسب فقط برای محدودبودنهای عملگرها به یک ویژه‌زیرفضای معین از تکانهٔ زاویه‌ای کل وجود دارد و نه برای خود عملگرها.

به‌علاوه، ضریب تناسب $1/2$ در (۸۱-۱۲) را می‌توانیم بلافاصله از قضیهٔ تصویر به‌دست آوریم. بنابر فرمول (۳۰) از مکمل ۵، فصل ۱۰، جلد سوم، کتاب فارسی، این ضریب برابر است با

$$\frac{\langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{F} \rangle_{F=1}}{\langle \mathbf{F}^2 \rangle_{F=1}} = \frac{F(F+1) + s(s+1) - I(I+1)}{2F(F+1)} \quad (۸۲-۱۲)$$

چون $s = I = 1/2$ ، یقیناً برابر با $1/2$ است.

ب) ویژه‌حالتها و ویژه‌مقدارهای میدان ضعیف

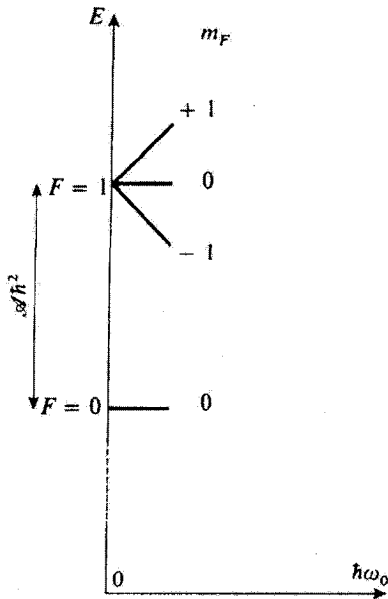
بنابر نتایج بخش الف، ماتریس معرف S_z را در تراز $F = 1$ می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$\hbar\omega_0$	۰	۰
۰	۰	۰
۰	۰	$-\hbar\omega_0$

(۸۳-۱۲)

در تراز $F = 0$ ، این ماتریس به عدد ۰ تقلیل می‌یابد.

چون این دو ماتریس قطری هستند، می‌توانیم بلافاصله ویژه‌حالتها و ویژه‌مقدارهای میدان ضعیف (تا مرتبهٔ



شکل ۱۲-۵ نمودار زیمان در میدان ضعیف حالت پایه $1s$ اتم هیدروژن. تراز فوق ریز $F=1$ به سه تراز متساوی الفاصله تجزیه می‌شود که هر کدام از آنها با یک مقدار کاملاً معین عدد کوانتومی m_F متناظر است. تراز $F=0$ تا مرتبهٔ اول نسبت به ω_0 دستخوش هیچ انتقالی نمی‌شود.

صفر در ω_0 و ویژه‌مقدارهای آن (تا مرتبهٔ اول در ω_0) را پیدا کنیم

ویژه‌مقدارها	ویژه‌حالتها
$ F=1; m_F=1\rangle \leftrightarrow \frac{\mathcal{A}\hbar^2}{4} + h\omega_0$	
$ F=1; m_F=0\rangle \leftrightarrow \frac{\mathcal{A}\hbar^2}{4} + 0$	
$ F=1; m_F=-1\rangle \leftrightarrow \frac{\mathcal{A}\hbar^2}{4} - h\omega_0$	
$ F=0; m_F=0\rangle \leftrightarrow -\frac{3\mathcal{A}\hbar^2}{4} + 0$	

(۸۴-۱۲)

در شکل ۱۲-۵، $h\omega_0$ را روی محور x و انرژیهای چهار زیرتراز زیمان را روی محور y ها برده‌ایم (نمودار زیمان). در یک میدان صفر، دو تراز فوق ریز، $F=1$ و $F=0$ را داریم.

وقتی میدان B_0 را برقرار می‌کنیم، زیرتراز $\langle F=0, m_F=0 \rangle$ ، که ناواکن است، به‌صورت افقی شروع می‌شود؛ اما در مورد تراز $F=1$ ، واگنی ۳-لای آن کاملاً برطرف می‌شود: سه زیرتراز متساوی‌الفاصله به‌دست می‌آید، که به‌صورت خطی با $\hbar\omega_0$ تغییر می‌کنند و شیب آنها به‌ترتیب برابر $(+1, 0, -1)$ است.

بررسی اخیر تا وقتی معتبر است که اختلاف $\hbar\omega_0$ بین دو زیرتراز زمانی متوالی تراز $F=1$ ، خیلی کوچکتر از اختلاف بین ترازهای $F=0$ و $F=1$ در میدان صفر (ساختار فوق ریز) باقی بماند. یادداشت:

با استفاده از قضیهٔ وِیگنر-اکارت می‌توان نشان داد که، در یک تراز مفروض F از تکانهٔ زاویه‌ای کل، هامیلتونی \hat{H} در میدان $(L_z + 2S_z)$ توسط ماتریسی که متناسب با F_z است نشان داده می‌شود. از این رو، اگر تصویرگر بر تراز F را با P_F نشان دهیم، می‌توانیم بنویسیم

$$P_F[\omega_0(L_z + 2S_z)]P_F = g_F\omega_0 P_F F_z P_F \quad (۱۲-۸۵)$$

■ g_F ضریب لاندّه حالت F نامیده می‌شود. در موردی که در اینجا مورد نظر ماست، $g_{F=1} = 1$.

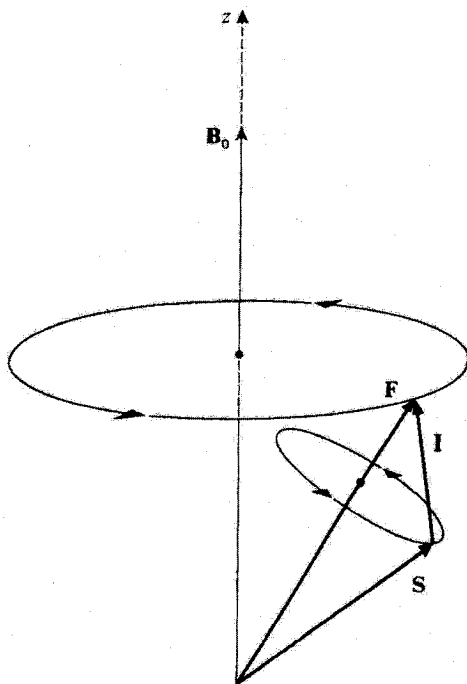
ج) بسامدهای بور مؤثر در تحول $\langle F \rangle$ و $\langle S \rangle$ ، مقایسه با مدل برداری اتم

در این بخش، بسامدهای مختلف بور را که در تحول $\langle F \rangle$ و $\langle S \rangle$ ظاهر می‌شوند تعیین می‌کنیم، و نشان می‌دهیم که بعضی از جنبه‌های نتایج حاصل، یادآور نتایجی است که توسط مدل برداری اتم (مکمل ۶، فصل ۱۰، جلد سوم، کتاب فارسی) به‌دست می‌آیند.

قبل از هر چیز پیش‌بینیهای مدل برداری اتم را (که در آن، تکانه‌های زاویه‌ای مختلف را نظیر بردارهای کلاسیک در نظر می‌گیریم) تا آنجا که به جفت‌شدگی فوق ریز بین \mathbf{S} و \mathbf{I} مربوط می‌شود، به اختصار مرور خواهیم کرد. در یک میدان صفر، $\mathbf{F} = \mathbf{I} + \mathbf{S}$ یک ثابت حرکت است. \mathbf{S} و \mathbf{I} حول برآیندشان، \mathbf{F} ، با یک سرعت زاویه‌ای که با ثابت جفت‌شدگی $\hbar\omega_0$ بین \mathbf{S} و \mathbf{I} متناسب است حرکت تقدیمی انجام می‌دهند. اگر علاوه بر این، سیستم را در میدان ایستای ضعیف B_0 که موازی Oz است قرار دهیم، به حرکت تقدیمی سریع \mathbf{I} و \mathbf{S} حول \mathbf{F} یک حرکت تقدیمی کند مربوط به \mathbf{F} حول Oz افزوده خواهد شد (حرکت تقدیمی لارمور؛ شکل ۱۲-۶).

بنابراین، F_z یک ثابت حرکت است، در حالی که S_z دارای یک قسمت ایستا (تصویر مؤلفهٔ موازی با \mathbf{F} بردار \mathbf{S} ، روی Oz)، و یک قسمت دیگر است که توسط بسامد حرکت تقدیمی فوق ریز مدوله شده است، (تصویر مؤلفهٔ عمود بر \mathbf{F} بردار \mathbf{S} روی Oz)، که حول \mathbf{F} حرکت تقدیمی می‌کند.

حال این نتایج نیمه کلاسیک را با نتایج نظریهٔ کوانتومی که قبلاً در این بخش ارائه کردیم، مقایسه می‌کنیم. برای این کار، باید تحول زمانی مقادیر متوسط $\langle F_z \rangle$ و $\langle S_z \rangle$ را بررسی کنیم. بر طبق بحث بخش D-۳-d از فصل ۳، مقدار متوسط $\langle G \rangle(t)$ کمیت فیزیکی G ، شامل یک رشته مؤلفه‌هایی است که در بسامدهای



شکل ۶-۱۲ حرکت S ، I ، و F در مدل برداری اتم S و I ، تحت تأثیر جفت‌شدگی فوق ریز سریعاً حول F حرکت تقدیمی انجام می‌دهند. در یک میدان ضعیف، F به گزندی حول B حرکت تقدیمی انجام می‌دهد (حرکت تقدیمی لارمور).

مختلف $(E - E')/\hbar$ بور سیستم نوسان می‌کنند. همچنین، یک بسامد معین بور تنها زمانی در $\langle G \rangle(t)$ ظاهر می‌شود که عنصر ماتریسی G بین حالت‌های متناظر با دو انرژی مخالف صفر باشد. در مسئله‌ای که در اینجا مورد نظر ماست، ویژه‌حالت‌های هامیلتونی میدان ضعیف، حالت‌های $|F, m_F\rangle$ هستند. حال، دو ماتریس (۷۹-۱۲) و (۸۰-۱۲) را که معرف S_z و F_z در این پایه‌اند، در نظر بگیرید. چون فقط دارای عناصر قطری است، هیچ بسامد بور مخالف صفری نمی‌تواند در $\langle F_z \rangle(t)$ ظاهر شود: از این رو $\langle F_z \rangle$ ایستاست، از طرف دیگر، S_z نه تنها دارای عناصر قطری است (که یک مؤلفهٔ ایستای $\langle S_z \rangle$ به آن وابسته است)، بلکه دارای یک عنصر غیر قطری بین حالت‌های $|F = 1, m_F = 0\rangle$ و $|F = 0, m_F = 0\rangle$ نیز هست، که بتاب جدول (۸۴-۱۲) (یا شکل ۵-۱۲) اختلاف انرژی آنها برابر $\hbar \omega$ است. در نتیجه $\langle S_z \rangle$ ، علاوه بر یک مؤلفهٔ ایستا یک مؤلفهٔ مدوله‌شده در بسامد زاویه‌ای ω نیز دارد. این نتیجه یادآور نتیجه‌ای است که با استفاده از مدل برداری اتم به‌دست آوردیم.^۱

۱. همچنین می‌توانیم تشابهی بین تحول $\langle F_x \rangle$ ، $\langle S_x \rangle$ ، $\langle F_y \rangle$ ، $\langle S_y \rangle$ و تحول تصاویر بردارهای (F) و (S) از شکل ۶-۱۲ بر روی Ox و Oy به‌دست آوریم. اما حرکت (F) و (S) کاملاً بر حرکت‌های نکانه‌های زاویه‌ای کلاسیک

یادداشت:

می‌توانیم رابطه‌ای بین نظریه اختلال و مدل برداری اتم برقرار کنیم. تأثیر میدان ضعیف B بر ترازهای $F = 0$ و $F = 1$ را می‌توانیم به این ترتیب به دست آوریم که در هامیلتونی زیمان S_z ، 2ω فقط عناصر ماتریسی در ترازهای $F = 0$ و $F = 1$ را نگاه داریم و عنصر ماتریسی S_z بین $(F = 1; m_F = 0)$ و $(F = 0; m_F = 0)$ را "نادیده" بگیریم. با ادامه این طریق، همچنین مؤلفه مدوله شده (S_z) را که متناسب با این عنصر ماتریسی است "نادیده" می‌گیریم. بنابراین فقط مؤلفه موازی (F) بردار (S) را نگاه می‌داریم. حال، این دقیقاً همان چیزی است که در مدل برداری اتم هنگام تعیین انرژی برهم‌کنش با میدان B انجام می‌دهیم. در یک میدان ضعیف، حرکت تقدیمی F حول B خیلی کندتر است از حرکت تقدیمی S حول F . بنابراین برهم‌کنش B با مؤلفه عمود بر F بردار S به طور متوسط هیچ اثری ندارد؛ فقط تصویر S بر F به حساب می‌آید. به این ترتیب است که، به عنوان مثال، ضریب لاندو را محاسبه می‌کنیم. ■

۱۲-۵-۳ اثر زیمان در میدان قوی

اکنون باید از قطری کردن جمله زیمان شروع کنیم.

الف) ویژه حالتها و ویژه مقادارهای جمله زیمان

این جمله در پایه $\{|m_S, m_I\rangle\}$ قطری است

$$2\omega_0 S_z |m_S, m_I\rangle = 2m_S \hbar \omega_0 |m_S, m_I\rangle \quad (۸۶-۱۲)$$

چون $m_S = \pm 1/2$ ، ویژه مقادارها برابرند با $\pm \hbar \omega_0$. بنابراین، به دلیل دو مقدار ممکن m_I ، هر کدام از اینها دو بار واگن‌اند. از این رو داریم

$$\begin{cases} 2\omega_0 S_z |+, \pm\rangle = +\hbar \omega_0 |+, \pm\rangle \\ 2\omega_0 S_z |-, \pm\rangle = -\hbar \omega_0 |-, \pm\rangle \end{cases} \quad (۸۷-۱۲)$$

ب) اثرات جمله فوق ریز، به عنوان یک اختلال

تصحیحات تا مرتبه اول نسبت به \mathcal{H} را می‌توانیم با قطری کردن محدودبودنهای عملگر $\mathbf{I} \cdot \mathbf{S}$ به دو زیرفضای $\{|+, \pm\rangle\}$ و $\{|-, \pm\rangle\}$ ، که با دو ویژه مقدار متفاوت S_z ، $2\omega_0$ متناظرند، به دست آوریم.

منطبق نمی‌شود. به ویژه قدرمطلق (S) لزوماً ثابت نیست (در مکانیک کوانتومی $\langle S^2 \rangle \neq \langle S \rangle^2$)؛ بحث مکمل ϵ ، فصل ۱۰، جلد سوم، کتاب فارسی.

۱. برای ساده کردن قرارداد اغلب به جای $|m_S, m_I\rangle$ ، خواهیم نوشت: (ϵ_S, ϵ_I) ، که ϵ_S و ϵ_I بسته به علامتهای

m_S و m_I برابرند با $+$ یا $-$.

قبل از هر چیز، توجه کنید که در هر یک از این دو زیرفضا، دو بردار پایهٔ $|+, +\rangle$ و $|+, -\rangle$ (یا $|-, +\rangle$ و $|-, -\rangle$)، ویژه بردارهای F_z نیز هستند، اما با یک مقدار مساوی از $m_F = m_S + m_I$ متناظر نیستند. چون عملگر $\mathcal{H} \mathbf{I} \cdot \mathbf{S} = \mathcal{H} / 2 (F^2 - I^2 - S^2)$ با F_z جابه‌جا می‌شود، بین دو حالت $|+, +\rangle$ و $|+, -\rangle$ یا $|-, +\rangle$ و $|-, -\rangle$ دارای عنصر ماتریسی نیست. به این ترتیب، دو ماتریس معرف $\mathcal{H} \mathbf{I} \cdot \mathbf{S}$ در دو زیرفضای $\{|+, \pm\rangle\}$ و $\{|-, \pm\rangle\}$ قطری هستند و ویژه مقدارهای آنها عناصر قطری زیرند

$$\langle m_S; m_I | \mathcal{H} \mathbf{I} \cdot \mathbf{S} | m_S; m_I \rangle$$

که می‌توان آنها را، با استفاده از رابطهٔ

$$\mathbf{I} \cdot \mathbf{S} = I_z S_z + \frac{1}{2} (I_+ S_- + I_- S_+) \quad (88-12)$$

به صورت زیر نیز نوشت

$$\langle m_S, m_I | \mathcal{H} \mathbf{I} \cdot \mathbf{S} | m_S, m_I \rangle$$

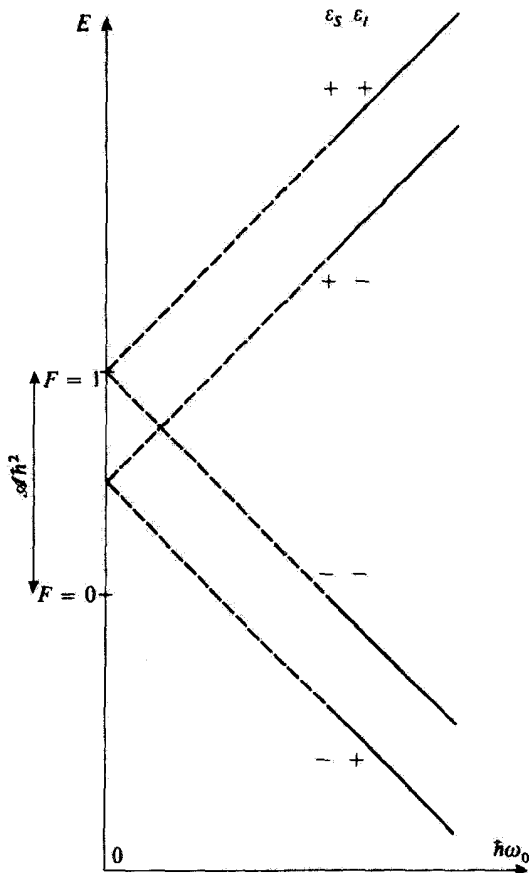
$$= \langle m_S, m_I | \mathcal{H} I_z S_z | m_S, m_I \rangle = \mathcal{H} \hbar^2 m_S m_I \quad (89-12)$$

سرانجام، در یک میدان قوی، ویژه حالتها (تا مرتبهٔ صفر نیست به \mathcal{H}) و ویژه مقدارها (تا مرتبهٔ اول نسبت به \mathcal{H}) عبارت‌اند از

ویژه حالتها	ویژه مقدارها
$ +, +\rangle \leftrightarrow$	$\hbar \omega_0 + \frac{\mathcal{H} \hbar^2}{4}$
$ +, -\rangle \leftrightarrow$	$\hbar \omega_0 - \frac{\mathcal{H} \hbar^2}{4}$
$ -, +\rangle \leftrightarrow$	$-\hbar \omega_0 - \frac{\mathcal{H} \hbar^2}{4}$
$ -, -\rangle \leftrightarrow$	$-\hbar \omega_0 + \frac{\mathcal{H} \hbar^2}{4}$

(90-12)

در شکل ۷-۱۲، منحنیهای خط‌پر در سمت راست (برای $\mathcal{H} \hbar^2 \gg \hbar \omega_0$) معرف ترازهای انرژی در میدان قوی‌اند: دو خط مستقیم موازی با شیب $+1$ ، که با انرژی $\mathcal{H} \hbar^2 / 2$ از یکدیگر جدا شده‌اند،



شکل ۷-۱۲ نمودار زیمان حالت پایه ۱s اتم هیدروژن، در یک میدان قوی برای هر جهت از اسپین الکترون ($\epsilon_S = +$) یا ($\epsilon_S = -$)، دو خط راست موازی به دست می‌آوریم که با انرژی $\hbar^2/2$ از هم جدا شده‌اند و هر کدام با یک جهت مختلف از اسپین پروتون ($\epsilon_I = +$ یا $\epsilon_I = -$) متناظرند.

و دو خط مستقیم موازی دیگر با شیب -1 ، که باز هم با انرژی $\hbar^2/2$ از هم جدا شده‌اند، به دست می‌آوریم. بنابراین، بررسیهای اختلال ارائه شده در این بخش و بخش قبلی، مجانبهای میدان-قوی و مماسها بر ترازهای انرژی در مبدأ را به دست می‌دهند.

یادداشت:

شکافتگی $\hbar^2/2$ دو حالت $(+, +)$ و $(+, -)$ یا $(-, +)$ و $(-, -)$ را بر اثر میدان قوی می‌توانیم به طریق زیر تعبیر کنیم. دیدیم که وقتی جفت شدگی فوق ریز را مانند یک اختلال جمله زیمان در نظر می‌گیریم، فقط جمله $I_z S_z$ از عبارت (۱۲-۸۸) برای $\mathbf{I} \cdot \mathbf{S}$ هنگام اعمال یک میدان

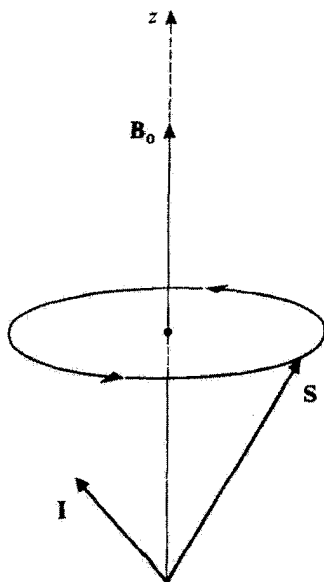
قوی، وارد می‌شود. از این رو، هامیلتونی کل میدان قوی (۱۲-۷۷) را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$2\omega_0 S_z + \mathcal{A} I_z S_z = 2 \left(\omega_0 + \frac{\mathcal{A}}{2} I_z \right) S_z \quad (91-12)$$

این مانند این است که اسپین الکترونی، علاوه بر میدان خارجی B_0 ، یک "میدان داخلی" کوچکتر، که از جفت‌شدگی فوق ریز بین I و S ناشی می‌شود و بسته به بالا یا پایین بودن اسپین هسته‌ای، دارای دو مقدار ممکن است، را "دید" باشد. این میدان به B_0 اضافه یا از آن کم می‌شود و عامل اختلاف انرژی بین $(+, +)$ و $(+, -)$ یا بین $(-, +)$ و $(-, -)$ است. ■

ج) بسامدهای بور مؤثر در تحول $\langle S_z \rangle$

در یک میدان قوی، جفت‌شدگی زیمان S با B_0 از جفت‌شدگی فوق ریز S با I مهمتر است. اگر ابتدا از این جفت‌شدگی فوق ریز صرف‌نظر کنیم، مدل برداری اتم پیش‌بینی می‌کند که S یک حرکت تقدیمی (بسیار سریع، زیرا $|B_0|$ بزرگ است) حول B_0 ، که در امتداد Oz است، انجام خواهد داد (I بدون حرکت باقی می‌ماند، زیرا فرض کرده‌ایم که ω_n قابل چشمپوشی است).



شکل ۸-۱۲ حرکت S در مدل برداری اتم. در یک میدان قوی، S سریعاً حول B_0 حرکت تقدیمی انجام می‌دهد (در اینجا هم از جفت‌شدگی زیمان بین I و B_0 و جفت‌شدگی فوق ریز بین I و S صرف‌نظر می‌کنیم، تا I بی‌حرکت باقی بماند).

رابطه (۱۲-۸۸) برای جفت‌شدگی فوق ریز، برای بردارهای کلاسیک معتبر باقی می‌ماند. به علت حرکت تقدیمی بسیار سریع S، جملات S_+ و S_- به سرعت نوسان می‌کنند و، به‌طور متوسط، هیچ اثری ندارند، به‌گونه‌ای که فقط جمله $I_z S_z$ به حساب می‌آید. بنابراین، اثر جفت‌شدگی فوق ریز این است که یک میدان کوچک موازی با Oz و متناسب با I_z اضافه کند (تذکر بخش قبلی)، که بسته به علامت I_z ، حرکت تقدیمی S حول Oz را تند یا کند می‌کند. از این‌رو، مدل برداری اتم پیش‌بینی می‌کند که S_z در یک میدان قوی ایستا خواهد بود.

نشان خواهیم داد که نظریه کوانتومی، نتیجه مشابهی برای مقدار متوسط (S_z) از مشاهده‌پذیر S_z به دست می‌دهد. همان‌طور که دیدیم، حالت‌های با انرژی کاملاً معین، در یک میدان قوی، حالت‌های $|m_S, m_I\rangle$ هستند. حال، در این پایه، عملگر S_z فقط دارای عناصر ماتریسی قطری است. بنابراین، هیچ بسامد بور غیر صفری نمی‌تواند در $\langle S_z \rangle$ ، که برخلاف همتای میدان-ضعیف آن، نتیجتاً، یک کمیت ایستاست، ظاهر شود.^۱

۱۲-۵-۴ اثر زیمان در میدان متوسط

الف) ماتریسی که معرف اختلال کل در پایه $\{|F, m_F\rangle\}$ است

حالت‌های $|F, m_F\rangle$ ، ویژه حالت‌های عملگر $\mathcal{H} \cdot \mathbf{I} \cdot \mathbf{S}$ هستند. از این‌رو، ماتریسی که معرف این عملگر در پایه $\{|F, m_F\rangle\}$ است قطری است. عناصر قطری متناظر با $F=1$ ، برابر $\mathcal{H} \hbar^2 / 4$ ، و عناصر متناظر با $F=0$ برابر با $-\mathcal{H} \hbar^2 / 4$ هستند. وانگهی، قبلاً، در (۱۲-۷۹) نمایش ماتریسی S_z را در همین پایه نوشته‌ایم. حال بسیار ساده است که ماتریس معرف اختلال کل (۱۲-۷۷) را بنویسیم. بنابراین، با مرتب کردن بردارهای پایه به صورت $\langle 1, 1 \rangle, \langle 1, 0 \rangle, \langle 1, -1 \rangle, \langle 0, 0 \rangle$ ، به دست می‌آوریم

$\frac{\mathcal{H} \hbar}{4} + \hbar \omega_0$	۰	۰	۰
۰	$\frac{\mathcal{H} \hbar^2}{4} - \hbar \omega_0$	۰	۰
۰	۰	$\frac{\mathcal{H} \hbar^2}{4}$	$\hbar \omega_0$
۰	۰	$\hbar \omega_0$	$-\frac{3}{4} \mathcal{H} \hbar^2$

(۱۲-۹۲)

۱. مطالعه (S_y) و (S_x) هیچ اشکالی ایجاد نمی‌کند. دو بسامد زاویه‌ای بور پیدا می‌کنیم: یکی، $\mathcal{H} \hbar / 2 + \omega_0$ که کمی از ω_0 بزرگتر، و دیگری $\mathcal{H} \hbar / 2 - \omega_0$ که کمی از آن کوچکتر است. این بسامدها با دو راستای ممکن "میدان داخلی" حاصل از I_z ، که به میدان خارجی B_0 افزوده می‌شود، متناظرند. به‌طور مشابه، پی می‌بریم که \mathbf{I} حول "میدان داخلی" حاصل از S_z حرکت تقدیمی انجام می‌دهد.

یادداشت:

S_z و F_z جابه‌جا می‌شوند؛ از این رو، S_z و $2\omega_0$ می‌تواند فقط بین دو حالت m_F های یکسان، دارای عناصر ماتریسی غیر صفر باشد. بنابراین، می‌توانستیم تمام صفرهای ماتریس (۹۲-۱۲) را از قبل پیش‌بینی کنیم.

ب) مقادیر انرژی در یک میدان دلخواه

ماتریس (۹۲-۱۲) را می‌توان به دو ماتریس 1×1 و یک ماتریس 2×2 تجزیه کرد. دو ماتریس 1×1 ، بلافاصله دو ویژه‌مقدار زیر را می‌دهند

$$\begin{cases} E_1 = \frac{\mathcal{A}\hbar^2}{4} + \hbar\omega_0 \\ E_2 = \frac{\mathcal{A}\hbar^2}{4} = \hbar\omega_0 \end{cases} \quad (93-12)$$

که به ترتیب با حالت $|1, 1\rangle$ (یعنی، حالت $(+, +)$) و حالت $|1, -1\rangle$ (یعنی، حالت $(-, -)$) متناظرند مربوط می‌شوند. بنابراین، در شکل ۹-۱۲، دو خط راستی که شیب آنها $+1$ و -1 است، و از نقطه‌ای می‌گذرند که عرض از مبدأ آن در میدان صفر (که کاربرد نظریهٔ اختلال در مورد آن، فقط رفتار اولیه و رفتار مجانبی را می‌داد) برابر $\mathcal{A}\hbar^2/4$ است، برای هر B_0 ، نشان‌دهندهٔ دو زیرتراز زیمان هستند.

معادلهٔ ویژه‌مقدار ماتریس 2×2 ی باقیمانده را می‌توان به صورت زیر نوشت

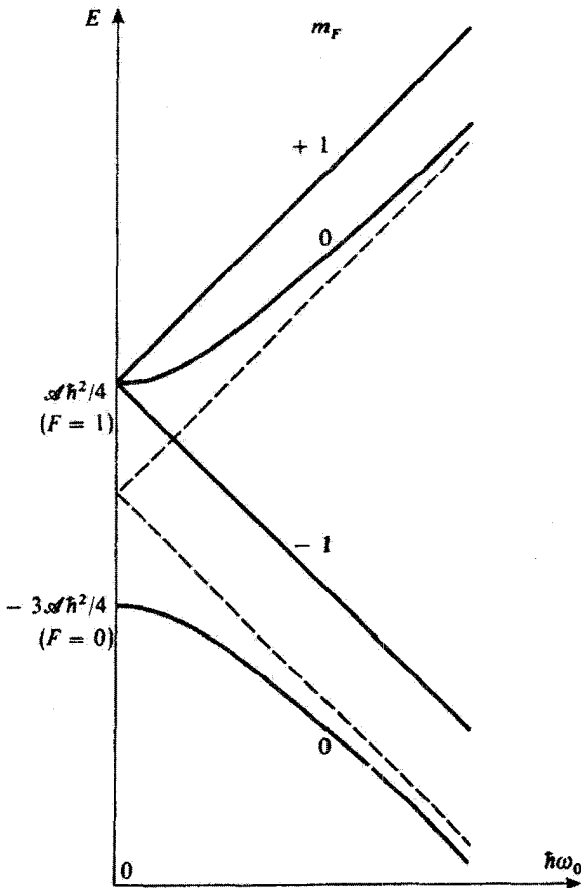
$$\left(\frac{\mathcal{A}\hbar^2}{4} - E\right) \left(-\frac{3\mathcal{A}\hbar^2}{4} - E\right) - \hbar^2\omega_0^2 = 0 \quad (94-12)$$

دو ریشهٔ این معادله به راحتی به دست می‌آیند

$$E_+ = -\frac{\mathcal{A}\hbar^2}{4} + \sqrt{\left(\frac{\mathcal{A}\hbar^2}{2}\right)^2 + \hbar^2\omega_0^2} \quad (95-12)$$

$$E_- = -\frac{\mathcal{A}\hbar^2}{4} - \sqrt{\left(\frac{\mathcal{A}\hbar^2}{2}\right)^2 + \hbar^2\omega_0^2} \quad (96-12)$$

وقتی $\hbar\omega_0$ تغییر می‌کند، دو نقطهٔ با طول $\hbar\omega_0$ و عرضهای E_+ و E_- ، دو شاخه از یک هذلولی را طی می‌کنند (شکل ۹-۱۲). مجانبهای این هذلولی دو خط راست به معادلهٔ $E = -(\mathcal{A}\hbar^2/4) \pm \hbar\omega_0$



شکل ۹-۱۲ نمودار زیمان (برای یک میدان دلخواه) حالت پایه ۱s اتم هیدروژن: m_F برای هر مقدار میدان، یک عدد کوانتومی خوب باقی می‌ماند. دو خط راست، با شیبهای متقابل، متناظر با مقادیر $+1$ و -1 ، m_F و همچنین یک هذلولی که دو شاخه آن وابسته به تراز $F = 0$ هستند، به دست می‌آوریم. در شکلهای ۵-۱۲ و ۷-۱۲، به ترتیب، مماسهای در مبدأ و مجانبهای ترازهای نشان داده شده در این نمودار آمده است.

هستند، که در بخش ۳-۱۲ آنها را به دست آوردیم. دو نقطه برگشت هذلولی دارای طول $\omega_0 = 0$ و عرضهای $\pm (\hbar^2/4) - (\hbar^2/4)$ ، یعنی $+\hbar^2/4$ و $-\hbar^2/4$ هستند. مماسهای در این دو نقطه، افقی هستند. این گفته با نتایج بخش ۲-۱۲ برای حالت‌های $|F=1; m_F=0\rangle$ و $|F=0; m_F=0\rangle$ سازگار است.

نتایج اخیر در شکل ۹-۱۲، که نمودار زیمان حالت پایه ۱s است آمده است.

ج) واجفتیدگی جزئی فوق ریز

حالت‌های با انرژی کاملاً معین، در یک میدان ضعیف، عبارت‌اند از حالت‌های $|F, m_F\rangle$ ، در میدان قوی، عبارت‌اند از حالت‌های $|m_S, m_I\rangle$ ، و در میدان متوسط، عبارت‌اند از ویژه‌حالت‌های ماتریس (۱۲-۹۲) که حد واسط بین حالت‌های $|F, m_F\rangle$ و حالت‌های $|m_S, m_I\rangle$ هستند.

بنابراین، به‌طور پیوسته، توسط یک جفت‌شدگی جزئی، از یک جفت‌شدگی قوی بین \mathbf{S} و \mathbf{I} (پایه‌های جفت‌شده) به یک واجفتیدگی کامل (پایه‌های جداشده) می‌رسیم.

یادداشت:

پدیدهٔ مشابهی برای اثر ساختار ریز زیمان وجود دارد. اگر، برای سهولت، از W_{hf} صرف‌نظر کنیم، می‌دانیم (بخش ۱۲-۳) که، در یک میدان صفر، ویژه‌حالت‌های هامیلتونی H ، حالت‌های $|J, m_J\rangle$ متناظر با یک جفت‌شدگی قوی بین \mathbf{L} و \mathbf{S} (جفت‌شدگی اسپین-مدار) هستند. این خاصیت تا زمانی که $W_Z \ll W_f$ است معتبر است. از طرف دیگر، اگر B آن قدر قوی باشد که $W_Z \gg W_f$ ، ملاحظه می‌کنیم که ویژه‌حالت‌های H ، حالت‌های $|m_L, m_S\rangle$ متناظر با واجفتیدگی کامل \mathbf{S} و \mathbf{L} خواهند بود. منطقهٔ حد واسط $(W_Z \simeq W_f)$ متناظر با یک جفت‌شدگی جزئی \mathbf{L} و \mathbf{S} است. به‌عنوان مثال، مکمل ۴ از فصل ۱۲، که در آن اثر زیمان تراز $2p$ را (بدون در نظر گرفتن W_{hf}) مطالعه می‌کنیم ببینید. ■

مراجع برای مطالعهٔ بیشتر

طیف اتم هیدروژن:

Series (11.7), Bethe and Salpeter (11.10).

معادلهٔ دیراک:

The subsection "Relativistic quantum mechanics" of section 2 of the bibliography and Messiah (1.17), chap. XX, especially §§V and IV-27.

ساختار ریز تراز $n = 2$ و انتقال لمب:

Lamb and Rethreford (3.11); Frisch (3.13); Series (11.7), chaps. VI, VII and VIII.

ساختار فوق ریز حالت پایه:

Crampton et al (3.12).

اثر زیمان و مدل برداری اتم:

Cagnac and Pebay-Peyroula (11.2), chap. XVII, §§3E and 4C; Bron (11.4), chap. 6, §2.

هیدروژن بین ستاره‌ای:

Roberts (11.17); Encrenaz (12.11), chap. IV.

۱. هامیلتونی فوق ریز مغناطیسی
 ۱. به دست آوردن عبارتی برای هامیلتونی ساختار فوق ریز که در فصل ۱۲ مورد استفاده قرار دادیم. تعبیر فیزیکی جملات این هامیلتونی، بخصوص جمله تماسی، نسبتاً مشکل است.
۲. محاسبه مقادیر متوسط هامیلتونی ساختار ریز در حالت‌های $1s$ ، $2s$ و $2p$
۳. ساختار فوق ریز و اثر زیمان برای میونیوم و پوزیترونیم
۳. تعمیم بررسی بخشهای $4-12$ و $5-12$ فصل ۱۲ به دو سیستم مهم هیدروژن-مانند، میونیوم و پوزیترونیم، که قبلاً در مکمل ۱ از فصل ۷ ارائه کردیم. توصیف مختصر روشهای تجربی برای بررسی این دو سیستم. در صورتی که محاسبات بخشهای $4-12$ و $5-12$ را خوب فهمیده باشیم، راحت است.
۴. تأثیر اسپین الکترونی بر اثر زیمان خط تشدید هیدروژن
۴. مطالعه اثر اسپین الکترونی بر بسامدها و قطبشهای مؤلفه‌های زمیانی خط تشدید هیدروژن. نتایج به دست آمده در مکمل ۴ از فصل ۷ را، که در آن از اسپین الکترون صرف نظر کردیم، بهبود می‌بخشد (چند نتیجه از آن مکمل را مورد استفاده قرار می‌دهد). نسبتاً مشکل.
۵. اثر اشتارک برای اتم هیدروژن
۵. مطالعه اثر یک میدان الکتریکی ایستا روی حالت پایه ($n = 1$) و اولین حالت برانگیخته ($n = 2$) اتم هیدروژن (اثر اشتارک). اهمیت وجود یک واگنی بین دو حالت با پارته‌های مختلف برای اثر اشتارک را نشان می‌دهد. نسبتاً آسان.

مکمل ۱

هامیلتونی فوق ریز مغناطیسی

۱. برهم‌کنش الکترون با پتانسیلهای نرده‌ای و برداری که توسط پروتون ایجاد می‌شوند
۲. شکل مفصل هامیلتونی فوق ریز
الف) جفت‌شدگی گشتاور مغناطیسی پروتون با تکانه زاویه‌ای مداری الکترون
ب) جفت‌شدگی با اسپین الکترون
 ۱. میدان مغناطیسی وابسته به پروتون
 ۲. جمله دوقطبی مغناطیسی
 ۳. جمله تماسی
۳. نتیجه: هامیلتونی ساختار فوق ریز

هدف این مکمل این است که عبارتی را که در فصل ۱۲ [رابطه (۱۲-۲۳)] برای هامیلتونی فوق ریز به دست آوردیم، توجیه کند. مانند همان فصل، استدلال خود را به اتم هیدروژن، که از یک الکترون و یک پروتون تشکیل شده است، محدود خواهیم کرد، اگر چه بخش عمده این استدلال برای هر اتم دیگر نیز معتبر است. قبلاً گفتیم که منشأ هامیلتونی فوق ریز، جفت‌شدگی بین الکترون و میدان الکترومغناطیسی ایجاد شده توسط پروتون است. بنابراین، پتانسیلهای برداری و نرده‌ای وابسته به این میدان الکترومغناطیسی را به ترتیب با $\mathbf{A}_I(\mathbf{r})$ و $U_I(\mathbf{r})$ نشان خواهیم داد. ابتدا هامیلتونی یک الکترون را که تحت تأثیر این پتانسیل واقع است بررسی می‌کنیم.

۱. برهم‌کنش الکترون با پتانسیلهای نرده‌ای و برداری که توسط پروتون ایجاد می‌شوند

فرض کنید \mathbf{R} و \mathbf{P} مکان و تکانه الکترون، \mathbf{S} ، اسپین، m_e جرم، و q بار آن باشد؛ $\mu_B = q\hbar/2m_e$ مگنتون بور است.

هامیلتونی H الکترون در میدان پروتون را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$H = \frac{1}{2m_e} [\mathbf{P} - q\mathbf{A}_I(\mathbf{R})]^2 + qU_I(\mathbf{R}) - 2\mu_B \left(\frac{\mathbf{S}}{\hbar} \right) \cdot \nabla \times \mathbf{A}_I(\mathbf{R}) \quad (1)$$

این عملگر، از افزودن انرژی جفت‌شدگی بین گشتاور مغناطیسی $2\mu_B \mathbf{S}/\hbar$ وابسته به اسپین و

میدان مغناطیسی $\nabla \times \mathbf{A}_I(\mathbf{r})$ ، بر عبارت (۱۳-۴۶) فصل ۳ (هامیلتونی یک ذره بدون اسپین) به دست می‌آید.

ابتدا جملاتی را که، در (۱)، از پتانسیل نرده‌ای $U_I(\mathbf{r})$ ناشی می‌شود، بررسی خواهیم کرد. طبق مکمل ۵ از فصل ۱۰، این پتانسیل از ترکیب چندین سهم، که هر کدام به یکی از گشتاورهای چندقطبی الکتریکی هسته وابسته هستند، حاصل می‌شود. برای یک هسته دلخواه، باید نکات زیر را در نظر بگیریم:

۱. بار کل $-Zq$ هسته (گشتاور از مرتبه $k = 0$)، که انرژی پتانسیل زیر را می‌دهد

$$V_0(\mathbf{r}) = qU_0(\mathbf{r}) = -\frac{Zq^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (2)$$

(برای پروتون $Z = 1$). اما، هامیلتونی که در فصل ۷ برای مطالعه اتم هیدروژن انتخاب کردیم دقیقاً عبارت است از

$$H_0 = \frac{\mathbf{P}^2}{2m_e} + V_0(\mathbf{R}) \quad (3)$$

بنابراین، قبلاً $V_0(\mathbf{R})$ را در هامیلتونی اصلی H_0 منظور کرده‌ایم.

۲. گشتاور چهارقطبی الکتریکی ($k = 2$) هسته. پتانسیل متناظر، به پتانسیل V_0 افزوده می‌شود و جمله‌ای از هامیلتونی فوق ریز را می‌دهد که اصطلاحاً آن را جمله چهارقطبی الکتریکی می‌نامیم. نتایج مکمل ۵ از فصل ۱۰ به ما امکان می‌دهد تا بدون هیچ اشکالی این جمله را بنویسیم. در مورد اتم هیدروژن، این جمله صفر است زیرا پروتون، که ذره‌ای با اسپین $1/2$ است، دارای هیچ گشتاور چهارقطبی الکتریکی نیست (بخش ۲-ج-۱ از مکمل ۵ فصل ۱۰).

۳. گشتاورهای چندقطبی الکتریکی از مرتبه‌های $k = 4, 6, \dots$ که از دیدگاه نظری مادامی که $k \leq 2I$ باشد وجود دارند؛ برای پروتون، این گشتاورها همگی صفرند.

بنابراین، برای اتم هیدروژن، پتانسیل (۲) واقعاً همان پتانسیلی است که توسط الکترون دیده می‌شود.^۱ احتیاجی نیست که هیچ جمله تصحیحی به آن بیفزاییم (منظور ما از اتم هیدروژن، سیستم الکترون-پروتون سوای ایزوتوپیایی مانند دوتریوم است: چون هسته دوتریوم دارای اسپین $I = 1$ است، ما می‌بایستی یک هامیلتونی فوق ریز چهارقطبی الکتریکی را منظور می‌کردیم، یادداشت ۱ در آخر این مکمل را ببینید).

۱. در اینجا فقط پتانسیل در خارج هسته، جایی که بسط گشتاور چندقطبی ممکن است، مورد نظر ماست. در داخل هسته، می‌دانیم که پتانسیل شکل ۲ را ندارد. این باعث یک انتقال در ترازهای اتمی می‌شود که آن را "اثر حجمی" می‌نامند. این اثر را در مکمل ۴ از فصل ۱۱ مورد مطالعه قرار دادیم، و در اینجا آن را منظور نمی‌کنیم.

اینک جملاتی را که از پتانسیل برداری $\mathbf{A}_I(\mathbf{r})$ در (۱) حاصل می‌شوند بررسی می‌کنیم. گشتاور دو قطبی مغناطیسی پروتون را (که به همان دلیل بالا، نمی‌تواند گشتاورهای چند قطبی مغناطیسی از مرتبه $k > 1$ داشته باشد) با \mathbf{M}_I نمایش می‌دهیم. داریم

$$\mathbf{A}_I(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\mathbf{M}_I \times \mathbf{r}}{r^3} \quad (4)$$

هامیلتونی فوق ریز W_{hf} را اکنون می‌توان با حفظ جملاتی که نسبت به \mathbf{A}_I خطی هستند، یعنی

$$W_{hf} = -\frac{q}{2m_e} [\mathbf{P} \cdot \mathbf{A}_I(\mathbf{R}) + \mathbf{A}_I(\mathbf{R}) \cdot \mathbf{P}] - \gamma \mu_B \left(\frac{\mathbf{S}}{\hbar} \right) \cdot \nabla \times \mathbf{A}_I(\mathbf{R}) \quad (5)$$

و جایگزین کردن \mathbf{A}_I توسط رابطه (۴) به دست آورد (چون W_{hf} در ترازهای انرژی H_0 تصحیح بسیار کوچکی وارد می‌کند، می‌توانیم از جمله مرتبه دوم، نسبت به \mathbf{A}_I^2 ، صرف نظر کنیم). این همان کاری است که در بخش بعدی انجام خواهیم داد.

۲. شکل مفصل هامیلتونی فوق ریز

الف) جفت‌شدگی گشتاور مغناطیسی پروتون با تکانه زاویه‌ای مداری الکترون

قبل از هر چیز، جمله اول (۵) را محاسبه می‌کنیم. با استفاده از (۴)، داریم

$$\mathbf{P} \cdot \mathbf{A}_I(\mathbf{R}) + \mathbf{A}_I(\mathbf{R}) \cdot \mathbf{P} = \frac{\mu_0}{4\pi} \left\{ \mathbf{P} \cdot (\mathbf{M}_I \times \mathbf{R}) \frac{1}{R^3} + \frac{1}{R^3} (\mathbf{M}_I \times \mathbf{R}) \cdot \mathbf{P} \right\} \quad (6)$$

می‌توانیم تا زمانی که ترتیب دو عملگر جابه‌جایی ناپذیر را تغییر ندادیم، قواعد مربوط به حاصلضرب مختلط برداری را به عملگرهای برداری اعمال کنیم. مؤلفه‌های \mathbf{M}_I با \mathbf{R} و \mathbf{P} جابه‌جا می‌شوند. بنابراین داریم

$$(\mathbf{M}_I \times \mathbf{R}) \cdot \mathbf{P} = (\mathbf{R} \times \mathbf{P}) \cdot \mathbf{M}_I = \mathbf{L} \cdot \mathbf{M}_I \quad (7)$$

که در آن

$$\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P} \quad (8)$$

تکانه زاویه‌ای مداری الکترون است. به سادگی می‌توان نشان داد که

$$\left[\mathbf{L}, \frac{1}{R^2} \right] = 0 \quad (9)$$

(هر تابعی از $|\mathbf{R}|$ یک عملگر زرده‌ای است)، به طوری که

$$\frac{1}{R^2} (\mathbf{M}_I \times \mathbf{R}) \cdot \mathbf{P} = \frac{\mathbf{L} \cdot \mathbf{M}_I}{R^2} \quad (10)$$

همین‌طور

$$\mathbf{P} \cdot (\mathbf{M}_I \times \mathbf{R}) \frac{1}{R^2} = -\mathbf{M}_I \cdot (\mathbf{P} \times \mathbf{R}) \frac{1}{R^2} = \frac{\mathbf{M}_I \cdot \mathbf{L}}{R^2} \quad (11)$$

زیرا

$$-\mathbf{P} \times \mathbf{R} = \mathbf{L} \quad (12)$$

بنابراین، جمله اول (۵) در W_{hf}^L یک سهم W_{hf}^L خواهد داشت که برابر است با

$$W_{hf}^L = -\frac{\mu_0}{4\pi} \frac{q}{2m_e} \frac{\mathbf{M}_I \cdot \mathbf{L}}{R^2} = -\frac{\mu_0}{4\pi} \frac{1}{2} \mu_B \frac{\mathbf{M}_I \cdot (\mathbf{L}/\hbar)}{R^2} \quad (13)$$

از لحاظ فیزیکی این جمله متناظر با جفت‌شدگی گشتاور مغناطیسی هسته‌ای \mathbf{M}_I و میدان مغناطیسی

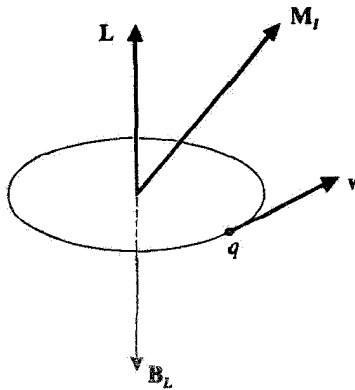
$$\mathbf{B}_L = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{q\mathbf{L}}{m_e r^3}$$

است که توسط حلقه جریان وابسته به دوران الکترون ایجاد می‌شود (شکل ۱ را ببینید).

یادداشت:

وجود جمله $1/R^2$ در (۱۳) ممکن است این تصور را پیش آورد که در مبدأ یک تکینگی وجود دارد، و اینکه بعضی از عناصر ماتریسی W_{hf}^L نامتناهی هستند. در واقع، چنین نیست. عنصر ماتریسی $\langle \varphi_{k,l,m} | W_{hf}^L | \varphi_{k',l',m'} \rangle$ را که در آن $|\varphi_{k,l,m}\rangle$ و $|\varphi_{k',l',m'}\rangle$ حالت‌های مانای اتم هیدروژن هستند و در فصل ۷ آنها را به دست آوردیم در نظر بگیرید. در نمایش $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ داریم

$$\langle \mathbf{r} | \varphi_{k,l,m} \rangle = \varphi_{k,l,m}(\mathbf{r}) = R_{k,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (14)$$



شکل ۱ وضع نسبی گشتاور مغناطیسی M_I مربوط به پروتون و میدان B_L که توسط حلقه جریان وابسته به حرکت الکترون با بار q و سرعت v (B_L پادموازی با تکانه زاویه‌ای مداری L الکترون است) ایجاد می‌شود.

با [فصل ۷، رابطه (۷-۲۸)]

$$R_{k,l}(r) \underset{r \rightarrow 0}{\sim} Cr^l \quad (15)$$

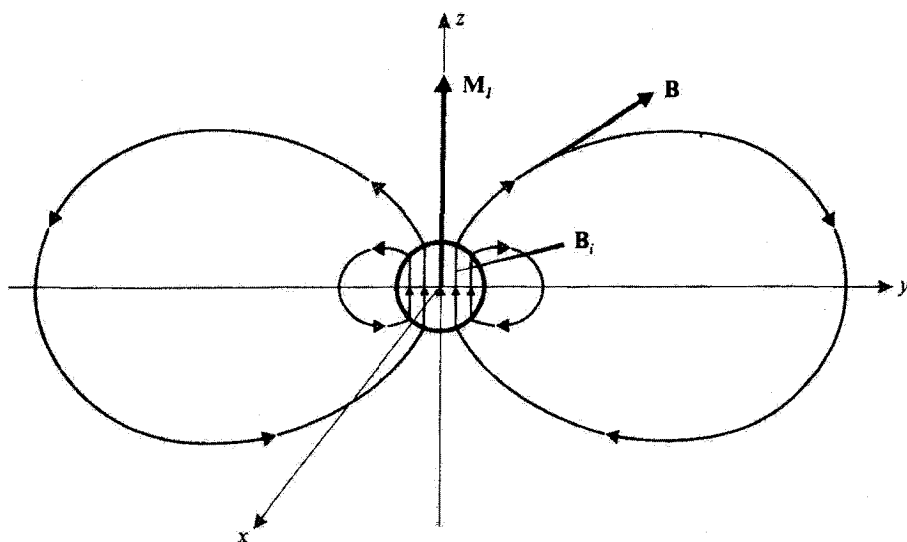
با وجود جمله $r^2 dr$ در عنصر حجمی انتگرال‌گیری، تابعی که باید از آن روی r انتگرال‌گیری شود در مبدأ مانند $r^{l+l'+2-2} = r^{l+l'-1}$ رفتار می‌کند. به علاوه، وجود عملگر هرمیتی L در (۱۳) سبب می‌شود که وقتی l یا l' صفر باشند، عنصر ماتریسی $\langle \varphi_{k,l,m} | W_{hf}^L | \varphi_{k',l',m'} \rangle$ صفر شود. در این صورت داریم $l, l' \geq 1$ و $l+l'-1$ در مبدأ متناهی باقی می‌ماند. ■

ب) جفت‌شدگی با اسپین الکترون

خواهیم دید که، برای آخرین جمله رابطه (۵)، مسائلی که در ارتباط با تکینگی در مبدأ پتانسیل برداری (۴) هستند، حائز اهمیت‌اند. به همین دلیل در بررسی این جمله، پروتونی با اندازه متناهی انتخاب می‌کنیم، و در آخر محاسبات، شعاع آن را به سمت صفر میل می‌دهیم. وانگهی، از دیدگاه فیزیکی، اکنون می‌دانیم که پروتون بسط فضایی معینی دارد و "مغناطیس" آن در یک حجم معین پخش می‌شود. اما، ابعاد پروتون بسیار کوچکتر از شعاع بور a_0 است. این مطلب، تلقی پروتون را به صورت یک ذره نقطه‌ای در مرحله آخر محاسبه، توجیه می‌کند.

۱. میدان مغناطیسی وابسته به پروتون

پروتون را ذره‌ای به شعاع ρ_0 که در مبدأ قرار دارد، در نظر بگیرید. توزیع مغناطیسی در داخل پروتون، در یک نقطه دور، یک میدان B ایجاد می‌کند، که می‌توانیم با نسبت دادن گشتاور مغناطیسی M_I به پروتون، که ما آن را موازی Oz اختیار خواهیم کرد، آن را محاسبه کنیم. برای $r \gg \rho_0$



شکل ۲ میدان مغناطیسی ایجادشده توسط پروتون. در خارج از پروتون، میدان، میدان یک دوقطبی است. در داخل، میدان به توزیع دقیق مغناطیسی پروتون بستگی دارد. اما می‌توانیم در یک تقریب اول، آن را یکنواخت در نظر بگیریم، جمله تماسی متناظر است با برهم‌کنش بین گشتاور مغناطیسی اسپین الکترون و این میدان یکنواخت B_I در داخل پروتون.

مؤلفه‌های B را از کیرل (تاو) پتانسیل برداری (۴) به دست می‌آوریم

$$\begin{cases} B_x = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{3M_I}{r^5} \frac{xx}{r} \\ B_y = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{3M_I}{r^5} \frac{yz}{r} \\ B_z = \frac{\mu_0}{4\pi} M_I \frac{3z^2 - r^2}{r^5} \end{cases} \quad (16)$$

به علاوه، روابط (۱۶) حتی اگر r در مقایسه با ρ_0 خیلی بزرگ نباشد معتبر باقی می‌مانند. قبلاً تأکید کردیم که پروتون به خاطر اینکه ذره‌ای با اسپین $1/2$ است هیچ گشتاور چندقطبی مغناطیسی از مرتبه $k > 1$ ندارد. از این رو، میدان در خارج پروتون یک میدان دوقطبی محض است. در داخل پروتون، میدان مغناطیسی به توزیع دقیق مغناطیسی بستگی دارد. در تقریب اول

فرض خواهیم کرد این میدان \mathbf{B}_i یکنواخت باشد (به دلیل تقارن، در این صورت باید موازی M_I و از این رو موازی Oz باشد).

برای محاسبه میدان \mathbf{B}_i در داخل پروتون، معادله‌ای می‌نویسیم که بتا بر آن شار میدان مغناطیسی از یک سطح بسته، محصور به صفحه xOy و نیمکره بالایی به مرکز O و به شعاع نامتناهی صفر است. چون، وقتی $r \rightarrow \infty$ ، $|\mathbf{B}|$ به صورت $1/r^2$ کاهش می‌یابد، شار (عبوری) از این نیمکره صفر است. بنابراین، اگر $\Phi_i(\rho_0)$ معرف شار عبوری از یک قرص به مرکز O و شعاع ρ_0 در صفحه xOy ، و $\Phi_e(\rho_0)$ ، شار عبوری از بقیه صفحه xOy باشد، داریم

$$\Phi_i(\rho_0) + \Phi_e(\rho_0) = 0 \quad (17)$$

روابط (۱۶) به ما امکان می‌دهند تا $\Phi_e(\rho_0)$ را به آسانی محاسبه کنیم، در نتیجه

$$\begin{aligned} \Phi_e(\rho_0) &= 2\pi \int_{\rho_0}^{+\infty} r \, dr \left[-\frac{\mu_0}{4\pi} M_I \frac{1}{r^2} \right] \\ &= -\frac{\mu_0}{4\pi} M_I \frac{2\pi}{\rho_0} \end{aligned} \quad (18)$$

اما شار $\Phi_i(\rho_0)$ مربوط به \mathbf{B}_i ، برابر است با

$$\Phi_i(\rho_0) = \pi \rho_0^2 B_i \quad (19)$$

بنابراین، (۱۷) و (۱۸) نتیجه می‌دهند

$$B_i = \frac{\mu_0}{4\pi} M_I \frac{2}{\rho_0^2} \quad (20)$$

به این ترتیب، مقادیر میدان ایجادشده توسط پروتون در تمام نقاط فضا را می‌دانیم. اکنون می‌توانیم قسمتی از W_{hf} را که به اسپین \mathbf{S} الکترون مربوط است محاسبه کنیم.

۱. استدلال زیر را می‌توان به موردی که در آن \mathbf{B}_i به صورت پیچیده‌تری تغییر می‌کند نیز تعمیم داد (باید داشت ۴ در انتهای این مکتل را ببینید). تصحیحاتی که از اختلاف بین میدان واقعی موجود در داخل هسته و میدان یکنواخت \mathbf{B}_i ناشی می‌شود اثرات مغناطیسی را نشان می‌دهد که در اغلب موارد بسیار ضعیف‌اند. با وجود این، برای اتمهای سنگین که هسته‌های آنها گسترش فضایی نسبتاً بزرگی دارند این تصحیحات می‌توانند به‌طور تجربی ظاهر شوند. در این صورت می‌توان از روی اندازه‌گیری دقیق ساختار فوق ریز اتم مورد نظر اطلاعاتی درباره توزیع مغناطیسی در داخل هسته‌های مربوطه به‌دست آورد.

۲. جمله دوقطبی مغناطیسی

اگر (۱۶) را در جمله $-2\mu_B(S/\hbar) \cdot \nabla \times \mathbf{A}_I$ قرار دهیم، عملگر زیر به دست می آید

$$W_{hf}^{\text{dip}} = -\frac{\mu_0}{4\pi} \frac{2\mu_B M_I}{\hbar} \left\{ 3Z \frac{XS_x + YS_y + ZS_z}{R^3} - \frac{S_z}{R^2} \right\} \quad (21)$$

یعنی، با در نظر گرفتن این واقعیت که M_I بنا به فرض، موازی Oz است

$$W_{hf}^{\text{dip}} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{2\mu_B}{\hbar} \frac{1}{R^3} \left\{ \mathbf{S} \cdot \mathbf{M}_I - 3 \frac{(\mathbf{S} \cdot \mathbf{R})(\mathbf{M}_I \cdot \mathbf{R})}{R^2} \right\} \quad (22)$$

این عبارتی است برای هامیلتونی برهم کنش دوقطبی-دوقطبی بین دو گشتاور مغناطیسی M_I و $M_S = 2\mu_B S/\hbar$ (مکمل ۲ از فصل ۱۱، بخش ۱).

در واقع، رابطه (۱۶) برای میدان مغناطیسی ایجادشده توسط پروتون فقط به ازای $r \geq \rho_0$ معتبر است، و رابطه (۲۲) را باید تنها برای قسمتی از توابع موج که در این شرط صادق اند، به کار برد. اما، وقتی ρ_0 را به سمت صفر میل می دهیم، رابطه (۲۲) هیچ تکینگی در مبدأ نمی دهد؛ از این رو، این رابطه در تمام فضا معتبر است.

عصر ماتریسی

$$\langle \varphi_{k,l,m,\epsilon} | W_{hf}^{\text{dip}} | \varphi_{k',l',m',\epsilon'} \rangle$$

در اینجا، شاخصهای ϵ و ϵ' را به این جهت به حالتی مورد نظر $|\varphi_{k,l,m}\rangle$ می افزاییم که ویژه مقدارهای $\epsilon\hbar/2$ و $\epsilon'\hbar/2$ متعلق به S_z را نشان دهیم) و مخصوصاً، انتگرال شعاعی متناظر با آن را در نظر بگیرید. تابعی از r که باید از آن انتگرال بگیریم، در مبدأ، مانند $r^{l+l'+2-3} = r^{l+l'-1}$ رفتار می کند. بر طبق شرط (۸-ج) از مکمل ۲ از فصل ۱۱، عناصر ماتریسی غیر صفر، به ازای $l+l' \geq 2$ به دست می آیند. از این رو، در مبدأ واگرایی وجود ندارد. در حد، هنگامی که $\rho_0 \rightarrow 0$ ، انتگرال روی r تبدیل به یک انتگرال از صفر تا بینهایت می شود، و عبارت (۲۲) در تمام فضا معتبر است.

۳. جمله تماسی

اکنون (۲۰) را در آخرین جمله (۵) قرار می دهیم تا بر سهم میدان داخلی پروتون در W_{hf} را به دست آوریم. به این ترتیب، یک عملگر W_{hf}^{c} به دست می آوریم، که آن را "جمله تماسی" می نامیم، و عناصر ماتریسی آن در نمایش $\{|\varphi_{k,l,m,\epsilon}\rangle\}$ عبارت اند از

$$\begin{aligned} & \langle \varphi_{k,l,m,\varepsilon} | W_{hf}^c | \varphi_{k',l',m',\varepsilon} \rangle \\ &= -\frac{\mu_0}{4\pi} \frac{2\mu_B M_I}{\hbar} \langle \varepsilon | S_z | \varepsilon' \rangle \frac{2}{\rho^3} \iiint_{\tau \leq \rho_0} d^3\tau \varphi_{k,l,m}^*(\mathbf{r}) \varphi_{k',l',m'}(\mathbf{r}) \quad (23) \end{aligned}$$

ρ_0 را به سمت صفر میل دهید. حجم انتگرال‌گیری، $4\pi\rho_0^3/3$ ، نیز به سمت صفر میل می‌کند و طرف راست (۲۳) می‌شود

$$-\frac{\mu_0}{4\pi} \frac{2\mu_B M_I}{\hbar} \langle \varepsilon | S_z | \varepsilon' \rangle \frac{4\pi}{3} \varphi_{k,l,m}^*(\mathbf{r} = 0) \varphi_{k',l',m'}(\mathbf{r} = 0) \quad (24)$$

بنابراین، جمله تماسی با رابطه زیر داده می‌شود

$$W_{hf}^c = -\frac{\mu_0}{4\pi} \frac{4\pi}{3} M_I \cdot \left(\frac{2\mu_B \mathbf{S}}{\hbar} \right) \delta(\mathbf{R}) \quad (25)$$

به این ترتیب، هر چند که حجم شامل میدان مغناطیسی (۲۰)، وقتی $\rho_0 \rightarrow 0$ ، خود به سمت صفر میل می‌کند، ولی مقدار W_{hf}^c ، متناهی باقی می‌ماند، زیرا این میدان داخلی به صورت $1/\rho_0^3$ به سمت بینهایت میل می‌کند.

یادداشتها:

۱. در (۲۵)، $\delta(\mathbf{R})$ که تابعی از عملگر \mathbf{R} است صرفاً عبارت است از تصویرگر زیر

$$\delta(\mathbf{R}) = |\mathbf{r} = 0\rangle \langle \mathbf{r} = 0| \quad (26)$$

۲. عنصر ماتریسی نوشته شده در (۲۵)، تنها زمانی مخالف است که $l = l' = 0$ باشد. این یک شرط لازم است برای اینکه $\varphi_{k,l,m}(\mathbf{r} = 0)$ و $\varphi_{k',l',m}(\mathbf{r} = 0)$ غیر صفر باشند (فصل ۷، بخش ۳-۴-ج-۱). از این رو، فقط برای حالت‌های s ، جمله تماسی وجود دارد.

۳. در بخش ۱۲-۲ قسمت الف، برای مطالعه جفت شدگی بین M_I و تکانه زاویه‌ای مداری الکترون، فرض کردیم که رابطه (۴) برای $\mathbf{A}_I(\mathbf{r})$ در تمام فضا معتبر است. این، معادل نادیده گرفتن این واقعیت است که \mathbf{B} در واقع در داخل پروتون، شکل (۴۰) را دارد. ممکن است این سؤال پیش آید که آیا این روش درست است یا اصولاً جمله تماسی مداری در W_{hf}^L وجود ندارد.

در واقع، چنین نیست. جمله $\mathbf{P} \cdot \mathbf{A}_I + \mathbf{A}_I \cdot \mathbf{P}$ ، برای میدان \mathbf{B}_i ، به یک عملگر متناسب با

$$\mathbf{B}_i \cdot \mathbf{L} = \frac{\mu_0}{4\pi} M_I \frac{2}{\rho_0^3} L_z \quad (27)$$

منجر خواهد شد. عنصر ماتریسی چنین عملگری را در نمایش $\{|\varphi_{k,l,m}\rangle\}$ محاسبه می‌کنیم. حضور عملگر L_z ، مانند بالا، ایجاب می‌کند که $l, l' \geq 1$. در این صورت، تابع شعاعی که از آن باید بین 0 و ρ_0 انتگرال‌گیری شود در مبدأ به صورت $r^{l+l'+2}$ رفتار می‌کند و از این رو با سرعت لااقل r^4 به سمت صفر میل می‌کند. بنابراین، علی‌رغم حضور جمله $1/\rho_0^2$ در (۲۷)، انتگرال بین $r = 0$ و $r = \rho_0$ در حدی که $\rho_0 \rightarrow 0$ ، به سمت صفر میل می‌کند. ■

۳. نتیجه: هامیلتونی ساختار فوق ریز

حال، عملگرهای W_{hf}^e و W_{hf}^{dip} ، W_{hf}^L را با هم جمع می‌کنیم. از این واقعیت که گشتاور دوقطبی مغناطیسی M_I پروتون با نکانه زاویه‌ای I آن متناسب است، یعنی

$$M_I = g_p \mu_n \left(\frac{I}{\hbar} \right) \quad (28)$$

(بخش ۲-۲ الف از فصل ۱۲) استفاده می‌کنیم، به دست می‌آید

$$W_{hf} = -\frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\gamma_B \mu_m g_p}{\hbar^2} \left\{ \frac{\mathbf{I} \cdot \mathbf{L}}{R^2} + 3 \frac{(\mathbf{I} \cdot \mathbf{R})(\mathbf{S} \cdot \mathbf{R})}{R^5} - \frac{\mathbf{I} \cdot \mathbf{S}}{R^3} + \frac{\lambda \pi}{3} \mathbf{I} \cdot \mathbf{S} \delta(\mathbf{R}) \right\} \quad (29)$$

این عملگر، هم در فضای حالت الکترون و هم در فضای حالت پروتون عمل می‌کند. می‌توان دید که این عملگر بدون شک همان عملگری است که در فصل ۱۲ [(۱۲-۲۳)] معرفی کردیم.

یادداشتها:

۱. اکنون تعمیم فرمول (۲۹) را در مورد یک اتم با اسپین هسته‌ای $I > 1/2$ ، بررسی می‌کنیم. قبل از هر چیز، اگر $I = 1$ ، قبلاً دیدیم که هسته می‌تواند یک گشتاور چهارقطبی الکتریکی داشته باشد که سهمی به پتانسیل $V_0(\mathbf{r})$ ، معادله (۲)، می‌افزاید. بنابراین، در هامیلتونی فوق ریز، علاوه بر جمله دوقطبی مغناطیسی (۲۹)، یک جمله فوق ریز چهارقطبی الکتریکی نیز وجود خواهد داشت. چون برهم‌کنش الکتریکی مستقیماً بر اسپین الکترون اثر نمی‌کند، این جمله چهارقطبی فقط بر روی متغیرهای مداری الکترون‌ها اثر خواهد کرد.

حال اگر $I > 1$ ، سایر گشتاورهای چندقطبی الکتریکی یا مغناطیس هسته‌ای نیز می‌توانند وجود داشته باشند، که با افزایش I تعدادشان زیادتر می‌شود. گشتاورهای الکتریکی باعث به وجود آمدن جملات فوق ریز می‌شوند که فقط بر روی متغیرهای مداری الکترون عمل می‌کند، در حالی که جملات مغناطیسی هم بر متغیرهای اسپینی عمل می‌کنند و هم بر متغیرهای مداری. بنابراین، برای مقادیر زیاد I ، هامیلتونی

فوق ریز، دارای یک ساختار پیچیده است. با وجود این، در عمل، در بیشتر موارد می‌توان هامیلتونی فوق ریز را به جملات دوقطبی مغناطیسی و چهارقطبی الکتریکی محدود کرد. این مطلب به خاطر این واقعیت است که گشتاورهای هسته‌ای چندقطبی از مرتبه بالاتر از ۲، در ساختارهای فوق ریز اتمی سهم فوق‌العاده کوچکی دارند. از این رو، مشاهده این سهمها از طریق تجربی مشکل است. این امر، اساساً از اندازه فوق‌العاده کوچک هسته‌ها در مقایسه با گسترش فضایی a_0 توابع موج الکترونی، ناشی می‌شود.

۲. فرضیه ساده‌کننده‌ای که دربارهٔ میدان $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ ناشی از پروتون عنوان کردیم (یک میدان کاملاً یکنواخت در داخل کره، و یک میدان دوقطبی خارج از آن) ضروری نیست. هرگاه مغناطیس هسته‌ای یک توزیع دلخواه داشته باشد، که به میدانهای داخلی پیچیده‌تر $\mathbf{B}_i(\mathbf{r})$ منجر می‌شود، شکل (۲۵) هامیلتونی دوقطبی مغناطیسی باز هم معتبر باقی می‌ماند (اما با این فرض که گسترش فضایی هسته در مقایسه با a_0 قابل چشم‌پوشی باشد؛ به یادداشت زیر توجه کنید). این استدلال، در واقع، تعمیم مستقیمی است از آنچه در این مکمل داده شده است. کره، S_ε به مرکز مبدأ و شعاع $a_0 \ll \varepsilon$ را که شامل هسته‌هاست در نظر بگیرید.

اگر $I = 1/2$ باشد، میدان در خارج S_ε دارای شکل (۱۶) است، و چون ε در مقایسه با a_0 بسیار کوچک است، سهم آن به جملات (۱۳) و (۲۲) منجر می‌شود. اما سهم میدان $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ در داخل S_ε ، فقط به مقدار توابع موج الکترونی در مبدأ و به انتگرال $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ در داخل S_ε بستگی دارد. چون شار $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ از تمام سطوح بسته صفر است، انتگرال هر مؤلفهٔ $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ در S_ε را می‌توان به یک انتگرال در خارج S_ε ، که در آنجا $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ شکل (۱۶) را دارد، تبدیل کرد. یک محاسبهٔ ساده بار دیگر دقیقاً رابطه (۲۵) را می‌دهد؛ و از این رو رابطه (۲۵)، مستقل از فرضیهٔ ساده‌کننده‌ای است که عنوان کردیم.

اگر $I > 1/2$ ، سهم هسته در میدان الکترومغناطیسی خارج از S_ε منجر به هامیلتونی فوق ریز چندقطبی می‌شود که در یادداشت ۱ آن را مورد بحث قرار دادیم. از طرف دیگر، به راحتی می‌توان نشان داد که سهم میدان داخل S_ε هیچ جملهٔ جدیدی را تولید نمی‌کند؛ فقط دوقطبی مغناطیسی یک جملهٔ تماسی دارد.

۳. در تمام تذکرات فوق، از ابعاد هسته در مقابل ابعاد توابع موج الکترونی به‌طور کامل صرف‌نظر کرده‌ایم (حد $\rho_0/a_0 \rightarrow 0$ را در نظر گرفته‌ایم). واضح است که این مطلب همیشه واقع‌بینانه نیست، بخصوص برای اتمهای سنگین که هسته‌های آنها دارای گسترش فضایی نسبتاً بزرگی هستند. اگر این "آثار حجمی" را بررسی کنیم (و به‌عنوان مثال چندجمله از مرتبه‌های پایینتر در ρ_0/a_0 را نگه داریم)، یک رشته جملات جدید در هامیلتونی برهم‌کنش الکترون-هسته ظاهر می‌شود. قبلاً در مکمل ۴ از فصل ۱۱ که آثار توزیع شعاعی بار هسته‌ای را مطالعه کردیم (گشتاور چندقطبی هسته‌ای از مرتبه $k=0$) با این نوع اثر برخوردیم. پدیده‌های مشابهی در رابطه با توزیع فضایی مغناطیس هسته‌ای رخ می‌دهند و به اصطلاحاتی در جملات مختلف هامیلتونی فوق ریز (۲۹) منجر می‌شوند. بخصوص، وقتی توابع موج الکترونی در داخل هسته به‌طور قابل توجهی تغییر کند، باید به جملهٔ تماسی (۲۵) یک جملهٔ جدید بیفزاییم. این جملهٔ جدید نه صرفاً با $\delta(\mathbf{R})$ متناسب است و نه با گشتاور مغناطیسی کل هسته. بلکه به توزیع فضایی مغناطیس هسته‌ای

بستگی دارد. از لحاظ عملی، این جمله جالب توجه است زیرا، به ما امکان می‌دهد تا با استفاده از اندازه‌گیریهای دقیق ساختار فوق ریز اتمهای سنگین، اطلاعاتی درباره تغییر مغناطیس در داخل هسته مورد نظر به دست آوریم.

مراجع برای مطالعه بیشتر

هامیلتونی فوق ریز شامل جمله برهم‌کنش چهارقطبی الکتریکی:

Abraham (14.1), chap. VI; Kuhn (11.1), chap. VI, §B; Sobel'man (11.12), chap. 6.

مکمل ۲

محاسبه مقادیر متوسط هامیلتونی ساختار ریز در حالت‌های s ، $2s$ و $2p$

۱. محاسبه $\langle 1/R \rangle$ ، $\langle 1/R^2 \rangle$ و $\langle 1/R^3 \rangle$

۲. مقادیر متوسط $\langle W_{mv} \rangle$

۳. مقادیر متوسط $\langle W_D \rangle$

۴. محاسبه ضریب ξ_{2p} وابسته به W_{SO} در تراز $2p$

برای اتم هیدروژن هامیلتونی ساختار ریز W_f عبارت است از مجموع سه جمله

$$W_f = W_{mv} + W_{SO} + W_D \quad (1)$$

که در بخش ۲-۱ از فصل ۱۲ آن را مطالعه کردیم.

هدف این مکمل عبارت است از محاسبه مقادیر متوسط این سه عملگر برای حالت‌های s ، $2s$ و $2p$ اتم هیدروژن که در فصل ۱۲ برای سهولت آن را حذف کردیم. ابتدا، محاسبه مقادیر متوسط $\langle 1/R \rangle$ ، $\langle 1/R^2 \rangle$ و $\langle 1/R^3 \rangle$ را در این حالتها بیان می‌کنیم.

۱. محاسبه $\langle 1/R \rangle$ ، $\langle 1/R^2 \rangle$ و $\langle 1/R^3 \rangle$

تابع موج وابسته به یک حالت مانای اتم هیدروژن عبارت است از (فصل ۷، بخش ۷-۳)

$$\varphi_{n,l,m}(\mathbf{r}) = R_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (2)$$

که در آن $Y_l^m(\theta, \varphi)$ یک هماهنگ کروی است. توابع شعاعی $R_{n,l}(r)$ مربوط به حالت‌های s ، $2s$ و $2p$ عبارت‌اند از

$$\begin{cases} R_{1,0}(r) = 2(a_0)^{-3/2} e^{-r/a_0} \\ R_{2,0}(r) = 2(2a_0)^{-3/2} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0} \\ R_{2,1}(r) = (2a_0)^{-3/2} \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0} \end{cases} \quad (3)$$

که در آنها، a_0 شعاع بور است

$$a_0 = 4\pi\epsilon_0 \frac{\hbar}{m_e q^2} = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \quad (4)$$

توابع Y_l^m نسبت به φ بهنجارند. بنابراین، مقدار متوسط $\langle R^q \rangle$ می توان q ام (که در آن q یک عدد صحیح مثبت یا منفی است) عملگر R وابسته به $r = |\mathbf{r}|$ در حالت $|\varphi_{n,l,m}\rangle$ را می توان به صورت زیر نوشت^۱

$$\langle R^q \rangle_{n,l,m} = \int_0^\infty r^{q+2} |R_{n,l}(r)|^2 dr \quad (5)$$

بنابراین کمیت مورد نظر، به m بستگی ندارد. اگر (۳) را در (۵) قرار دهیم، انتگرالهایی به شکل زیر ظاهر می شوند

$$I(k, p) = \int_0^\infty r^k e^{-pr/a_0} dr \quad (6)$$

که در آن k و p اعداد صحیح هستند. در اینجا فرض خواهیم کرد که $k \geq 0$ ، یعنی $q \geq -2$. انتگرال گیری جزء به جزء، مستقیماً به نتیجه زیر منجر می شود

$$\begin{aligned} I(k, p) &= \left[-\frac{a_0}{p} e^{-pr/a_0} r^k \right]_0^\infty + \frac{ka_0}{p} \int_0^\infty r^{k-1} e^{-pr/a_0} dr \\ &= \frac{ka_0}{p} I(k-1, p) \end{aligned} \quad (7)$$

چون، به علاوه

$$I(0, p) = \int_0^\infty e^{-pr/a_0} dr = \frac{a_0}{p} \quad (8)$$

با روش بازگشت، به دست می آوریم

$$I(k, p) = k! \left(\frac{a_0}{p} \right)^{k+1} \quad (9)$$

۱. البته، این مقدار متوسط فقط به ازای مقادیری از q که انتگرال (۵) را همگرا می کند، وجود دارد.

اکنون، این نتیجه را بر مقادیر متوسطی که می‌خواهیم آنها را تعیین کنیم، اعمال می‌کنیم؛ در نتیجه

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{R} \right\rangle_{1s} &= \frac{\psi}{a_0^3} \int_0^\infty r e^{-r/a_0} dr \\ &= \frac{\psi}{a_0^3} I(1, 2) = \frac{1}{a_0} \end{aligned} \quad (10\text{-الف})$$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{R} \right\rangle_{2s} &= \frac{\psi}{\lambda a_0^3} \int_0^\infty r \left[1 - \frac{r}{2a_0} \right]^2 e^{-r/a_0} dr \\ &= \frac{1}{2a_0^3} \left[I(1, 1) - \frac{1}{a_0} I(2, 1) + \frac{1}{4a_0^3} I(3, 1) \right] \\ &= \frac{1}{4a_0} \end{aligned} \quad (10\text{-ب})$$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{R} \right\rangle_{2p} &= \frac{1}{\lambda a_0^3} \frac{1}{\sqrt{3}} \int_0^\infty r \left(\frac{r}{a_0} \right)^2 e^{-r/a_0} dr \\ &= \frac{1}{24a_0^3} I(3, 1) = \frac{1}{4a_0} \end{aligned} \quad (10\text{-ج})$$

همچنین

$$\left\langle \frac{1}{R^2} \right\rangle_{1s} = \frac{\psi}{a_0^3} I(0, 2) = \frac{2}{a_0^2} \quad (11\text{-الف})$$

$$\left\langle \frac{1}{R^2} \right\rangle_{2s} = \frac{1}{2a_0^3} \left[I(0, 1) - \frac{1}{a_0} I(1, 1) + \frac{1}{4a_0^3} I(2, 1) \right] = \frac{1}{4a_0^2} \quad (11\text{-ب})$$

$$\left\langle \frac{1}{R^2} \right\rangle_{2p} = \frac{1}{24a_0^3} I(2, 1) = \frac{1}{12a_0^2} \quad (11\text{-ج})$$

واضح است که عبارت مقدار متوسط $1/R^2$ برای حالت‌های 1s و 2s بی‌معنی است [زیرا انتگرال (5) واگراست]. برای حالت 2p این مقدار متوسط برابر است با

$$\left\langle \frac{1}{R^2} \right\rangle_{2p} = \frac{1}{24a_0^3} I(1, 1) = \frac{1}{24a_0^2} \quad (12)$$

۲. مقادیر متوسط $\langle W_{mv} \rangle$

فرض کنید که

$$H_0 = \frac{P^2}{2m_e} + V \quad (۱۳)$$

همیلتونی الکترون تحت تأثیر پتانسیل کولنی باشد. داریم

$$P^2 = 2m_e^2 [H_0 - V]^2 \quad (۱۴-الف)$$

با

$$V = -\frac{e^2}{R} \quad (۱۴-ب)$$

بنابراین

$$W_{mv} = -\frac{1}{2m_e c^2} [H_0 - V]^2 \quad (۱۵)$$

مقدار متوسط هر دو طرف این معادله در حالت $(\varphi_{n,l,m})$ را حساب می‌کنیم. چون H_0 و V عملگرهای هرمیتی هستند، به دست می‌آوریم

$$\langle W_{mv} \rangle_{n,l,m} = -\frac{1}{2m_e c^2} \left[(E_n)^2 + 2E_n e^2 \langle \frac{1}{R} \rangle_{n,l} + e^4 \langle \frac{1}{R^2} \rangle_{n,l} \right] \quad (۱۶)$$

در این رابطه فرض کرده‌ایم که

$$E_n = -\frac{E_I}{n^2} = -\frac{1}{2n^2} \alpha^2 m_e c^2 \quad (۱۷)$$

باشد، که در آن

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \quad (۱۸)$$

ثابت ساختار ریز است.

اگر تساوی (۱۶) را به مورد حالت ۱s اعمال کنیم، با استفاده از (۱۰-الف) و (۱۱-الف)، به دست می آوریم

$$\langle W_{mv} \rangle_{1s} = -\frac{1}{2m_e c^2} \left[\frac{1}{4} \alpha^2 m_e c^2 - \alpha^2 m_e c^2 \frac{e^2}{a_0} + 2 \frac{e^2}{a_0} \right] \quad (19)$$

یعنی، چون بنابر (۴) و (۱۸)، $e^2/a_0 = \alpha^2 m_e c^2$ ،

$$\langle W_{mv} \rangle_{1s} = -\frac{1}{2} \alpha^2 m_e c^2 \left[\frac{1}{4} - 1 + 2 \right] = -\frac{5}{8} \alpha^2 m_e c^2 \quad (20)$$

همین نوع محاسبه، برای حالت ۲s، مقدار زیر را به دست می دهد

$$\langle W_{mv} \rangle_{2s} = -\frac{1}{2} \alpha^2 m_e c^2 \left[\left(\frac{1}{8} \right)^2 - 2 \frac{1}{8} \frac{1}{4} + \frac{1}{4} \right] = -\frac{13}{128} \alpha^2 m_e c^2 \quad (21)$$

و، برای حالت ۲p داریم

$$\langle W_{mv} \rangle_{2p} = -\frac{1}{2} \alpha^2 m_e c^2 \left[\left(\frac{1}{8} \right)^2 - 2 \frac{1}{8} \frac{1}{4} + \frac{1}{12} \right] = -\frac{7}{384} \alpha^2 m_e c^2 \quad (22)$$

۳. مقادیر متوسط $\langle W_D \rangle$

با در نظر گرفتن (۱۴-ب) و اینکه $\Delta(1/r) = -4\pi\delta(\mathbf{r})$ ، مقدار متوسط W_D در حالت $|\varphi_{n,l,m}\rangle$ را می توان به صورت زیر نوشت [فرمول (۱۲-۱۷) از فصل ۱۲ را نیز ببینید]

$$\langle W_D \rangle_{n,l,m} = \frac{\hbar}{\lambda m_e^2 c^2} 4\pi e^2 |\varphi_{n,l,m}(\mathbf{r} = \mathbf{0})|^2 \quad (23)$$

اگر $\varphi_{n,l,m}(\mathbf{r} = \mathbf{0}) = 0$ ، یعنی اگر $l \neq 0$ ، این عبارت صفر می شود. بنابراین

$$\langle W_D \rangle_{2p} = 0 \quad (\text{الف-24})$$

برای ترازهای ۱s و ۲s، با استفاده از (۲)، (۲۳) و این واقعیت که $Y_0^0 = 1/\sqrt{4\pi}$ ، به دست می آوریم

$$\langle W_D \rangle_{1s} = \frac{\hbar^2}{\lambda m_e^2 c^2} e^2 |R_{1,0}(0)|^2 = \frac{1}{4} \alpha^2 m_e c^2 \quad (\text{ب-24})$$

و همچنین

$$\langle W_D \rangle_{rs} = \frac{\hbar^2}{4m_e^2 c^2} e^2 |R_{r,s}(0)|^2 = \frac{1}{16} \alpha^2 m_e c^2 \quad (24-ج)$$

۴. محاسبه ضریب ξ_{rp} وابسته به W_{SO} در تراز $2p$ در بخش ۲-۳-ج-۲ از فصل ۱۲، ضریب ξ_{rp} را به صورت زیر تعریف کردیم

$$\xi_{rp} = \frac{e^2}{2m_e^2 c^2} \int_0^\infty \frac{|R_{r,1}(r)|^2}{r} dr \quad (25)$$

بر طبق (۳)

$$\xi_{rp} = \frac{e^2}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{24a_0^3} I(1, 1) \quad (26)$$

در این صورت رابطه (۹) می دهد

$$\xi_{rp} = \frac{e^2}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{24a_0^3} = \frac{1}{48\hbar^2} \alpha^2 m_e c^2 \quad (27)$$

مرجع

چندین انتگرال شعاعی برای اتمهای هیدروژن-گونه در مرجع زیر داده شده است:

Bethe and Salpeter (11.10).

ساختار فوق ریز و اثر زیمان برای میونیوم و پوزیترونیوم

۱. ساختار فوق ریز حالت پایه $1s$

۲. اثر زیمان در حالت پایه $1s$

الف) هامیلتونی زیمان

ب) انرژیهای حالتی مانا

ج) نمودار زیمان برای میونیوم

د) نمودار زیمان برای پوزیترونیوم

در مکمل ۱ از فصل ۷، چند سیستم هیدروژن-گونه را که مانند اتم هیدروژن از دو ذره با بار مخالف تشکیل شده‌اند و یکدیگر را به‌طور الکتروستاتیکی جذب می‌کنند، بررسی کردیم. از میان تمام این سیستمها، دو سیستم مخصوصاً جالب توجه هستند: میونیوم (مرکب از یک الکترون، e^- ، و یک میون مثبت، μ^+) و پوزیترونیوم (مشکل از یک الکترون، e^- ، و یک پوزیترون، e^+). اهمیت آنها در این واقعیت نهفته است که ذرات مختلفی که در این دو سیستم وارد می‌شوند (الکترون، پوزیترون، و میون) مستقیماً تحت تأثیر برهم‌کنشهای قوی قرار نمی‌گیرند (در حالی که پروتون قرار می‌گیرد). از این رو، بررسی نظری و عملی پوزیترونیوم و میونیوم، امکان آزمودن مستقیم اعتبار الکترودینامیک کوانتومی را فراهم می‌آورد.

در واقع، دقیقترین اطلاعاتی که اکنون دربارهٔ این دو سیستم داریم از مطالعهٔ ساختار فوق ریز حالت پایه $1s$ آنها به‌دست آمده است [خطهای اپتیکی که حالت پایه $1s$ را به حالتیهای برانگیختهٔ مختلف وصل می‌کنند اخیراً برای پوزیترونیوم مشاهده شده است؛ مرجع (۲۵-۱۱) آخر کتاب]. این ساختار فوق ریز مانند اتم هیدروژن، نتیجهٔ برهم‌کنشهای مغناطیسی بین اسپینهای دو ذره است. بعضی جنبه‌های جالب ساختار فوق ریز و اثر زیمان برای میونیوم و پوزیترونیوم را در این مکمل توضیح خواهیم داد.

۱. ساختار فوق ریز حالت پایه $1s$

فرض کنید S_1 اسپین الکترون و S_2 اسپین ذرهٔ دیگر (میون یا پوزیترون، که هر دو ذرات با اسپین $1/2$ هستند) باشد. در این صورت، واگنی حالت پایه $1s$ ، نظیر هیدروژن، برابر چهار است. می‌توانیم از نظریهٔ اختلال مانا برای مطالعهٔ اثر برهم‌کنشهای مغناطیسی بین S_2 و S_1 ، بر حالت پایه $1s$ استفاده کنیم. این محاسبه مشابه محاسبهٔ بخش ۱۲-۴ از فصل ۱۲ است. مسئله‌های

که با آن روبه‌رو هستیم عبارت است از دو اسپین $1/2$ که توسط برهم‌کنشی به صورت زیر به هم جفت شده‌اند

$$\mathcal{S}_1 \cdot \mathcal{S}_2 \quad (1)$$

که در آن \mathcal{S} ثابتی است که به سیستم مورد بررسی بستگی دارد. سه مقدار \mathcal{S} را که به هیدروژن، میونیوم و پوزیترونیوم مربوط‌اند به ترتیب با \mathcal{S}_H ، \mathcal{S}_M ، \mathcal{S}_P نمایش می‌دهیم. به سادگی می‌توان دید

$$\mathcal{S}_H < \mathcal{S}_M < \mathcal{S}_P \quad (2)$$

زیرا هر چه جرم ذره (۲) کوچکتر باشد، گشتاور مغناطیسی آن بیشتر است. اما، پوزیترون در حدود 20° بار از میون سبکتر و میون نزدیک به 1° بار از پروتون سبکتر است.

یادداشت:

نظریه فصل ۱۲ برای مطالعه فوق‌العاده دقیق ساختار فوق ریز هیدروژن، میونیوم، و پوزیترونیوم کافی نیست. بخصوص، هامیلتونی فوق ریز W_{hr} که در بخش ۱۲-۲-۲ از این فصل معرفی کردیم، تنها قسمتی از برهم‌کنشهای بین ذرات (۱) و (۲) را توصیف می‌کند. به عنوان مثال، این واقعیت که الکترون و پوزیترون یاد ذره هم هستند (می‌توانند همدیگر را نابود و فوتون تولید کنند) عامل یک جفت‌شدگی اضافی بین آنهاست که در هیدروژن و میونیوم معادلی ندارد. به علاوه، یک رشته تصحیحات (نسبیتی، تابشی، آثار پس‌زنی و غیره) را باید در نظر بگیریم. محاسبه این تصحیحات پیچیده است و باید توسط الکترودینامیک کوانتومی بررسی شود. بالاخره، برای هیدروژن، تصحیحاتی هسته‌ای، که به ساختار و قطبش‌پذیری پروتون مربوط‌اند نیز وجود دارد. با وجود این، می‌توان نشان داد که شکل (۱) جفت‌شدگی بین \mathcal{S}_1 و \mathcal{S}_2 معتبر باقی می‌ماند و ثابت \mathcal{S} با رابطه‌ای که خیلی پیچیده‌تر از فرمول (۱۲-۶۰) از فصل ۱۲ است داده می‌شود. سیستمهای هیدروژن-گونه‌ای که در این مکمل مطالعه می‌کنیم، دقیقاً به این خاطر حائز اهمیت هستند که به ما امکان می‌دهند تا مقدار نظری \mathcal{S} را با نتایج تجربی مقایسه کنیم.

ویژه‌حالت‌های خاص $\mathcal{S}_1 \cdot \mathcal{S}_2$ عبارت‌اند از حالت‌های $|F, m_F\rangle$ که در آن F و m_F اعداد کوانتومی مربوط به تکانه زاویه‌ای کل هستند

$$F = S_1 + S_2 \quad (3)$$

ساختار فوق ریز و اثر زیمان برای میونیوم و پوزیترونیم ۷۳

نظیر مورد اتم هیدروژن، F می تواند دو مقدار $F = 1$ و $F = 0$ را اختیار کند. دو تراز $F = 1$ و $F = 0$ ، به ترتیب دارای انرژیهای برابر با $\mathcal{A} \hbar^2 / 4$ و $-3\mathcal{A} \hbar^2 / 4$ هستند. فاصله جدایی $\mathcal{A} \hbar^2$ آنها ساختار فوق ریز حالت پایه $1s$ را می دهد. این فاصله که برحسب MHz بیان می شود، برای میونیوم برابر است با

$$\frac{\hbar}{2\pi} \mathcal{A}_M = 4463,317 \pm 0,021 \text{ MHz} \quad (4)$$

و برای پوزیترونیم برابر است با

$$\frac{\hbar}{2\pi} \mathcal{A}_P = 20,3403 \pm 12 \text{ MHz} \quad (5)$$

۲. اثر زیمان در حالت پایه $1s$

الف) هامیلتونی زیمان

اگر یک میدان ایستای B_0 به موازات Oz اعمال کنیم، باید به هامیلتونی ساختار ریز (۱)، هامیلتونی زیمان را که جفت شدگی B_0 به گشتاورهای مغناطیسی

$$M_1 = \gamma_1 S_1 \quad (6)$$

و

$$M_2 = \gamma_2 S_2 \quad (7)$$

دو اسپین، با نسبتهای ژیرومغناطیسی γ_1 و γ_2 ، را توصیف می کند بیفزاییم. اگر قرار دهیم

$$\omega_1 = -\gamma_1 B_0 \quad (8)$$

$$\omega_2 = -\gamma_2 B_0 \quad (9)$$

این هامیلتونی زیمان را می توان به صورت زیر نوشت

$$\omega_1 S_{1z} + \omega_2 S_{2z} \quad (10)$$

در مورد هیدروژن، گشتاور مغناطیسی پروتون از گشتاور مغناطیسی الکترون بسیار کوچکتر است. ما از این خاصیت در بخش ۱۲-۵-۱ از فصل ۱۲ برای چشمپوشی از جفت‌شدگی زیمان پروتون، در مقایسه با جفت‌شدگی زیمان الکترون، استفاده کردیم.^۱ یک چنین تقریبی برای میونیوم کمتر موجه است، زیرا گشتاور مغناطیسی میون از گشتاور مغناطیسی پروتون بزرگتر است. از این رو، هر دو جمله (۱۰) را در نظر خواهیم گرفت. علاوه بر این، برای پوزیترونیم این دو دارای اهمیت یکسان هستند: الکترون و پوزیترون دارای جرمهای مساوی و بارهای مخالفاند، بنابراین

$$\gamma_1 = -\gamma_2 \quad (11)$$

یا

$$\omega_1 = -\omega_2 \quad (12)$$

ب) انرژیهای حالت‌های مانا

وقتی B_0 صفر نیست. برای پیدا کردن انرژیهای حالت مانا، لازم است که ماتریس معرف هامیلتونی کل

$$\mathcal{H} S_1 \cdot S_2 + \omega_1 S_{1z} + \omega_2 S_{2z} \quad (13)$$

را در یک پایه راست‌هنجار دلخواه، به‌عنوان مثال، در پایه $\{|F, m_F\rangle\}$ ، قطری کنیم. در این صورت، محاسبه‌ای مشابه با محاسبه بخش ۱۲-۵-۴ از فصل ۱۲ به ماتریس زیر منتهی می‌شود (چهار بردار پایه به ترتیب زیر آرایش یافته‌اند

$$\{|1, 1\rangle, |1, -1\rangle, |1, 0\rangle, |0, 0\rangle\} \quad (14)$$

۱. یادآور می‌شویم که نسبت زیرمغناطیسی اسپین الکترون برابر است با $\gamma_1 = 2\mu_B/\hbar$ (μ_B : ماگنتون بور). بنابراین اگر قرار دهیم $\omega = -\mu_B B_0/\hbar$ (بسامد زاویه‌ای لارمور)، ثابت ω_1 که با رابطه (۸) تعریف می‌شود برابر می‌شود با 2ω (وانگهی این همان نمادگذارایی است که در بخش ۱۲-۵ از فصل ۱۲ به‌کار بردیم؛ بنابراین، برای به‌دست آوردن نتایج آن مکمل، کافی است که، در این مکمل، ω_1 را با 2ω و ω_2 را توسط 0 جایگزین کنیم).

$\frac{\mathcal{A}\hbar^2}{4} + \frac{\hbar}{2}(\omega_1 + \omega_2)$	◦	◦	◦
◦	$\frac{\mathcal{A}\hbar^2}{4} - \frac{\hbar}{2}(\omega_1 + \omega_2)$	◦	◦
◦	◦	$\frac{\mathcal{A}\hbar^2}{4}$	$\frac{\hbar}{2}(\omega_1 - \omega_2)$
◦	◦	$\frac{\hbar}{2}(\omega_1 - \omega_2)$	$-\frac{3\mathcal{A}\hbar^2}{4}$

(۱۴)

ماتریس (۱۴) را می‌توانیم به ۲ زیر ماتریس 1×1 و یک زیر ماتریس 2×2 تجزیه کنیم. از این رو، از میان ویژه مقادارها، دو ویژه مقدار عبارت‌اند از

$$\begin{cases} E_1 = \frac{\mathcal{A}\hbar^2}{4} + \frac{\hbar}{2}(\omega_1 + \omega_2) & (15) \\ E_2 = \frac{\mathcal{A}\hbar^2}{4} - \frac{\hbar}{2}(\omega_1 + \omega_2) & (16) \end{cases}$$

این ویژه مقادارها، به ترتیب با حالت‌های $|1, 1\rangle$ و $|1, -1\rangle$ ، متناظرند که علاوه بر این، بر حالت‌های $|+, +\rangle$ و $|-, -\rangle$ از پایه $\{|\epsilon_1, \epsilon_2\rangle\}$ ، که از ویژه حالت‌های مشترک S_{1z} و S_{2z} تشکیل شده است، منطبق‌اند. دو ویژه مقدار دیگر را می‌توانیم با قطری کردن زیر ماتریس 2×2 باقیمانده به دست آوریم. این دو ویژه مقدار برابرند با

$$E_3 = -\frac{\mathcal{A}\hbar^2}{4} + \sqrt{\left(\frac{\mathcal{A}\hbar^2}{2}\right)^2 + \frac{\hbar^2}{4}(\omega_1 - \omega_2)^2} \quad (17)$$

$$E_4 = -\frac{\mathcal{A}\hbar^2}{4} - \sqrt{\left(\frac{\mathcal{A}\hbar^2}{2}\right)^2 + \frac{\hbar^2}{4}(\omega_1 - \omega_2)^2} \quad (18)$$

این مقادیر در یک میدان ضعیف، به ترتیب با حالت‌های $|1, 0\rangle$ و $|0, 0\rangle$ ، و در یک میدان قوی با حالت‌های $|+, -\rangle$ و $|-, +\rangle$ متناظرند.

ج) نمودار زیمان برای میونیوم

تنها اختلافات موجود بین نتایج حاضر و نتایج بخش ۱۲-۵-۴ از فصل ۱۲، از این واقعیت ناشی می‌شوند که در اینجا، ما جفت‌شدگی زیمان ذره (۲) را منظور می‌کنیم. این اختلافات تنها در یک میدان به حد کافی قوی پدید می‌آیند.

بنابراین وضعیت انرژیهای E_+ و E_- را، وقتی $\mathcal{A}\hbar^2 \gg \hbar(\omega_1 - \omega_2)$ است بررسی می‌کنیم.

در این مورد

$$E_+ \simeq -\frac{\mathcal{A}\hbar^2}{4} + \frac{\hbar}{2}(\omega_1 - \omega_2) \quad (19)$$

$$E_- \simeq -\frac{\mathcal{A}\hbar^2}{4} - \frac{\hbar}{2}(\omega_1 - \omega_2) \quad (20)$$

حال، رابطه (۱۹) را با (۱۵) و رابطه (۲۰) را با (۱۶) مقایسه کنید. مشاهده می‌کنیم که، در یک میدان قوی، ترازهای انرژی، دیگر مانند بخش ۱۲-۵-۳ از فصل ۱۲ با جفت خطهای موازی نشان داده نمی‌شوند. شیب مجانبهای ترازهای E_+ و E_- به ترتیب عبارت‌اند از $-\hbar/2(\gamma_1 + \gamma_2)$ و $-\hbar/2(\gamma_1 - \gamma_2)$ ، و شیب مجانبهای ترازهای E_+ و E_- عبارت‌اند از $\hbar/2(\gamma_1 + \gamma_2)$ و $\hbar/2(\gamma_1 - \gamma_2)$. چون دو ذره (۱) و (۲) بارهای مخالف دارند، γ_1 و γ_2 مختلف‌العلامه‌اند. در نتیجه، در یک میدان به قدر کافی قوی، تراز E_+ (که در این صورت با حالت $(+, -)$ متناظر است) بالای تراز E_- (حالت $(+, +)$) قرار می‌گیرد، زیرا شیب آن، $-\hbar/2(\gamma_1 - \gamma_2)$ ، از $-\hbar/2(\gamma_1 + \gamma_2)$ بزرگتر است.

بنابراین، فاصله بین ترازهای E_+ و E_- به صورت زیر نسبت به B_0 تغییر می‌کند (شکل ۱): با شروع

از ۰، افزایش می‌یابد و به ازای مقداری از B_0 که مشتق

$$E_+ - E_- = \frac{\mathcal{A}\hbar^2}{4} + f(B_0) \quad (21)$$

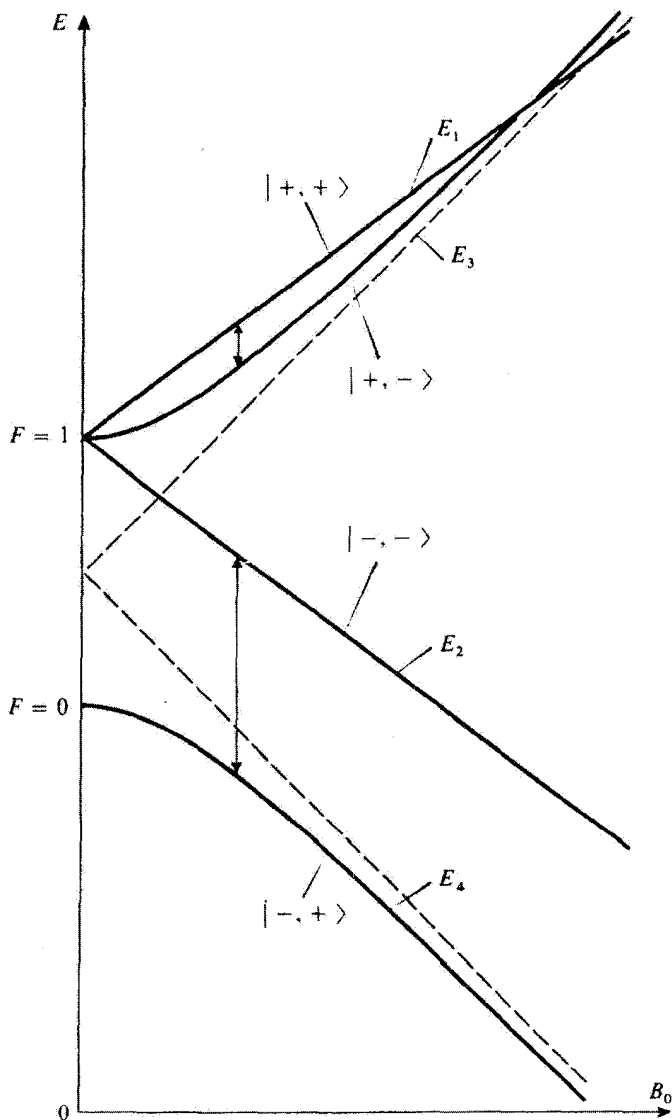
را صفر می‌کند از یک بیشینه می‌گذرد؛ که در آن $f(B_0)$ برابر است با

$$f(B_0) = -\frac{\hbar}{4}(\gamma_1 + \gamma_2)B_0 - \sqrt{\left(\frac{\mathcal{A}\hbar^2}{4}\right)^2 + \frac{\hbar^2 B_0^2}{4}(\gamma_1 - \gamma_2)^2} \quad (22)$$

سپس این فاصله بار دیگر صفر می‌شود، و بالاخره بدون هیچ قیدی افزایش می‌یابد. اما در مورد فاصله بین ترازهای E_+ و E_- ، این فاصله از مقدار $\mathcal{A}\hbar^2$ شروع می‌شود، و با کاهش مداوم و به ازای مقداری از B_0 که مشتق

$$E_+ - E_- = \frac{\mathcal{A}\hbar^2}{4} - f(B_0) \quad (23)$$

را صفر می‌کند از یک کمینه می‌گذرد و سپس بدون هیچ قیدی افزایش می‌یابد.



شکل ۱ نمودار زیمان برای حالت پایه $1s$ میونیوم. چون در اینجا از جفت‌شدگی زیمان بین گشتاور مغناطیسی میون و میدان ایستای B_0 چشم‌نمی‌پوشیم، دو خط مستقیم (که، در یک میدان قوی، با یک سمتگیری اسپین الکترونی ولی دو سمتگیری متفاوت اسپین میون متناظرند)، دیگر همانند مورد هیدروژن موازی نیستند (در نمودار زیمان شکل ۱۲-۹ از فصل ۱۲، از بسامد زاویه‌ای لارمور ω_H پروتون صرف‌نظر شده بود). به‌ازای یک مقدار از میدان ایستای B_0 ، شکافتگی بین ترازهای E_1 و E_2 از یک طرف و E_2 و E_3 از طرف دیگر به ترتیب بیشینه و کمینه است. پیکانها، نشان‌دهنده انتقالهایی هستند که به‌طور تجربی برای این مقدار B_0 مطالعه شده‌اند.

چون یک تابع از $f(B_0)$ هم در (۲۱) و هم در (۲۳) ظاهر می‌شود، می‌توانیم نشان دهیم که، به‌ازای یک مقدار از B_0 [مقداری که مشتق $f(B_0)$ را صفر می‌کند]، فاصله بین ترازهای E_1 و E_2 و فاصله بین ترازهای E_2 و E_3 یا بیشینه است و یا کمینه. از این خاصیت اخیراً برای بالا بردن دقت تعیین تجربی ساختار فوق ریز میونیوم استفاده شده است.

با متوقف کردن میونهای قطبی شده (به‌عنوان مثال، در حالت $(+)$) در یک هدف گاز نادر، می‌توان در یک میدان قوی، اتمهایی از میونیوم فراهم ساخت که ترجیحاً در حالت‌های $(+, +)$ و $(-, +)$ یافت شوند. در این حال اگر دو میدان بسامد رادیویی، که بسامدهای آنها نزدیک به $(E_1 - E_2)/h$ و $(E_2 - E_3)/h$ هستند، به‌طور همزمان اعمال کنیم، انتقال‌های تشدید از $(+, +)$ به $(+, -)$ و از $(-, +)$ به $(-, -)$ القا خواهیم کرد (پیکانها در شکل ۱). همین انتقالها هستند که در تجربه آشکار می‌شوند، زیرا اینها با یک واژگونی در اسپین میون متناظرند که توسط تغییری در ناهمسانگردی پوزیترونی گسیل شده در خلال واپاشی β میونها، ظاهر می‌شوند. اگر میدان B_0 که ما در آن عمل می‌کنیم، به‌گونه‌ای باشد که مشتق $f(B_0)$ صفر شود، ناهمگنیهای میدان ایستا، که ممکن است از یک نقطه به نقطه دیگر ظرف محتوی گاز نادر وجود داشته باشند، مزاحمتی ایجاد نمی‌کنند، زیرا تغییر B_0 ، تا مرتبه اول، در بسامدهای تشدید میونیوم، $(E_1 - E_2)h$ و $(E_2 - E_3)/h$ ، تأثیر نمی‌گذارد [مجمع (۲۴-۱۱) آخر کتاب].

یادداشت:

برای حالت پایه اتم هیدروژن، وقتی جفت‌شدگی زیمان بین اسپین پروتون و میدان B_0 را به حساب آوریم، یک نمودار زیمان مشابه با نمودار شکل ۱ به‌دست خواهیم آورد. ■

د) نمودار زیمان برای پوزیترونیوم

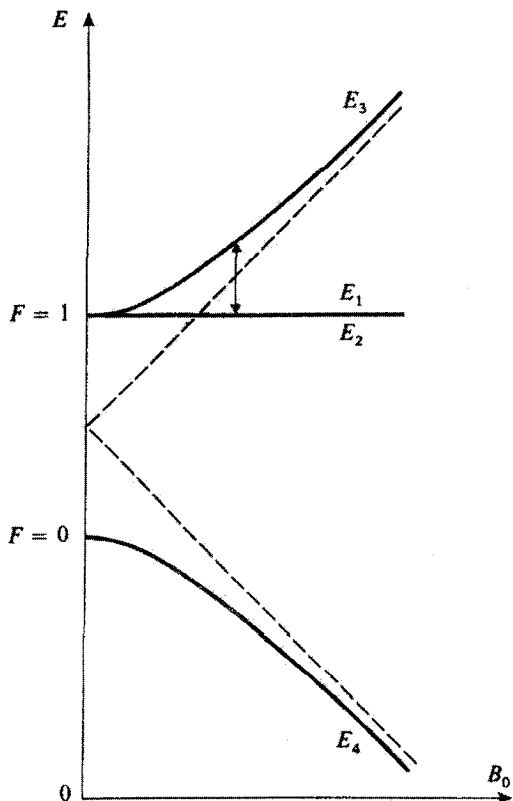
اگر در روابط (۱۵) و (۱۶) قرار دهیم $\omega_1 = -\omega_2$ (این خاصیت نتیجه مستقیم این واقعیت که پوزیترون پاد ذره الکترون است) مشاهده خواهیم کرد که ترازهای E_1 و E_2 مستقل از B_0 هستند

$$E_1 = E_2 = \frac{\mathcal{A} \hbar^2}{4} \quad (24)$$

از طرف دیگر، از روابط (۱۷) و (۱۸) به‌دست می‌آوریم

$$E_3 = -\frac{\mathcal{A} \hbar^2}{4} + \sqrt{\left(\frac{\mathcal{A} \hbar^2}{2}\right)^2 + \hbar^2 \gamma_1^2 B_0^2} \quad (25)$$

$$E_4 = -\frac{\mathcal{A} \hbar^2}{4} - \sqrt{\left(\frac{\mathcal{A} \hbar^2}{2}\right)^2 + \hbar^2 \gamma_1^2 B_0^2} \quad (26)$$



شکل ۲ نمودار زیمان برای حالت پایه ۱s پوزیترونوم. مانند موارد هیدروژن و میونوم، این نمودار متشکل است از یک هذلولی و دو خط راست. اما، چون نسبتهای زیرمغناطیسی الکترون و پوزیترون مساوی و مختلف‌العلامه‌اند، شیب دو خط راست صفر است، و در نتیجه، برهم منطبق‌اند (در دو حالت متناظر، با انرژی E_1 و E_2 ، گشتاور مغناطیسی کل صفر است، زیرا اسپینهای الکترون و پوزیترون موازی‌اند). پیکان، نشان‌دهنده انتقالی است که به‌طور تجربی مطالعه شده است.

بنابراین، نمودار زیمان برای پوزیترونیم به‌صورت شکل ۲ است. این نمودار متشکل است از دو خط مستقیم منطبق بر هم و موازی با محور B_0 و یک هذلولی.

در واقع پوزیترونوم پایدار نیست و با گسیل فوتون و امی‌باشد. با در نظر گرفتن ملاحظات تقارنی، می‌توان نشان داد که در یک میدان صفر، حالت $F = 0$ (حالت یک‌تایی اسپین، یا "پوزیترونوم") با گسیل دو فوتون و امی‌باشد و نیم‌عمر آن در حدود $\tau_0 \approx 1.25 \times 10^{-16}$ sec است. از طرف دیگر، حالت $F = 1$ (حالت سه‌تایی اسپین، یا "ارتوپوزیترونوم") فقط می‌تواند با گسیل سه فوتون و اباشد (زیرا انتقال دو فوتونی

ممنوع است). احتمال وقوع این فرایند خیلی کمتر و نیم عمر "سه تایی" خیلی طولانیتر یعنی، در حدود $\tau_3 \approx 1.4 \times 10^{-7} \text{ sec}$ است.

وقتی یک میدان ایستا اعمال می‌کنیم، ترازهای E_1 و E_2 همان طول عمرها را حفظ می‌کنند، زیرا ویژه‌حالت‌های متناظر، به B بستگی ندارند. از طرف دیگر، حالت $(1, 0)$ یا حالت $(0, 0)$ "آمیخته می‌شود" و بر عکس. محاسباتی شبیه محاسبات مکمل ۸ از فصل ۴ نشان می‌دهند که طول عمر تراز E_3 نسبت به مقدار τ_3 آن در میدان صفر، کاهش می‌یابد (طول عمر تراز E_3 نسبت به مقدار τ_3 افزایش می‌یابد). در این صورت، اتمهای پوزیترونیم در حالت E_3 دارای احتمال معینی برای واپاشی توسط گسیل دو فوتون هستند.

این نابرابری طول عمرهای سه حالت با انرژیهای E_1, E_2, E_3 و وقتی B غیر صفر است، مبنای روشهای تعیین ساختار فوق ریز پوزیترونیم است. تشکیل اتمهای پوزیترونیم، که از گیراندازی پوزیترون توسط یک الکترون ناشی می‌شوند، عموماً چهار حالت با انرژیهای E_1, E_2, E_3 و E_4 را به طور مساوی اشغال می‌کند. در میدان غیر صفر B ، دو حالت E_1 و E_2 آهسته‌تر از حالت E_3 و امی‌پاشند، از این رو در حالت مانا، تجمع بیشتری دارند. در این صورت، اگر یک میدان بسامد رادیویی که با بسامد

$$\frac{(E_3 - E_1)}{h} = \frac{(E_3 - E_2)}{h}$$

نوسان می‌کند اعمال کنیم، انتقالهای تشدید از حالت‌های E_1 و E_2 به حالت E_3 القا خواهیم کرد (پیکان شکل ۲). این کار، آهنگ واپاشی از طریق گسیل دو فوتون را افزایش می‌دهد، و این به نوبه خود، آشکارسازی تشدید را وقتی (با B ثابت) بسامد میدان نوسان‌کننده را تغییر دهیم ممکن می‌سازد. به این ترتیب، تعیین $(E_3 - E_1)$ به ازای یک مقدار معین از B به ما امکان می‌دهد تا با استفاده از روابط (۲۴) و (۲۵)، ثابت \hbar را پیدا کنیم.

در یک میدان صفر، انتقالهای تشدید می‌توانند بین دو تراز $F = 0$ و $F = 1$ که به طور نابرابر اشغال شده‌اند نیز القا شود. اما، بسامد تشدید متناظر که با رابطه (۵) داده می‌شود، بالاست و به سادگی نمی‌توان آن را به طور تجربی ایجاد کرد. به همین دلیل، عموماً ترجیح داده می‌شود که از انتقال "بسامد پایین" که توسط پیکان در شکل ۲ نشان داده شده‌اند استفاده شود.

مراجع برای مطالعه بیشتر

زیربخش "اتمهای برانگیخته" از بخش (۱۱) کتاب‌شناسی را ببینید.
نابودی پوزیترونیم در مرجع زیر مورد بحث قرار گرفته است:

مکمل ۴

تأثیر اسپین الکترونی بر اثر زیمان خط تشدید هیدروژن

۱. مقدمه

۲. نمودارهای زیمان ترازهای $1s$ و $2s$

۳. نمودار زیمان تراز $2p$

۴. اثر زیمان خط تشدید

الف) بیان مسئله

ب) مؤلفه‌های زیمان در میدان ضعیف

ج) مؤلفه‌های زیمان در میدان قوی. اثر پاشن-بک

۱. مقدمه

اگر اسپین الکترون و برهم‌کنشهای مغناطیسی وابسته به آن را منظور کنیم، باید نتایج مکمل ۴ از فصل ۷ درباره اثر زیمان برای خط تشدید طیف اتم هیدروژن (انتقال $2p \leftrightarrow 1s$) را تغییر دهیم. این کاری است که در این مکمل، با استفاده از نتایج فصل ۱۲، انجام خواهیم داد.

برای ساده کردن بحث، از آثار مربوط به اسپین هسته‌ای (که از آثار مربوط به اسپین الکترون بسیار کوچکترند) چشم‌پوشی می‌نماییم. بنابراین، جفت‌شدگی فوق ریز W_{hf} (فصل ۱۲، بخش ۱۲-۲-۲) را به حساب نمی‌آوریم، و هامیلتونی H را به صورت زیر انتخاب می‌کنیم

$$H = H_0 + W_f + W_Z \quad (1)$$

که در آن H_0 هامیلتونی الکتروستاتیکی است که در فصل ۷ (بخش ۳-۷) بررسی کردیم، و W_f مجموع جملات ساختار ریز (فصل ۱۲، بخش ۱۲-۲-۱)

$$W_f = W_{mv} + W_D + W_{SO} \quad (2)$$

و W_Z ، هامیلتونی زیمان (فصل ۱۲، بخش ۱۲-۵-۱) توصیف‌کننده برهم‌کنش اتم با میدان مغناطیسی B_0 موازی با Oz است

$$W_Z = \omega_0 (L_z + 2S_z) \quad (3)$$

که در آن، بسامد زاویه‌ای لارمور ω_0 با رابطه زیر داده می‌شود

$$\omega_0 = -\frac{q}{2m_e} B_0 \quad (۴)$$

از ω_n نسبت به ω_0 صرف‌نظر خواهیم کرد؛ فرمول (۱۲-۷۳) از فصل ۱۲ را ببینید. ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای H را با استفاده از روشی مشابه با روش بخش ۱۲-۵ از فصل ۱۲ تعیین خواهیم کرد: W_Z و W_F را مانند اختلال‌های H تلقی می‌کنیم. ترازهای $2s$ و $2p$ را هر چند دارای انرژی مختل‌نشده یکسانی هستند، می‌توانیم جداگانه بررسی کنیم زیرا نه به W_F وابسته‌اند (فصل ۱۲، بخش ۱۲-۳-۲-الف-۱) و نه به W_Z . در این مکمل، میدان مغناطیسی B_0 را، بسته به اینکه W_Z در مقایسه با W_F کوچک باشد یا بزرگ، میدان ضعیف یا قوی می‌نامیم. توجه کنید که میدانهای مغناطیسی‌ای که در اینجا "ضعیف" تلقی می‌کنیم میدانهایی هستند که برای آنها W_Z نسبت به W_F کوچک ولی نسبت به W_{hf} ، که از آن چشم پوشیدیم، بزرگ است. از این رو، این "میدانهای ضعیف" خیلی قوی‌تر از میدانهایی هستند که در بخش ۱۲-۵ از فصل ۱۲ بررسی کردیم. وقتی به این ترتیب ویژه‌حالتها و ویژه‌مقدارهای H را به‌دست آوردیم، می‌توانیم تحول مقادیر متوسط سه مؤلفه گشتاور دوقطبی الکتریکی اتم را مطالعه کنیم. چون محاسبه مشابهی را مفصلاً در مکمل ۴ از فصل ۷ انجام دادیم، آن را تکرار نمی‌کنیم. ضمناً فقط برای میدانهای ضعیف و میدانهای قوی، بسامدها و حالت‌های قطبش مؤلفه‌های مختلف زیمان خط تشدید هیدروژن (خط α لایمن) را مشخص خواهیم کرد.

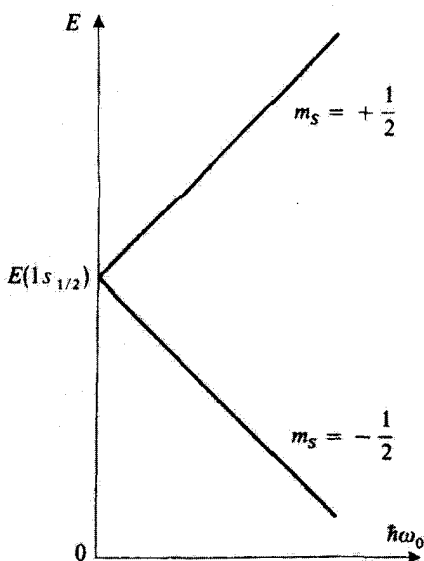
۲. نمودارهای زیمان ترازهای $1s$ و $2s$

در بخش ۱۲-۴-۱-ب از فصل ۱۲ دیدیم که W_F تراز $1s$ را به‌صورت یک کل انتقال می‌دهد و فقط به یک تراز ساختار ریز $1s_{1/2}$ منجر می‌شود. همین مطلب در مورد تراز $2s$ ، که به $2s_{1/2}$ تبدیل می‌شود، نیز صادق است. در هر یک از این دو تراز، می‌توانیم یک پایه

$$\left\{ \left| n; l = 0; m_L = 0; m_S = \pm \frac{1}{2}; m_I = \pm \frac{1}{2} \right\rangle \right\} \quad (۵)$$

از ویژه‌بردارهای مشترک H ، L^2 ، L_z ، S_z ، I_z را انتخاب کنیم (نمادگذاری اینجا با نمادگذاری فصل ۱۲ یکسان است؛ چون H بر اسپین پروتون اثر نمی‌کند، از این به بعد در دنباله مطلب از m_I چشم خواهیم پوشید).

بردارهای رابطه (۵) به‌وضوح ویژه‌بردارهای W_Z با ویژه‌مقدارهای $2m_S \hbar \omega_0$ هستند. بنابراین،



شکل ۱ نمودار زیمان تراز $1s_{1/2}$ وقتی که از جفت‌شدگی فوق ریز W_{hf} چشم‌پوشیم. عرض نقطه‌ای که در آن دو تراز $m_s = \pm 1/2$ یکدیگر را قطع می‌کنند، انرژی تراز $1s_{1/2}$ است (یعنی، ویژه‌مقدار $E_I - E_T$ متعلق به H_0). برای انتقال کلی حاصل از هامیلتونی ساختار ریز W_f تصحیح شده است. شکل ۱۲-۹ از فصل ۱۲ برداشتی از تغییرات این نمودار را بر اثر W_{hf} ، به دست می‌دهد.

هر تراز $1s_{1/2}$ یا $2s_{1/2}$ ، در یک میدان B_0 ، به دو زیرتراز زیمان با انرژیهای

$$E(n; l = 0; m_L = 0; m_S) = E(ns_{1/2}) + 2m_S \hbar\omega_0 \quad (6)$$

تجزیه می‌شود، که در آن، عبارت $E(ns_{1/2})$ عبارت است از انرژی میدان صفر تراز $ms_{1/2}$ که آن را در بخشهای ۱۲-۳-۲-ب و ۱۲-۴-۱-ب از فصل ۱۲ محاسبه کردیم. بنابراین، نمودار زیمان تراز $1s_{1/2}$ (و همچنین نمودار زیمان تراز $2s_{1/2}$) از دو خط مستقیم با شیبهای $+1$ و -1 تشکیل شده است (شکل ۱) که، به ترتیب، با دو سمتگیری ممکن اسپین نسبت به $m_S = -1/2$ و $m_S = +1/2$ متناظرند.

مقایسه شکل ۱۲-۱ و شکل ۱۲-۹ از فصل ۱۲ نشان می‌دهد که برای چشم‌پوشی از آثار مربوط به اسپین هسته‌ای، همین کاری که ما در اینجا انجام می‌دهیم، باید میدانهای B_0 آنقدر بزرگ باشند که $W_Z \gg W_{hf}$. در این صورت، در ناحیه مجانبی نمودار شکل ۱۲-۹ از فصل ۱۲ خواهیم بود، جایی که می‌توانیم از شکافتگی ترازهای انرژی ناشی از اسپین پروتون جفت‌شدگی فوق ریز چشم‌پوشیم.

۳. نمودار زیمان تراز $2p$

در فضای شش بعدی $2p$ ، می‌توانیم یکی از دو پایه

$$\{|n = 2; l = 1; m_L; m_S\rangle\} \quad (۷)$$

یا

$$\{|n = 2; l = 1; J, m_J\rangle\} \quad (۸)$$

را که به ترتیب، با تک تک از تکانه‌های زاویه‌ای L و S و با تکانه زاویه‌ای کل $J = L + S$ وفق داده شده‌اند، انتخاب کنیم [روابط (۳۶-الف) و (۳۶-ب)] از مکمل ۱ فصل ۱۰ را ببینید.

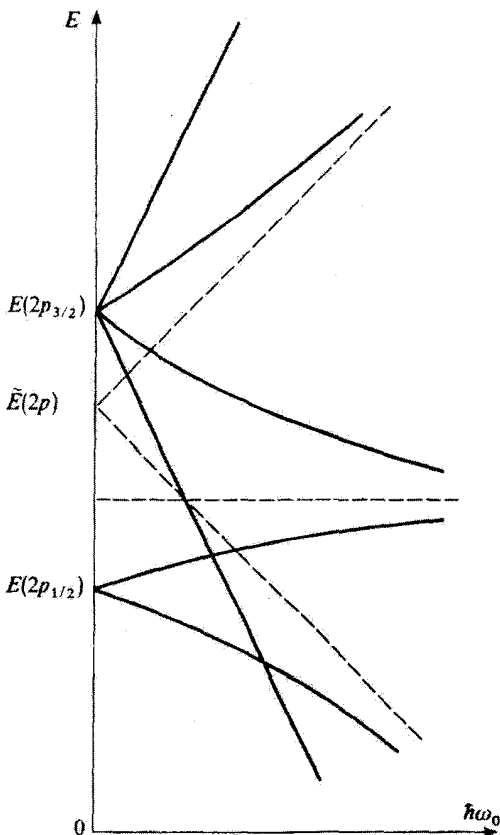
جملات W_D و W_{mv} که در عبارت (۲) مربوط به W_f ظاهر می‌شوند، تراز $2p$ را به صورت یک کل انتقال می‌دهند. بنابراین، برای مطالعه نمودار زیمان تراز $2p$ ، کافی است ماتریس 6×6 را که معرف $W_{SO} + W_Z$ در یکی از دو پایه (۷) یا (۸) است، قطری کنیم. در واقع، چون W_Z و $W_{SO} = \xi_{rp} L \cdot S$ هر دو با $J_z = L_z + S_z$ جابه‌جا می‌شوند، این ماتریس 6×6 را می‌توان به چند زیر ماتریس که تعداد آنها برابر است با تعداد مقادیر متمایز m_J ، تقسیم کرد. از این رو، دو زیر ماتریس یک بعدی (که به ترتیب با $m_J = +3/2$ و $m_J = -3/2$ متناظرند) و دو زیر ماتریس دو بعدی (که به ترتیب با $m_J = +1/2$ و $m_J = -1/2$ متناظرند) پدید می‌آید. محاسبه ویژه مقادیرها و ویژه بردارهای وابسته به آنها (که بسیار شبیه به محاسبه بخش ۱۲-۵-۴ از فصل ۱۲ است) هیچ مشکلی تولید نمی‌کند و به نمودار زیمانی منجر می‌شود که در شکل ۲ دیدیم. این نمودار، از دو خط مستقیم و چهار شاخه هذلولی تشکیل شده است.

انرژیها، در یک میدان صفر، فقط به J بستگی دارند. دو تراز ساختار ریز، $2p_{3/2}$ و $2p_{1/2}$ را که قبلاً در بخش ۱۲-۳ از فصل ۱۲ بررسی کردیم، و انرژیهای آنها برابر مقادیر زیر است را به دست می‌آوریم

$$E(2p_{3/2}) = \bar{E}(2p) + \frac{1}{4} \xi_{rp} \hbar^2 \quad (۹)$$

$$E(2p_{1/2}) = \bar{E}(2p) - \xi_{rp} \hbar^2 \quad (۱۰)$$

$\bar{E}(2p)$ عبارت است از انرژی $E(2p)$ تراز $2p$ که برای انتقال کلی ناشی از W_D و W_{mv} تصحیح شده است [روابط (۱۲-۳۲) و (۱۲-۳۳) از فصل ۱۲]. ξ_{rp} ثابتی است که در قید $\xi_{rp} L \cdot S$ مربوط به W_{SO} به تراز $2p$ ، ظاهر می‌شود [رابطه (۱۲-۳۷) از فصل ۱۲].



شکل ۲ نمودار زیمان تراز $2p$ وقتی از جفت‌شدگی فوق ریز W_{hf} صرف‌نظر شود. در میدان صفر، ترازهای ساختار ریز $2p_{3/2}$ و $2p_{1/2}$ مشاهده می‌شود. نمودار زیمان از دو خط مستقیم و دو هذلولی (با مجانبهای به صورت خط چین) تشکیل شده است. جفت‌شدگی فوق ریز W_{hf} فقط در مجاورت $\omega_0 = 0$ این نمودار را به طور عمده تغییر می‌دهد. عبارت است از انرژی تراز $2p$ (ویژه مقدار $-E_I/4$ متعلق به H_0) که برای انتقال کلی ایجاد شده توسط $W_{mv} + W_D$ تصحیح شده است.

در میدانهای ضعیف ($W_Z \ll W_{SO}$)، شیب ترازهای انرژی را می‌توانیم با در نظر گرفتن W_Z به عنوان یک اختلال W_f نیز به دست آوریم. در این حال باید ماتریسهای 4×4 و 2×2 معرف در ترازهای $2p_{3/2}$ و $2p_{1/2}$ را قطری کنیم. محاسباتی مشابه محاسبات بخش ۱۲-۵ از فصل ۱۲ نشان می‌دهند که این دو زیر ماتریس به ترتیب متناسب‌اند با زیر ماتریسهای معرف $J_z \omega_0$ در همان زیرفضاها. ضرایب تناسب، که "ضرایب لاتده" نامیده می‌شوند (مکمل ۴ از فصل ۱، بخش ۳) به ترتیب برابرند با^۱

۱. این ضرایب لاتده می‌توانند مستقیماً از فرمول (۴۳) مکمل ۴ از فصل ۱۰ محاسبه شوند.

$$g(2p_{3/2}) = \frac{4}{3} \quad (11)$$

$$g(2p_{1/2}) = \frac{2}{3} \quad (12)$$

بنابراین، در میدانهای ضعیف، هر تراز ساختار ریز به $2J + 1$ زیرتراز زیمان متساوی الفاصله شکافته می شود. ویژه حالتها عبارتند از حالتهای پایه "جفت شده"، (۸)، که به ویژه مقدارهای زیر متناظرند

$$E(J, m_J) = E(2p_J) + m_J g(2p_J) \hbar \omega_0 \quad (13)$$

که در آنها $E(2p_J)$ با رابطه های (۹) و (۱۰) داده می شوند. از طرف دیگر، در میدانهای قوی ($W_z \gg W_{SO}$)، می توانیم $W_{SO} = \xi_{2p} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ را مانند یک اختلال W_z ، که در پایه (۷) قطری است در نظر بگیریم. مانند بخش ۱۲-۵-۳-ب از فصل ۱۲، فقط عناصر قطری $\xi_{2p} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ دخالت می کنند. بنابراین، درمی یابیم که در میدانهای قوی، ویژه حالتها عبارتند از حالتهای پایه "واجفتیده"، (۷)، و ویژه مقدارهای متناظر عبارتند از

$$E(m_L, m_S) = \tilde{E}(2p) + (m_L + 2m_S) \hbar \omega_0 + m_L m_S \hbar^2 \xi_{2p} \quad (14)$$

فرمول (۱۴) مجانبهای نمودار شکل ۲ را می دهد.

وقتی میدان B افزایش می یابد، به طور پیوسته از پایه (۸) به پایه (۷) عبور می کنیم. میدان مغناطیسی به تدریج تکانه زاویه ای مداری و اسپین را از هم جدا می کند. این وضعیت، مشابه وضعیتی است که در بخش ۱۲-۵ از فصل ۱۲ بررسی کردیم، که در آن تکانه های زاویه ای \mathbf{S} و \mathbf{L} ، بسته به اهمیت نسبی جملات فوق ریز و زیمان، جفت شده یا واجفتیده بودند.

۴. اثر زیمان خط تشدید

الف) بیان مسئله

استدلالهایی از نوع استدلالهای بخش ۲-ج از مکمل ۴ فصل ۷ (مخصوصاً، یادداشت آخر آن مکمل) نشان می دهند که گذار نوری بین یک زیرتراز زیمان $2p$ و یک زیرتراز زیمان $1s$ تنها زمانی ممکن است که عنصر ماتریسی عملگر دوقطبی الکتریکی $q\mathbf{R}$ بین این دو حالت مخالف صفر

باشد.^۱ به علاوه، بسته به اینکه کدام یک از عملگرهای $q(X + iY)$ ، $q(X - iY)$ یا qZ دارای یک عنصر ماتریسی غیر صفر بین دو زیرتراز زیمان مورد نظر باشند، حالت قطبش نور گسیل شده عبارت خواهد بود از σ^+ ، σ^- یا π . از این رو، برای به دست آوردن بسامدهای مؤلفه‌های مختلف زیمان خط تشدید هیدروژن و حالت قطبش آنها از ویژه بردارها و ویژه مقادیرهای H ، که قبلاً تعیین شده‌اند، استفاده می‌کنیم.

یادداشت:

عملگرهای $q(X + iY)$ ، $q(X - iY)$ و qZ فقط روی قسمت مداری تابع موج عمل می‌کنند و باعث می‌شوند که m_L ، به ترتیب، به اندازه $+1$ ، -1 و 0 تغییر کند (مکمل ۴ از فصل ۷، بخش ۲-ج)؛ m_S تحت تأثیر قرار نمی‌گیرد. چون $m_J = m_L + m_S$ یک عدد کوانتومی خوب است (برای هر مقداری از میدان B). گذارهای $\Delta m_J = +1$ دارای قطبش σ^+ ؛ گذارهای $\Delta m_J = -1$ دارای قطبش σ^- ؛ و گذارهای $\Delta m_J = 0$ دارای قطبش π هستند.

ب) مؤلفه‌های زیمان در میدان ضعیف

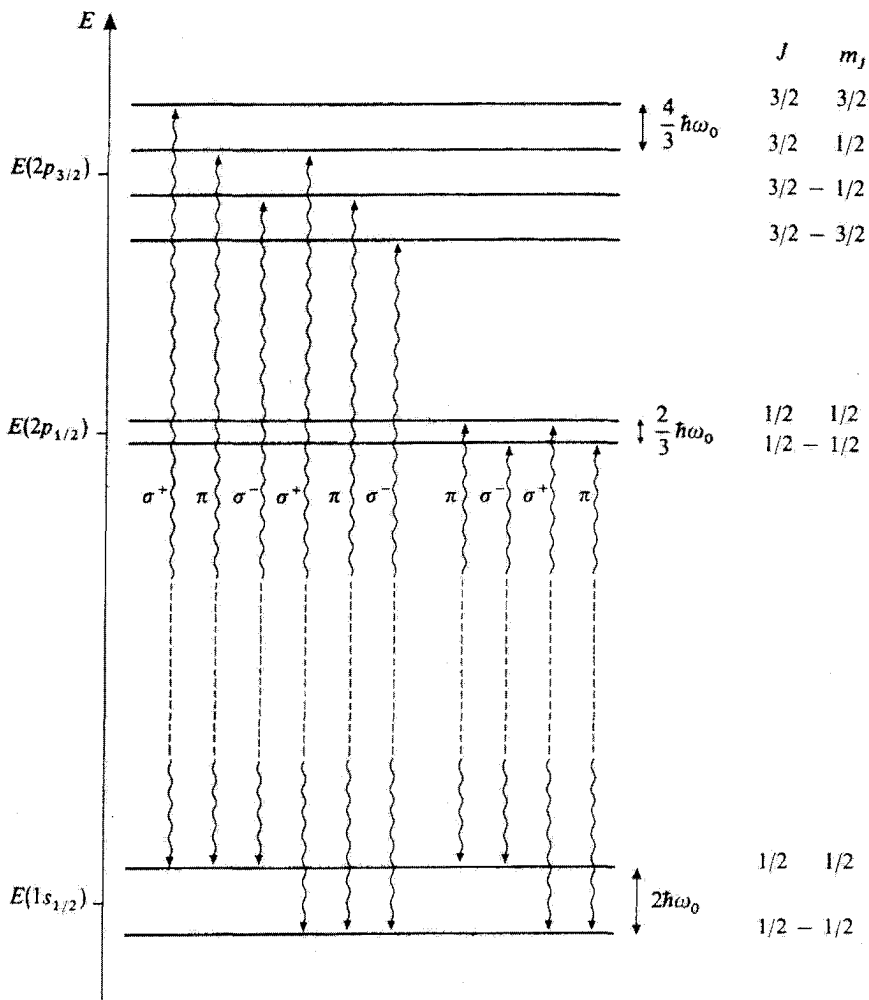
شکل ۳ مواضع مختلف زیرترازهای زیمان حاصل از ترازهای $1s_{1/2}$ ، $2p_{1/2}$ و $2p_{3/2}$ را که از روابط (۶)، (۱۳)، (۱۱) و (۱۲) به دست می‌آیند، در میدان ضعیف نشان می‌دهد. پیکانهای عمودی، مؤلفه‌های مختلف زیمان خط تشدید را نشان می‌دهند. بسته به اینکه $\Delta m_J = +1$ یا $\Delta m_J = -1$ باشد، قطبش عبارت است از σ^+ ، σ^- یا π .

شکل ۴، مکانهای این مؤلفه‌های مختلف را روی یک مقیاس بسامد، نسبت به مکانهای خطوط در میدان صفر، نشان می‌دهد. این نتیجه با نتیجه مکمل ۴ از فصل ۷ (شکل ۲ از آن مکمل را ببینید)، که در آن، با نگاه کردن در جهت عمود بر B ، سه مؤلفه متساوی الفاصله قطبش σ^+ ، π ، σ^- داشتیم، که با اختلاف بسامد $\omega_0/2\pi$ از هم جدا می‌شوند، اختلاف فاحش دارد.

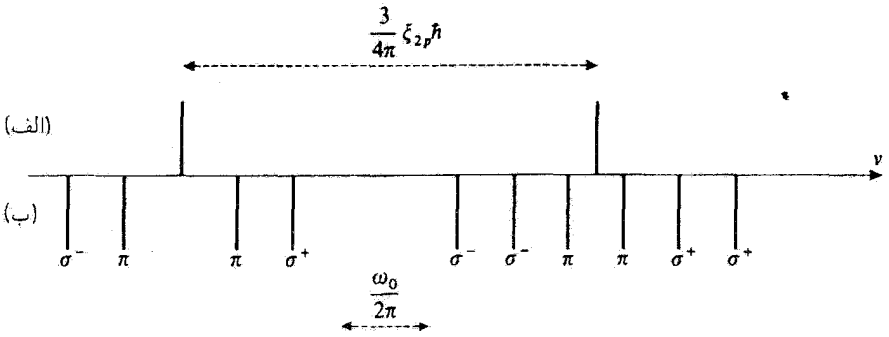
ج) مؤلفه‌های زیمان در میدان قوی. اثر پاشن-بک

شکل ۵ مکانهای زیرترازهای زیمان حاصل از ترازهای $1s$ و $2p$ را در یک میدان قوی، نشان می‌دهد [روابط (۶) و (۱۲) را ببینید]. واگنی بین حالت‌های $|m_L = -1, m_S = 1/2\rangle$ و $|m_L = 1, m_S = -1/2\rangle$ تا مرتبه اول در W_{SO} ، از بین نمی‌رود. پیکانهای عمودی، مؤلفه‌های

۱. دو قطبی الکتریکی، چون یک عملگر فرد است، بین حالت‌های $1s$ و $2s$ ، که هر دو زوج‌اند، دارای هیچ عنصر ماتریسی نیست. به همین دلیل در اینجا از حالت‌های $2s$ صرف‌نظر می‌کنیم.



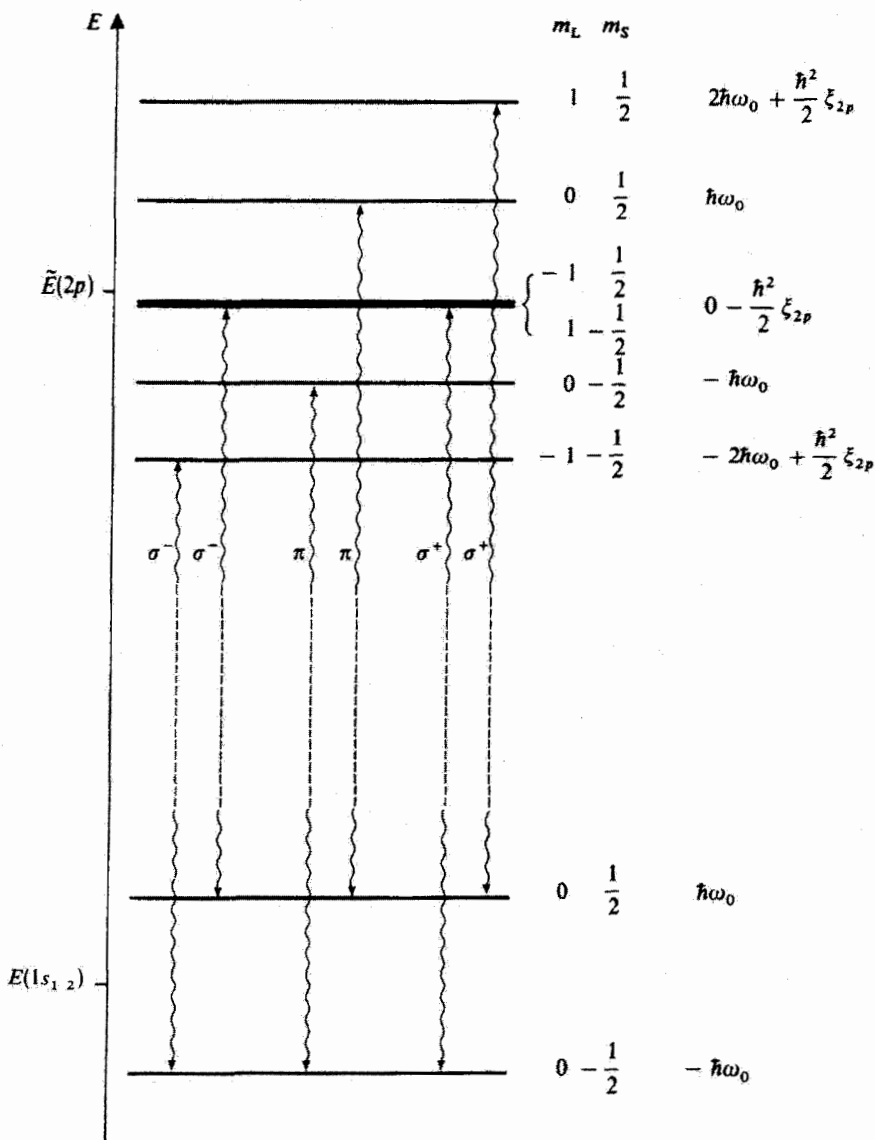
شکل ۳ جابه‌جایی زیرترازهای زیمن حاصل از ترازهای ساختار ریز $2p_{3/2}$ ، $2p_{1/2}$ ، $1s_{1/2}$ (که انرژیهای آنها در میدان صفر بر روی مقیاس قائم انرژی تشخیص شده است)، در یک میدان ضعیف، در سمت راست شکل، شکافتهای بین زیرترازهای زیمن مجاور (برای وضوح بیشتر، این شکافتهای را نسبت به شکافتهای ساختار ریز که ترازهای $2p_{3/2}$ و $2p_{1/2}$ را از هم جدا می‌کند بزرگتر نشان داده‌ایم) و همچنین مقادیر اعداد کوانتومی J و m_j وابسته به هر زیرتراز نشان داده شده است. پیکانها، مؤلفه‌های زیمن خط تشدید را نشان می‌دهند، که هر کدام از آنها یک قطبش کاملاً مشخص بین σ^+ ، σ^- یا π دارد.



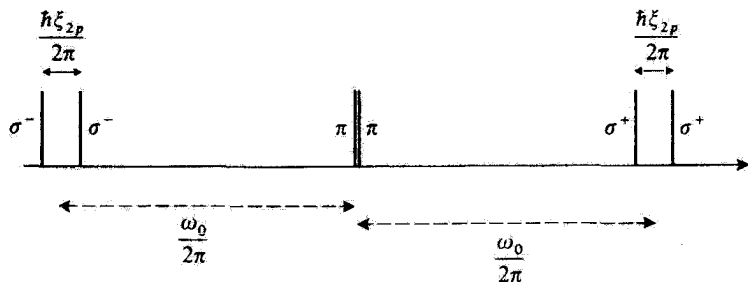
شکل ۴ بسامدهای مؤلفه‌های مختلف زیمان خط تشدید هیدروژن. الف) در میدان صفر: دو خط مشاهده می‌شوند، که به اندازه شکافتگی ساختار ریز $3\xi_{2p}\hbar/4\pi$ از هم جدا شده‌اند (ξ_{2p} ثابت جفت‌شدگی اسپین-مدار تراز $2p$ است) و به ترتیب یا گذارهای $2p_{3/2} - 1s_{1/2}$ (خط سمت راست شکل) و $2p_{1/2} - 1s_{1/2}$ (خط سمت چپ شکل) متناظرند. ب) در میدان ضعیف B_0 : هر خط به یک رشته مؤلفه‌های زیمان تجزیه می‌شود که قطبش آنها را نشان داده‌ایم؛ ω_0/π بسامد لارمور در میدان B_0 است.

زیمان خط تشدید را نشان می‌دهند. بسته به اینکه $\Delta m_L = +1$ ، $\Delta m_L = 0$ یا $\Delta m_L = -1$ باشد، قطبش عبارت است از σ^+ ، σ^- یا π (یادآور می‌شویم که در گذار دوقطبی الکتریکی، عدد کوانتومی m_s تحت تأثیر قرار نمی‌گیرد).

طیف نوری متناظر در شکل ۶ نشان داده شده است. دو گذار π دارای یک بسامد هستند (شکل ۵ را ملاحظه کنید). از طرف دیگر، بین بسامدهای دو گذار σ^+ و بین بسامدهای دو گذار σ^- شکافتگی اندک $\hbar\xi_{2p}/2\pi$ وجود دارد. فاصله متوسط بین دوتایی σ^+ و خط π (یا بین خط π و دوتایی σ^-) برابر با $\omega_0/2\pi$ است. از این رو، طیف شکل ۶ مشابه طیف شکل ۲ از مکمل ۴ از فصل ۷ است. وانگهی، شکافتگی خطوط σ^+ و σ^- ناشی از وجود اسپین الکترون، به راحتی قابل فهم است. در میدانهای قوی، \mathbf{L} و \mathbf{S} تجزیه می‌شوند. چون گذار $2p \leftrightarrow 1s$ یک گذار دوقطبی الکتریکی است، فقط تکانه زاویه‌ای مداری \mathbf{L} الکترون تحت تأثیر گذار نوری قرار می‌گیرد. استدلالی مشابه استدلال بخش ۱۲-۵-۳-ب از فصل ۱۲ نشان می‌دهد که برهم‌کنشهای مغناطیسی مربوط به اسپین را می‌توان توسط یک "میدان داخلی" توصیف کرد که به میدان خارجی B_0 افزوده می‌شود و علامت آن، بسته به بالا و پایین بودن اسپین تغییر می‌کند، همین میدان داخلی شکافتگی خطوط σ^+ و σ^- را باعث می‌شود (خط π تحت تأثیر قرار نمی‌گیرد، زیرا عدد کوانتومی m_L آن صفر است).



شکل ۵ جابه‌جایی زیرترازهای زیمان حاصل از ترازهای ۱s و ۲p، در یک میدان قوی (ساختار ریز تجزیه‌شده). در سمت راست شکل، مقادیر اعداد کوانتومی m_S و m_L وابسته به هر زیرتراز زیمان، و همچنین انرژی متناظر با آن را که نسبت به $E(1s_{1/2})$ یا $\bar{E}(2p)$ داده شده است، نشان داده‌ایم. پیکانهای عمودی مؤلفه‌های زیمان خط تشدید را نشان می‌دهند.



شکل ۶ مکانهای مؤلفه‌های زیمان خط تشدید هیدروژن در میدان قوی. به غیر از شکافتگی خطوط σ^- و σ^+ این طیف با طیفی که در مکمل ۴ از فصل ۷ به دست آوردیم، و در آن از آثار مربوط به اسپین الکترون صرف‌نظر کردیم، یکسان است.

مراجع برای مطالعه بیشتر

Cagnac and Peby-Peyroula (11.2), chaps. XI and XVII (especially §5-A of that chapter); White (11.5), chap. X; Kuhn (11.1), chap. III, §F; Sobel'man (11.12), chap. 8, §29.

مکمل ۵

اثر اشتراک برای اتم هیدروژن

۱. اثر اشتراک بر تراز $n = ۱$

الف) انتقال تراز $۱s$ برحسب \mathcal{E} مربعی است

ب) قطبش پذیری حالت $۱s$

۲. اثر اشتراک بر تراز $n = ۲$

یک اتم هیدروژن را در میدان الکتریکی ایستای یکنواخت \mathcal{E} که موازی Oz است در نظر بگیرید. به هامیلتونی که در فصل ۱۲ بررسی کردیم باید هامیلتونی اشتراک W_S را، که انرژی برهم کنش گشتاور دوقطبی qR اتم را با میدان \mathcal{E} توصیف می کند، بیفزاییم. W_S را می توان به صورت زیر نوشت

$$W_S = -q\mathcal{E} \cdot \mathbf{R} = -q\mathcal{E}Z \quad (۱)$$

حتی برای قویترین میدانهای الکتریکی که می توان در آزمایشگاه تولید کرد، همواره داریم $W_S \ll H_0$. از طرف دیگر، اگر \mathcal{E} به قدر کافی قوی باشد، W_S می تواند دارای همان مرتبه بزرگی W_f و W_{hf} و یا حتی بزرگتر باشد. برای ساده کردن بحث، در این مکمل فرض خواهیم کرد که \mathcal{E} به حد کافی قوی است تا اثر W_S از اثر W_f یا W_{hf} خیلی بزرگتر باشد. از این رو، با استفاده از نظریه اختلال، مستقیماً اثر W_S را بر ویژه حالت های H_0 که در فصل ۷ به دست آوردیم، محاسبه خواهیم کرد (مرحله بعد، که آن را در اینجا بررسی نخواهیم کرد، عبارت است از برآورد اثر W_f و سپس اثر W_{hf} ، بر ویژه حالت های $H_0 + W_S$). چون H_0 و W_S هیچ کدام بر متغیرهای اسپین عمل نمی کنند، از اعداد کوانتومی m_I و m_S صرف نظر خواهیم کرد.

۱. اثر اشتراک بر تراز $n = ۱$

الف) انتقال تراز $۱s$ برحسب \mathcal{E} مربعی است

بنابر نظریه اختلال، اثر میدان الکتریکی را می توان تا مرتبه اول با محاسبه عنصر ماتریسی زیر به دست آورد

$$-q\mathcal{E} \langle n=1, l=0, m_L=0 | Z | n=1, l=0, m_L=0 \rangle$$

چون عملگر Z فرد است، و چون حالت پایه دارای پاریته کاملاً معین است (زوج)، عنصر ماتریسی قبلی صفر است.

بنابراین، هیچ اثری که نسبت به \mathcal{E} خطی باشد وجود ندارد، و باید تا جمله بعدی سری اختلال ادامه بدهیم

$$\varepsilon_2 = q^2 \mathcal{E}^2 \sum_{\substack{n \neq 1 \\ l, m}} \frac{|\langle 1, 0, 0 | Z | n, l, m \rangle|^2}{E_1 - E_n} \quad (2)$$

که در آن $E_n = -E_1/n^2$ عبارت است از ویژه مقدار H_0 وابسته به ویژه حالت $|n, l, m\rangle$ (فصل ۷، بخش ۷-۳). حاصل جمع اخیر مسلماً صفر نیست، زیرا حالت‌هایی مانند $|n, l, m\rangle$ وجود دارند که پاریته آنها مخالف پاریته $|1, 0, 0\rangle$ است. پس، نتیجه می‌گیریم که انتقال اشتراک حالت پایه $1s$ ، تا پایینترین مرتبه در \mathcal{E} ، مربعی است. چون $(E_1 - E_n)$ همواره منفی است، حالت پایه پایینتر آورده می‌شود.

ب) قطبش‌پذیری حالت $1s$

قبلاً گفتیم که به دلایل پاریته، مقادیر متوسط مؤلفه‌های عملگر qR در حالت $|1, 0, 0\rangle$ (حالت پایه) مختل نشده) صفرند.

در حضور میدان الکتریکی \mathcal{E} موازی Oz ، حالت پایه دیگر $|1, 0, 0\rangle$ نیست، بلکه در عوض (بر طبق نتایج بخش ۱۱-۲-۱ ب از فصل ۱۱) حالت پایه عبارت است از

$$|\psi_0\rangle = |1, 0, 0\rangle - q\mathcal{E} \sum_{\substack{n \neq 1 \\ l, m}} |n, l, m\rangle \frac{\langle n, l, m | Z | 1, 0, 0 \rangle}{E_1 - E_n} + \dots \quad (3)$$

این نشان می‌دهد که مقدار متوسط گشتاور دوقطبی الکتریکی qR در حالت پایه مختل شده تا مرتبه اول در \mathcal{E} ، برابر است با $\langle \psi_0 | qR | \psi_0 \rangle$. به این ترتیب، با استفاده از رابطه (۳) برای $|\psi_0\rangle$ ، به دست می‌آوریم

$$\langle \psi_0 | qR | \psi_0 \rangle = -q^2 \mathcal{E}^2 \sum_{\substack{n \neq 1 \\ l, m}}$$

$$\frac{\langle 1, 0, 0 | R | n, l, m \rangle \langle n, l, m | Z | 1, 0, 0 \rangle + \langle 1, 0, 0 | Z | n, l, m \rangle \langle n, l, m | R | 1, 0, 0 \rangle}{E_1 - E_n}$$

از این رو، می‌بینیم که میدان الکتریکی \mathcal{E} باعث می‌شود که یک گشتاور دوقطبی "القایی"، متناسب با \mathcal{E} ، پدید آید. با استفاده از رابطهٔ تعامد هماهنگ کروی^۱، به سادگی می‌توان نشان داد که $\langle \psi_0 | qY | \psi_0 \rangle$ و $\langle \psi_0 | qX | \psi_0 \rangle$ صفر هستند، و تنها مقدار متوسط غیر صفر عبارت است از

$$\langle \psi_0 | qZ | \psi_0 \rangle = -2q^2 \mathcal{E} \sum_{\substack{n \neq 1 \\ l, m}} \frac{|\langle n, l, m | Z | 1, 0, 0 \rangle|^2}{E_1 - E_n} \quad (5)$$

به عبارت دیگر گشتاور دوقطبی القایی، با میدان اعمال شدهٔ \mathcal{E} موازی است. به خاطر تقارن کروی حالت $1s$ ، این مطلب شگفت‌آور نیست. ضریب تناسب χ بین گشتاور دوقطبی القایی و میدان، پذیرفتاری الکتریکی خطی نامیده می‌شود. می‌بینیم که مکانیک کوانتومی، محاسبهٔ این پذیرفتاری را برای حالت $1s$ ممکن می‌سازد

$$\chi_{1s} = -2q^2 \sum_{\substack{n \neq 1 \\ l, m}} \frac{|\langle n, l, m | Z | 1, 0, 0 \rangle|^2}{E_1 - E_n} \quad (6)$$

۲. اثر اشتراک بر تراز $n = 2$

اثر W_S بر تراز $n = 2$ را می‌توان تا مرتبهٔ اول، با قطری کردن قید W_S به زیرفضای حاصل از چهار حالت پایهٔ $\{|2, 0, 0\rangle; |2, 1, m\rangle, m = -1, 0, +1\}$ به دست آورد.

حالت $|2, 0, 0\rangle$ زوج؛ سه حالت $|2, 1, m\rangle$ فرد هستند. چون W_S فرد است، عنصر ماتریسی $\langle 2, 0, 0 | W_S | 2, 1, m \rangle$ و نه عنصر ماتریسی $\langle 2, 1, m' | W_S | 2, 1, m \rangle$ صفرند (مکمل F، فصل ۲، جلد اول، کتاب فارسی را ببینید). از طرف دیگر، چون پاریتهٔ حالت‌های $|2, 0, 0\rangle$ و $|2, 1, m\rangle$ مخالف هم است، $\langle 2, 1, m | W_S | 2, 0, 0 \rangle$ می‌تواند مخالف صفر باشد.

اکنون نشان می‌دهیم که در واقع فقط $\langle 2, 1, 0 | W_S | 2, 0, 0 \rangle$ غیر صفر است. W_S با $Z = R \cos \theta$ و از این رو با $Y_1^0(\theta)$ متناسب خواهد بود. از این رو، انتگرال زاویه‌ای که در عناصر ماتریسی $\langle 2, 1, m | W_S | 2, 0, 0 \rangle$ وارد می‌شود به صورت زیر است

$$\int Y_1^{m*}(\Omega) Y_1^0(\Omega) Y_0^0(\Omega) d\Omega$$

۱. این رابطه حاکی از آن است که $\langle 1, 0, 0 | Z | n, l, m \rangle$ تنها وقتی مخالف صفر است که $l = 1, m = 0$ (استدلال) همان استدلال ارائه شده برای $\langle 2, 1, m | Z | 2, 0, 0 \rangle$ است که در ابتدای بخش ۱۲-۲ آمده است. در نتیجه، در (۲)، (۳)، (۴)، (۵)، (۶)، جمع‌بندی در واقع فقط بر روی n انجام می‌شود (به علاوه، این، شامل حالت‌های پیوستار انرژی مثبت نیز هست).

چون Y_0^0 یک مقدار ثابت است این انتگرال با حاصلضرب Y_1^0 و Y_1^m متناسب، و از این رو فقط به ازای $m = 0$ مخالف صفر است. وانگهی، چون Y_1^0 ، $R_{2,0}(r)$ و $R_{2,1}(r)$ حقیقی اند، عنصر ماتریسی متناظر با آن حقیقی است. قرار می دهیم

$$\langle 2, 1, 0 | W_S | 2, 0, 0 \rangle = \gamma \mathcal{E} \quad (7)$$

بدون اینکه به مقدار دقیق γ [که می توان آن را بدون هیچ مشکلی محاسبه کرد، زیرا توابع موج $\varphi_{2,0,0}(r)$ و $\varphi_{2,1,0}(r)$ معلوم اند] توجهی داشته باشیم. بنابراین، ماتریسی که معرف W_S در تراز $n = 2$ است به صورت زیر است (بردارهای پایه به صورت $\langle 2, 1, 1 \rangle$ ، $\langle 2, 1, -1 \rangle$ ، $\langle 2, 1, 0 \rangle$ ، $\langle 2, 0, 0 \rangle$ مرتب شده اند)

○	○	○	○
○	○	○	○
○	○	○	$\gamma \mathcal{E}$
○	○	$\gamma \mathcal{E}$	○

(8)

می توانیم مستقیماً تصحیحات \mathcal{E} را تا مرتبه اول، و تصحیحات ویژه حالتها را تا مرتبه صفر به دست آوریم

ویژه حالت	↔	تصحیحات
$\langle 2, 1, 1 \rangle$	↔	○
$\langle 2, 1, -1 \rangle$	↔	○
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\langle 2, 1, 0 \rangle + \langle 2, 0, 0 \rangle)$	↔	$\gamma \mathcal{E}$
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\langle 2, 1, 0 \rangle - \langle 2, 0, 0 \rangle)$	↔	$-\gamma \mathcal{E}$

(9)

بنابراین، می بینیم که واگنی تراز $n = 2$ به طور جزئی برطرف می شود و انتقالهای انرژی برحسب \mathcal{E} دیگر مربعی نیستند بلکه خطی اند. ظهور یک اثر اشتراک خطی، نمونه ای است از وجود دو تراز با پارامترهای مخالف و انرژی یکسان (در اینجا ترازهای $2s$ و $2p$). این وضعیت فقط در مورد هیدروژن وجود دارد (به خاطر واگنی n -امبارۀ ترازهای $n \neq 1$).

یادداشت:

حالت‌های تراز $n = 2$ پایدار نیستند. با وجود این، عمر حالت $2s$ به‌طور قابل ملاحظه‌ای طولانی‌تر از عمر حالت‌های $2p$ است، زیرا اتم با گسیل خودبه‌خودی یک فوتون α لیمان به‌راحتی از $2p$ به $1s$ می‌رود (با عمر در حدود 10^{-9} ثانیه)، در حالی‌که واپاشی از حالت $2s$ مستلزم گسیل دو فوتون است (با عمر در حدود یک ثانیه). به این دلیل، حالت‌های $2p$ ، ناپایدار و حالت $2s$ شبه پایدار نامیده می‌شوند.

چون هامیلتونی اشتارک W_S دارای یک عنصر ماتریسی غیر صفر بین $2s$ و $2p$ است، هر میدان الکتریکی (ایستا یا نوسانی) حالت شبه پایدار $2s$ را با حالت ناپایدار $2p$ مخلوط می‌کند، و عمر حالت $2s$ را خیلی کاهش می‌دهد. این پدیده را "خاموشی شبه پایدار" می‌نامیم (مکمل ۸ از فصل ۴، که در آن اثر یک جفت‌شدگی بین دو حالت با عمرهای مختلف را بررسی کردیم، را نیز ببینید).

مراجع برای مطالعه بیشتر

اثر اشتارک در اتمها

Kuhn (11.1), chap. III, §§A-6 and G. Ruark and Urey (11.9), chap. V, §§12 and 13; Sobel'man (11.12), chap. 8, §28.

جمع‌بندی بر روی حالت‌های میانی که در (۲) و (۶) ظاهر می‌شوند را می‌توان با روش دالگانو و لویز دقیقاً محاسبه کرد؛ مرجع‌های زیر را ببینید:

Borowitz (1.7), §14-5; Schiff (1.18), §33.

و مراجع اصلی: (۲-۳۴)، (۲-۳۵)، (۲-۳۶)

خاموشی شبه پایداری: مراجع زیر را ببینید:

Lamb and Retherford (3.11), App. II; Sobel'man (11.12), chap. 8, §28.5.

۱۳

روشهای تقریبی برای مسائل وابسته به زمان

فهرست مطالب فصل ۱۳

۱-۱۳ بیان مسئله

۱۳-۲-۱ معادله شرو دینگر در نمایش $\{|\varphi_n\rangle\}$ ۱۳-۲-۲ حل تقریبی معادله شرو دینگر

الف) دستگاه معادلات دیفرانسیل برای مؤلفه‌های بردار حالت

ب) تغییر توابع

۱۳-۲-۲ معادلات اختلال

۱۳-۲-۳ حل تا مرتبه اول نسبت به λ

الف) حالت سیستم در لحظه t

ب) احتمال گذار $\mathcal{P}_{if}(t)$

۱۳-۳-۱ یک مورد خاص و مهم:

اختلال سینوسی یا ثابت

۱۳-۳-۱ کاربرد فرمولهای عمومی

۱۳-۳-۲ اختلال سینوسی که دو حالت گسسته را بهم

جفت می‌کند: پدیده تشدید

الف) طبیعت تشدیدی احتمال گذار

ب) پهنای تشدید و رابطه عدم قطعیت

زمان-انرژی

ج) اعتبار روش اختلال

۱۳-۳-۳ جفت شدگی با حالت‌های طیف پیوسته

الف) انتگرال‌گیری بر روی یک پیوستاری از

حالت‌های نهایی: چگالی حالتها

ب) قاعده طلایی فرمی

۱-۱۳ بیان مسئله

یک سیستم فیزیکی با هامیلتونی H_0 را در نظر می‌گیریم. ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای H_0 را با E_n و $|\varphi_n\rangle$ نمایش می‌دهیم

$$H_0 |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle \quad (۱-۱۳)$$

برای سهولت، فرض می‌کنیم که H_0 گسسته و ناواکن باشد؛ فرمولهای به‌دست آمده را می‌توان به راحتی تعمیم داد. (به عنوان مثال ۱۳-۳-۳ را ببینید). فرض کنید H تابع صریح زمان نباشد، به طوری که ویژه‌حالت‌های آن، حالت‌های مانا باشند.

در لحظه t ، یک اختلال در سیستم اعمال می‌کنیم. در این صورت هامیلتونی آن تبدیل می‌شود به

$$H(t) = H_0 + W(t) \quad (۲-۱۳)$$

با

$$W(t) = \lambda \hat{W}(t) \quad (۳-۱۳)$$

که در آن λ یک پارامتر حقیقی بدون بعد خیلی کوچکتر از ۱، و $\hat{W}(t)$ یک مشاهده‌پذیر (که می‌تواند تابع صریح زمان باشد) با همان مرتبه بزرگی H_0 باشد که به ازای $t < 0$ برابر با صفر است.

فرض کنید سیستم در آغاز در حالت مانای $|\varphi_i\rangle$ ، که یک ویژه‌حالت H_0 با ویژه‌مقدار E_i است، قرار داشته باشد. از لحظه $t = 0$ به بعد که اختلال را اعمال می‌کنیم، سیستم متحول می‌شود: در واقع، دیگر $|\varphi_i\rangle$ ، عموماً، یک ویژه‌حالت هامیلتونی مختل شده نیست. حال می‌خواهیم، در این فصل احتمال $\mathcal{P}_{if}(t)$ یافتن سیستم را در ویژه‌حالت دیگر $|\varphi_f\rangle$ از H_0 در لحظه t محاسبه کنیم. به عبارت دیگر، می‌خواهیم گذارهایی را که می‌توانند توسط اختلال $W(t)$ در بین حالت‌های مانای سیستم مختل نشده القا شوند، مطالعه کنیم.

اساس محاسبه بسیار ساده است. بین لحظات 0 و t ، سیستم بر طبق معادله شروودینگر متحول می‌شود

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = [H_0 + \lambda \hat{W}(t)] |\psi(t)\rangle \quad (۴-۱۳)$$

جواب $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle$ این معادله دیفرانسیل مرتبه اول که متناظر با شرط اولیه

$$|\psi(t=0)\rangle = |\varphi_i\rangle \quad (5-13)$$

است، منحصر به فرد است. احتمال مورد نظر $\mathcal{P}_{if}(t)$ را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\mathcal{P}_{if}(t) = |\langle \varphi_f | \psi(t) \rangle|^2 \quad (6-13)$$

بنابراین، کل مسئله عبارت است از یافتن جواب $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle$ معادله (۴-۱۳) که با شرط اولیه (۵-۱۳) متناظر است. با وجود این، چنین مسئله‌ای عموماً به طور دقیق قابل حل نیست. به همین دلیل است که به روشهای تقریبی متوسل می‌شویم. در این فصل نشان می‌دهیم که چگونه، وقتی λ به قدر کافی کوچک باشد، می‌توان جواب $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle$ را به صورت یک رشته نمایی محدود برحسب λ پیدا کرد. بنابراین، $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle$ ، و همچنین احتمال مربوط به آن را صریحاً تا مرتبه اول نسبت به λ محاسبه خواهیم کرد (بخش ۱۳-۲). سپس فرمولهای کلی به دست آمده را برای مطالعه یک مورد خاص مهم، موردی که در آن اختلال یک تابع سینوسی از زمان یا یک ثابت است، به کار خواهیم برد (بخش ۱۳-۳)، (برهم‌کنش یک اتم با یک موج الکترومغناطیسی را که از این مقوله است در مکمل ۱ از فصل ۱۳ به تفصیل بررسی خواهیم کرد). این، مثالی از پدیده تشدید است. دو وضعیت در نظر خواهیم گرفت: یکی وضعیتی که در آن طیف H_0 گسسته است، و دیگری وضعیتی که در آن، حالت اولیه $|\varphi_i\rangle$ با یک پیوستار از حالت‌های نهایی، جفت شده است. در مورد اخیر، فرمول مهمی را اثبات خواهیم کرد که به "قاعده طلایی فرمی" معروف است.

یادداشت:

وضعیتی را که در ۴-۳-۳ از فصل ۴ بررسی کردیم، می‌توان به عنوان یک مورد خاص از مسئله کلی که در این فصل مورد بحث قرار می‌گیرد، تلقی کرد. یادآوری می‌کنیم که در فصل ۴ یک سیستم دو تراز را مورد بحث قرار دادیم (حالت‌های $|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$)، که ابتدا در حالت $|\varphi_1\rangle$ بود و از لحظه $t=0$ به بعد تحت تأثیر یک اختلال ثابت W واقع شد. به این ترتیب، می‌توان احتمال $\mathcal{P}_{12}(t)$ را به طور دقیق محاسبه کرد و فرمول زابی را به دست آورد.

مسئله‌ای که در اینجا مطرح می‌کنیم بسیار کلیتر است: یک سیستم با تعداد دلخواهی تراز (حتی گاهی، نظیر ۱۳-۳-۳، با یک طیف پیوسته از حالتها) و اختلال $W(t)$ که تابع دلخواهی از زمان است، را در نظر می‌گیریم. این نشان می‌دهد که چرا در حالت کلی، می‌توانیم فقط یک جواب تقریبی به دست آوریم.

۱۳-۲ حل تقریبی معادله شرودینگر

۱۳-۲-۱ معادله شرودینگر در نمایش $\{|\varphi_n\rangle\}$

احتمال $\mathcal{P}_{if}(t)$ به طور صریح شامل ویژه‌حالت‌های $|\varphi_i\rangle$ و $|\varphi_f\rangle$ متعلق به H_0 است. از این رو کاملاً منطقی است که نمایش $\{|\varphi_n\rangle\}$ را انتخاب کنیم.

الف) دستگاه معادلات دیفرانسیل برای مؤلفه‌های بردار حالت

فرض کنید $c_n(t)$ مؤلفه‌های کت $|\psi(t)\rangle$ در پایه $\{|\varphi_n\rangle\}$ باشند

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\varphi_n\rangle \quad (۷-۱۳)$$

که در آن

$$c_n(t) = \langle \varphi_n | \psi(t) \rangle \quad (۸-۱۳)$$

$\hat{W}_{nk}(t)$ معرف عناصر ماتریسی مشاهده‌پذیر $\hat{W}(t)$ در همان پایه است

$$\langle \varphi_n | \hat{W}(t) | \varphi_k \rangle = \hat{W}_{nk}(t) \quad (۹-۱۳)$$

یادآوری می‌کنیم که H_0 در پایه $\{|\varphi_n\rangle\}$ توسط یک ماتریس قطری نمایش داده می‌شود

$$\langle \varphi_n | H_0 | \varphi_k \rangle = E_n \delta_{nk} \quad (۱۰-۱۳)$$

حال دو طرف معادله شرودینگر (۴-۱۳) را روی $|\varphi_n\rangle$ تصویر می‌کنیم. برای این منظور، رابطه بستاری

$$\sum_k |\varphi_k\rangle \langle \varphi_k| = 1 \quad (۱۱-۱۳)$$

را وارد می‌کنیم و روابط (۸-۱۳)، (۹-۱۳) و (۱۰-۱۳) را به‌کار می‌بریم. خواهیم داشت

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) = E_n c_n(t) + \sum_k \lambda \hat{W}_{nk}(t) c_k(t) \quad (۱۲-۱۳)$$

مجموعه معادلات (۱۲-۱۳)، که برای مقادیر مختلف n نوشته می‌شود، یک دستگاه معادلات دیفرانسیل خطی جفت‌شده از مرتبه اول نسبت به t را تشکیل می‌دهد. که از دیدگاه نظری، جهت تعیین مؤلفه‌های $c_n(t)$ متعلق به $\langle \psi(t) |$ به‌کار می‌رود. جفت‌شدگی بین این معادلات منحصراً از وجود اختلال $\lambda \hat{W}(t)$ ، که با عناصر ماتریسی غیرقطری $\lambda \hat{W}_{nk}(t)$ خود، تحول $c_n(t)$ را به تحول تمام ضرایب دیگر $c_k(t)$ مربوط می‌سازد، ناشی می‌شود.

ب) تغییر توابع

وقتی $\lambda \hat{W}(t)$ صفر است معادلات (۱۲-۱۳) دیگر جفت‌شده نیستند، و حل آنها بسیار ساده و به‌صورت زیر است

$$c_n(t) = b_n e^{-iE_n t/\hbar} \quad (۱۳-۱۳)$$

که در آن b_n ثابتی است که به شرایط اولیه بستگی دارد.

حال اگر $\lambda \hat{W}(t)$ صفر نباشد، مادامی که به علت شرط $\lambda \ll 1$ ، خیلی کوچکتر از H_0 باقی بماند، انتظار می‌رود که جواب $c_n(t)$ معادلات (۱۲-۱۳) خیلی نزدیک به جواب (۱۳-۱۳) باشد. به عبارت دیگر، اگر تغییر توابع زیر را انجام دهیم

$$c_n(t) = b_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (۱۴-۱۳)$$

می‌توانیم پیش‌بینی کنیم که $b_n(t)$ توابعی از زمان هستند که به کندی تغییر می‌کنند. با قرار دادن (۱۴-۱۳) در معادله (۱۲-۱۳) خواهیم داشت

$$\begin{aligned} i\hbar e^{-iE_n t/\hbar} \frac{d}{dt} b_n(t) + E_n b_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} \\ = E_n b_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} + \sum_k \lambda \hat{W}_{nk}(t) b_k(t) e^{-iE_k t/\hbar} \end{aligned} \quad (۱۵-۱۳)$$

حال با ضرب دو طرف این تساوی در $e^{+iE_n t/\hbar}$ و وارد کردن بسامد زاویه‌ای بور

$$\omega_{nk} = \frac{E_n - E_k}{\hbar} \quad (۱۶-۱۳)$$

که به دو حالت E_n و E_k مربوط است، خواهیم داشت

$$i\hbar \frac{d}{dt} b_n(t) = \lambda \sum_k e^{i\omega_{nk} t} \hat{W}_{nk}(t) b_k(t) \quad (۱۷-۱۳)$$

۲-۲-۱۳ معادلات اختلال

دستگاه معادلات (۱۷-۱۳) دقیقاً هم‌ارز معادله شرودینگر (۴-۱۳) است. در حالت کلی نمی‌دانیم جواب دقیق آن را چگونه به دست آوریم. به همین دلیل از این واقعیت که λ در مقابل ۱ خیلی کوچک است استفاده می‌کنیم تا بتوانیم این جواب را به صورت بسط یک رشته‌نمایی از λ (که می‌توان انتظار داشت چنانچه λ به قدر کافی کوچک باشد، سریعاً همگرا شود) تعیین کنیم

$$b_n(t) = b_n^{(0)}(t) + \lambda b_n^{(1)}(t) + \lambda^2 b_n^{(2)}(t) + \dots \quad (18-13)$$

اگر این بسط را در (۱۷-۱۳) قرار دهیم و ضرایب λ^r دو طرف معادله را برابر قرار دهیم خواهیم داشت

۱. به ازای $r = 0$

$$i\hbar \frac{d}{dt} b_n^{(0)}(t) = 0 \quad (19-13)$$

زیرا طرف راست (۱۷-۱۳) دارای یک ضریب مشترک λ است. رابطه (۱۹-۱۳) حاکی از این است که $b_n^{(0)}$ به t بستگی ندارد. بنابراین وقتی λ صفر شود، $b_n(t)$ به صورت یک ثابت در می‌آید [۱۳-۱۳] را ببینید.

۲. به ازای $r \neq 0$

$$i\hbar \frac{d}{dt} b_n^{(r)}(t) = \sum_k e^{i\omega_{nk}t} \hat{W}_{nk}(t) b_k^{(r-1)}(t) \quad (20-13)$$

بنابراین می‌بینیم که با جواب مرتبه صفرم که از (۱۹-۱۳) به دست می‌آید و شرایط اولیه، می‌توان از رابطه بازگشتی (۲۰-۱۳) جواب مرتبه اول را به دست آورد. سپس از روی این جواب مرتبه اول می‌توان جواب مرتبه دوم را برحسب آن به دست آورد، و در نهایت از همین طریق، جواب مرتبه r را برحسب جواب مرتبه $(r-1)$ را تعیین کرد.

۳-۲-۱۳ حل تا مرتبه اول نسبت به λ

الف) حالت سیستم در لحظه t

به ازای $t < 0$ ، سیستم بنا به فرض در حالت $|\varphi_i\rangle$ است: از میان تمام ضرایب $b_n(t)$ فقط $b_i(t)$ مخالف صفر است (و علاوه بر این، مستقل از t است. زیرا در این حالت $\lambda \hat{W}$ صفر می‌شود). در

لحظه $t = 0$ ممکن است $\lambda \hat{W}(t)$ در عبور از مقدار صفر به مقدار $\lambda \hat{W}(0)$ ، منفصل شود. اما چون $\lambda \hat{W}(t)$ متناهی باقی می ماند، جواب معادله شرودینگر در $t = 0$ پیوسته است. در نتیجه

$$b_n(t=0) = \delta_{ni} \quad (21-13)$$

و این رابطه برای تمام مقادیر λ برقرار است. در نتیجه، ضرایب بسط (۱۳-۱۸) باید در روابط زیر صدق کنند

$$b_n^{(0)}(t=0) = \delta_{ni} \quad (22-13)$$

$$b_n^{(r)}(t=0) = 0 \quad \text{اگر } r \geq 1 \quad (23-13)$$

به این ترتیب، رابطه (۱۳-۱۹) به ازای تمام t های مثبت به شکل زیر در می آید

$$b_n^{(0)}(t) = \delta_{ni} \quad (24-13)$$

که جواب مرتبه صفر را به طور کامل تعیین می کند.

از روی این نتیجه می توان (۱۳-۲۰) را به ازای $r = 1$ به صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} b_n^{(1)}(t) &= \sum_k e^{i\omega_{nk}t} \hat{W}_{nk}(t) \delta_{ki} \\ &= e^{i\omega_{ni}t} \hat{W}_{ni}(t) \end{aligned} \quad (25-13)$$

که معادله ای است که بدون اشکال می توانیم از آن انتگرال بگیریم. با در نظر گرفتن شرط اولیه (۱۳-۲۳) خواهیم داشت

$$b_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{ni}t'} \hat{W}_{ni}(t') dt' \quad (26-13)$$

حال اگر (۱۳-۲۴) و (۱۳-۲۶) را در (۱۳-۱۴) و سپس در (۱۳-۷) قرار دهیم، حالت $|\psi(t)\rangle$ سیستم در لحظه t ، که تا مرتبه اول نسبت به λ حساب شده است، به دست می آید.

ب) احتمال گذار $\mathcal{P}_{if}(t)$

بنابر (۶-۱۳) و تعریف (۸-۱۳) از $c_f(t)$ ، احتمال گذار $\mathcal{P}_{if}(t)$ مساوی با $|c_f(t)|^2$ است، یعنی، چون $b_f(t)$ و $c_f(t)$ دارای یک قدر مطلق هستند [(۱۳-۱۴)]

$$\mathcal{P}_{if}(t) = |b_f(t)|^2 \quad (27-13)$$

که در آن

$$b_f(t) = b_f^{(0)}(t) + \lambda b_f^{(1)}(t) + \dots \quad (28-13)$$

را می‌توانیم از فرمولهایی که در بخش قبلی به دست آوردیم، محاسبه کنیم. از این پس، فرض می‌کنیم که حالت‌های $|\varphi_i\rangle$ و $|\varphi_f\rangle$ متفاوت‌اند. بنابراین، ما تنها به گذارهایی توجه خواهیم داشت که توسط $\lambda \hat{W}(t)$ بین دو حالت مانای متمایز H_0 القا می‌شوند. در این صورت داریم $b_f^{(0)}(t) = 0$ و در نتیجه

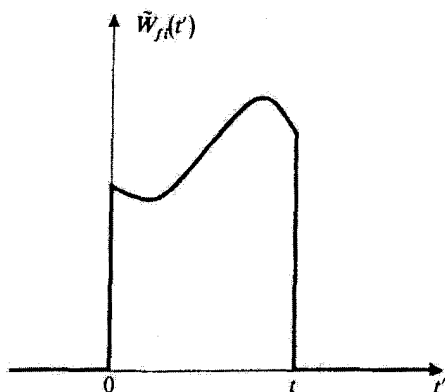
$$\mathcal{P}_{if}(t) = \lambda^2 |b_f^{(1)}(t)|^2 \quad (29-13)$$

با استفاده از رابطه (۲۶-۱۳) و جایگزین کردن $\lambda \hat{W}(t)$ توسط $W(t)$ [(۱۳-۳)] در نهایت خواهیم داشت

$$\mathcal{P}_{if}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} W_{fi}(t') dt' \right|^2 \quad (30-13)$$

تابع $\bar{W}_{fi}(t')$ را که به ازای $t' < 0$ و $t' > t$ مساوی صفر، و به ازای $0 \leq t' \leq t$ مساوی $W_{fi}(t')$ است در نظر می‌گیریم [شکل (۱-۱۳)]. عبارت $\bar{W}_{fi}(t')$ عبارت است از عنصر ماتریسی اختلالی که توسط سیستم بین لحظه $t = 0$ و زمان اندازه‌گیری t ، یعنی زمانی که می‌خواهیم تعیین کنیم که آیا سیستم در حالت $|\varphi_f\rangle$ قرار دارد یا خیر، "دیده می‌شود". نتیجه (۱۳-۳۰) نشان می‌دهد که $\mathcal{P}_{if}(t)$ با مربع قدر مطلق تبدیل فوریه اختلال "دیده شده"، $\bar{W}_{fi}(t')$ ، متناسب است. این تبدیل فوریه را در یک بسامد زاویه‌ای برابر با بسامد بور وابسته به گذار مورد نظر، محاسبه می‌کنیم.

همچنین، توجه داشته باشید که وقتی عنصر ماتریسی $W_{fi}(t)$ به ازای تمام مقادیر t برابر صفر باشد، احتمال گذار $\mathcal{P}_{if}(t)$ تا مرتبه اول صفر است.



شکل ۱۳-۱ تغییرات $\bar{W}_{fi}(t')$ برحسب t' . $\bar{W}_{fi}(t')$ در فاصله زمانی $0 \leq t' \leq t$ ، بر $W_{fi}(t')$ منطبق، و در خارج از این فاصله صفر می‌شود. این تبدیل فوریه $\bar{W}_{fi}(t')$ است که در احتمال گذار با مرتبه‌های کمتر دخالت می‌کند.

یادداشت:

تاکنون، در مورد شرایط اعتبار تقریب تا مرتبه اول در λ ، بحثی نکرده‌ایم. مقایسه رابطه (۱۳-۱۷) و رابطه (۱۳-۲۵) نشان می‌دهد که این تقریب صرفاً عبارت از این است که در طرف راست معادله (۱۳-۱۷)، به جای ضرایب $b_k(t)$ مقادیر $b_k(0)$ آنها در لحظه $t = 0$ را قرار دهیم. بنابراین، واضح است که تا وقتی t آنقدر کوچک باشد که $b_k(t)$ با $b_k(0)$ تفاوت چندانی نکند، این تقریب معتبر می‌ماند. از طرف دیگر، وقتی t بزرگ می‌شود، دلیلی وجود ندارد که تصحیحات مرتبه ۲، ۳، و غیره برحسب λ قابل چشمپوشی باشند. ■

۱۳-۳ یک مورد خاص و مهم: اختلال سینوسی یا ثابت

۱۳-۳-۱ کاربرد فرمولهای عمومی

حال فرض می‌کنیم که $W(t)$ به یکی از دو صورت ساده زیر باشد

$$\hat{W}(t) = \hat{W} \sin \omega t \quad (\text{الف } ۱۳-۳۱)$$

$$\hat{W}(t) = \hat{W} \cos \omega t \quad (\text{ب } ۱۳-۳۱)$$

که در آن، \hat{W} یک مشاهده‌پذیر مستقل از زمان و ω یک بسامد زاویه‌ای ثابت است. ما در فیزیک اغلب با چنین وضعی برمی‌خوریم. به‌عنوان مثال، در مکملهای ۱ و ۲ از فصل ۱۳، اختلال یک

سیستم فیزیکی را توسط یک موج الکترومغناطیسی با بسامد ω بررسی می‌کنیم؛ در این صورت $\mathcal{P}_{if}(t)$ معرف احتمال گذار القاشده توسط تابش تکفام ورودی بین حالت اولیه $|\varphi_i\rangle$ و حالت نهایی $|\varphi_f\rangle$ است.

اگر $\hat{W}(t)$ ، شکل خاص (۱۳-۳-۱) را داشته باشد، عناصر ماتریسی $\hat{W}_{fi}(t)$ به صورت زیر در می‌آیند

$$\hat{W}_{fi}(t) = \hat{W}_{fi} \sin \omega t = \frac{\hat{W}_{fi}}{2i} (e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}) \quad (۱۳-۳۲)$$

که در آن \hat{W}_{fi} یک عدد مختلط مستقل از زمان است. حال بردار حالت سیستم را تا مرتبه اول نسبت به λ حساب می‌کنیم. اگر (۱۳-۳۲) را در فرمول کلی (۱۳-۲۶) قرار دهیم، داریم

$$b_n^{(1)}(t) = -\frac{\hat{W}_{ni}}{2\hbar} \int_0^t [e^{i(\omega_{ni}+\omega)t'} - e^{i(\omega_{ni}-\omega)t'}] dt' \quad (۱۳-۳۳)$$

انتگرالی که در طرف دوم این رابطه وجود دارد به سادگی قابل محاسبه است و داریم

$$b_n^{(1)}(t) = \frac{\hat{W}_{ni}}{2i\hbar} \left[\frac{1 - e^{i(\omega_{ni}+\omega)t}}{\omega_{ni} + \omega} - \frac{1 - e^{i(\omega_{ni}-\omega)t}}{\omega_{ni} - \omega} \right] \quad (۱۳-۳۴)$$

بنابراین، در مورد خاص حاضر، معادله عمومی (۱۳-۳۰) تبدیل می‌شود به

$$\mathcal{P}_{if}(t; \omega) = \lambda^2 |b_f^{(1)}(t)|^2 = \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2} \left| \frac{1 - e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}}{\omega_{fi} + \omega} - \frac{1 - e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}}{\omega_{fi} - \omega} \right|^2 \quad (\text{الف } ۱۳-۳۵)$$

در احتمال \mathcal{P}_{if} ، متغیر ω را اضافه کرده‌ایم زیرا احتمال به بسامد اختلال بستگی دارد. حال اگر به جای شکل خاص (۱۳-۳-۱) الف)، شکل (۱۳-۳-۱) ب) را برای انتخاب کنیم، با محاسبه‌ای شبیه به محاسبه پیش خواهیم داشت

$$\mathcal{P}_{if}(t; \omega) = \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2} \left| \frac{1 - e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}}{\omega_{fi} + \omega} + \frac{1 - e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}}{\omega_{fi} - \omega} \right|^2 \quad (\text{ب } ۱۳-۳۵)$$

اگر ω را مساوی صفر بگیریم، $\hat{W} \cos \omega t$ مستقل از زمان می‌شود. بنابراین، احتمال گذار $\mathcal{P}_{if}(t)$ القاشده توسط اختلال ثابت W ، با قرار دادن $\omega = 0$ در (۱۳-۳-۵) به دست می‌آید

$$\mathcal{P}_{if}(t) = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2 \omega_{fi}^2} |1 - e^{i\omega_{fi}t}|^2 = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2} F(t, \omega_{fi}) \quad (۱۳-۳۶)$$

که در آن

$$F(t, \omega_{fi}) = \left[\frac{\sin(\omega_{fi}t/2)}{\omega_{fi}/2} \right]^2 \quad (37-13)$$

برای مطالعه محتوای فیزیکی معادلات (۱۳-۳۵) و (۱۳-۳۶) ابتدا موردی را که در آن $\langle \varphi_i \rangle$ و $\langle \varphi_f \rangle$ دو تراز گسسته هستند (۱۳-۳-۲)، و سپس موردی را که در آن $\langle \varphi_f \rangle$ متعلق است به یک پیوستار از حالت‌های نهایی (۱۳-۳-۳)، مورد بحث قرار می‌دهیم: در مورد اول، $\mathcal{P}_{if}(t; \omega)$ [یا $\mathcal{P}_{if}(t)$] در واقع، معرف احتمال گذاری است که می‌توان آن را اندازه گرفت، در صورتی که در مورد دوم ما، در واقع با یک چگالی احتمال سروکار داریم (در این صورت، کمیت‌های واقعاً قابل اندازه‌گیری شامل یک جمع‌بندی بر روی مجموعه‌ای از حالت‌های نهایی هستند). از دیدگاه فیزیکی، بین این دو مورد تفاوت آشکاری وجود دارد: در مکملهای ۳ و ۴ از فصل ۱۳ خواهیم دید که در یک بازه زمانی به اندازه کافی طولانی، سیستم در مورد اول بین حالت‌های $\langle \varphi_i \rangle$ و $\langle \varphi_f \rangle$ نوسان می‌کند، در حالی که در مورد دوم، سیستم به‌طور برگشت‌ناپذیر حالت $\langle \varphi_i \rangle$ را ترک می‌کند. در بخش ۱۳-۳-۲، برای اینکه توجه خود را بر پدیده تشدید متمرکز کنیم یک اختلال سینوسی انتخاب خواهیم کرد، ولی نتایج حاصل را می‌توان به راحتی به مورد یک اختلال ثابت نیز تعمیم داد. برعکس، مورد اخیر را برای بحث بخش ۱۳-۳-۳ به‌کار خواهیم برد.

۱۳-۳-۲ اختلال سینوسی که دو حالت گسسته را به هم جفت می‌کند: پدیده تشدید الف) طبیعت تشدیدی احتمال گذار

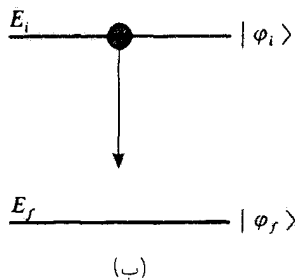
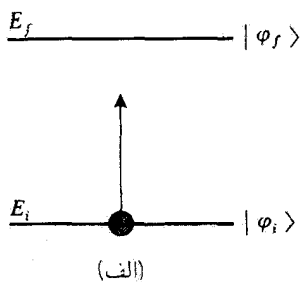
وقتی زمان t ثابت است، احتمال گذار $\mathcal{P}_{if}(t; \omega)$ فقط تابعی از متغیر ω است. خواهیم دید که این تابع به‌ازای

$$\omega \simeq \omega_{fi} \quad (\text{الف } 38-13)$$

یا

$$\omega \simeq -\omega_{fi} \quad (\text{ب } 38-13)$$

دارای یک بیشینه است. بنابراین هنگامی که بسامد زاویه‌ای اختلال بر بسامد زاویه‌ای یور وابسته به دو حالت $\langle \varphi_i \rangle$ و $\langle \varphi_f \rangle$ منطبق باشد، یک پدیده تشدید رخ می‌دهد. اگر $\omega \geq 0$ باشد، تساوی



شکل ۱۳-۲ موقعیت نسبی انرژیهای E_f و E_i وابسته به حالت‌های $|\varphi_i\rangle$ و $|\varphi_f\rangle$. اگر $E_i < E_f$ باشد، (شکل الف)، گذار $|\varphi_i\rangle \rightarrow |\varphi_f\rangle$ با جذب یک کوانتوم انرژی $\hbar\omega$ رخ می‌دهد؛ از طرف دیگر، اگر $E_i > E_f$ باشد (شکل ب)، گذار $|\varphi_i\rangle \rightarrow |\varphi_f\rangle$ با گسیل القاشدهٔ یک کوانتوم انرژی $\hbar\omega$ پدید می‌آید.

(۱۳-۳۸)، به ترتیب، شرایط تشدید مربوط به موارد $\omega_{fi} > 0$ و $\omega_{fi} < 0$ را برآورده می‌کند: در مورد اول (شکل ۱۳-۲ الف)، سیستم با جذب تشدید کوانتوم انرژی $\hbar\omega$ ، از تراز انرژی پایینتر E_i به تراز بالاتر E_f می‌رود. در مورد دوم، (شکل ۱۳-۲ ب)، اختلال تشدید، گذر سیستم را از تراز انرژی بالاتر E_i به تراز پایینتر E_f (که با گسیل القاشدهٔ یک کوانتوم انرژی $\hbar\omega$ همراه است) تحریک می‌کند. در تمام این بخش، فرض خواهیم کرد که ω_{fi} مثبت است (وضعیت شکل ۱۳-۲ الف)؛ موردی که در آن ω_{fi} منفی است را می‌توانیم به طریق مشابهی بررسی کنیم.

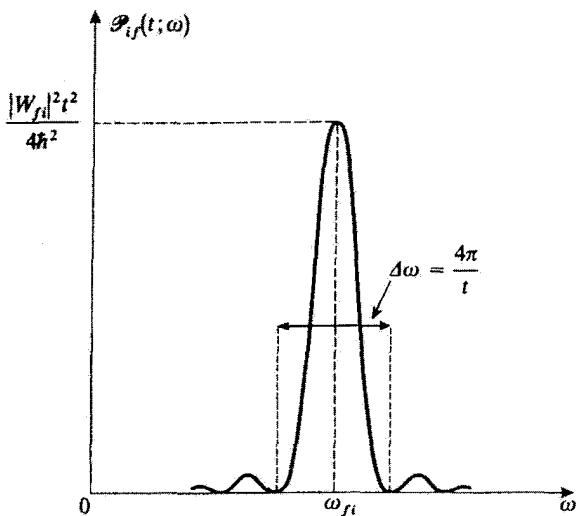
برای روشن ساختن ماهیت تشدید احتمال گذار، توجه می‌کنیم که روابط (۱۳-۳۸ الف) و (۱۳-۳۸ ب) برای $\mathcal{P}_{if}(t; \omega)$ شامل مربع قدرمطلق مجموع دو عبارت مختلط هستند. اولین عبارت با رابطهٔ

$$A_+ = \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} + \omega)t}}{\omega_{fi} + \omega} = -i e^{i(\omega_{fi} - \omega)t/2} \frac{\sin[(\omega_{fi} + \omega)t/2]}{(\omega_{fi} + \omega)/2} \quad (۱۳-۳۹ الف)$$

و دومین عبارت با رابطهٔ زیر متناسب است

$$A_- = \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} - \omega)t}}{\omega_{fi} - \omega} = -i e^{i(\omega_{fi} - \omega)t/2} \frac{\sin[(\omega_{fi} - \omega)t/2]}{(\omega_{fi} - \omega)/2} \quad (۱۳-۳۹ ب)$$

مخرج عبارت A_- به‌ازای $\omega = \omega_{fi}$ و مخرج A_+ به‌ازای $\omega = -\omega_{fi}$ صفر می‌شود. در نتیجه، انتظار می‌رود که وقتی ω به ω_{fi} نزدیک شود فقط جمله A_- مهم باشد؛ به همین دلیل A_- را "عبارت تشدید" و A_+ را "عبارت پاد تشدید" می‌نامیم (اگر به‌ازای ω_{fi} منفی، ω به $-\omega_{fi}$ نزدیک باشد، A_+ تشدید می‌شود).



شکل ۱۳-۳ تغییرات احتمال گذار مرتبه اول $\mathcal{P}_{if}(t; \omega)$ وابسته به یک اختلال سینوسی با بسامد زاویه‌ای ω ; t ثابت است. به ازای $\omega \approx \omega_{fi}$ ، یک تشدید رخ می‌دهد که شدت آن متناسب با t^2 است و پهنای آن به طرز معکوس متناسب با t است.

اکنون موردی را بررسی می‌کنیم که در آن، با چشمپوشی از جمله یاد تشدیدی A_+ داریم

$$|\omega - \omega_{fi}| \ll |\omega_{fi}| \quad (40-13)$$

(اعتبار این تقریب را در بخش ۱۳-۳ مورد بحث قرار خواهیم داد) در این صورت، با در نظر گرفتن (۱۳-۳۹) ب) به دست می‌آوریم

$$\mathcal{P}_{if}(t; \omega) = \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2} F(t, \omega - \omega_{fi}) \quad (41-13)$$

که در آن

$$F(t, \omega - \omega_{fi}) = \left\{ \frac{\sin[(\omega_{fi} - \omega)t/2]}{(\omega_{fi} - \omega)/2} \right\}^2 \quad (42-13)$$

شکل ۱۳-۳ تغییرات $\mathcal{P}_{if}(t; \omega)$ نسبت به ω ، به ازای t ی ثابت است. این شکل، ماهیت تشدیدی گذار را به وضوح نشان می‌دهد. این احتمال، به ازای $\omega = \omega_{fi}$ بیشینه‌ای را نشان می‌دهد که مقدار

آن برابر با $|W_{fi}|^2 t^2 / 4 \hbar^2$ است. سپس به تدریج که از ω_{fi} دور می‌شویم، مقدار آن کاهش می‌یابد و به‌ازای $\omega = \omega_{fi}$ صفر می‌شود. وقتی افزایش $|\omega - \omega_{fi}|$ ادامه پیدا کند، این احتمال بین $|W_{fi}|^2 / \hbar^2 (\omega - \omega_{fi})^2$ و صفر نوسان می‌کند ("نقش پراش").

(ب) پهنای تشدید و رابطهٔ عدم قطعیت زمان-انرژی

پهنای تشدید $\Delta\omega$ را می‌توانیم تقریباً به صورت فاصلهٔ بین دو صفر اول $\mathcal{P}_{if}(t; \omega)$ حول $\omega = \omega_{fi}$ تعریف کنیم. در داخل این فاصله است که احتمال گذار بیشترین مقادیر خود را اختیار می‌کند (اولین بیشینهٔ ثانوی \mathcal{P}_{if} که به‌ازای $(\omega - \omega_{fi})t/2 = 3\pi/2$ به دست می‌آید، برابر $|W_{fi}|^2 t^2 / 9\pi^2 \hbar^2$ است، یعنی، کمتر از ۵٪ احتمال گذار در نقطهٔ تشدید است). بنابراین داریم

$$\Delta\omega \simeq \frac{4\pi}{t} \quad (43-13)$$

هر چه زمان t بیشتر باشد، این پهنای کوچکتر است.

نتیجهٔ (۴۳-۱۳) شباهتی با رابطهٔ عدم قطعیت زمان-انرژی دارد (فصل ۳، بخش e-۲). فرض کنید بخواهیم اختلاف انرژی $E_f - E_i = \hbar\omega_{fi}$ را با اعمال یک اختلال سینوسی با بسامد زاویه‌ای ω به سیستم و تغییر ω تا ظهور تشدید، اندازه‌گیری کنیم. اگر اختلال در مدت زمان t عمل کند، عدم قطعیت ΔE در مقدار $(E_f - E_i)$ ، بنابر (۴۳-۱۳)، از مرتبهٔ زیر خواهد بود

$$\Delta E = \hbar\Delta\omega \simeq \frac{\hbar}{t} \quad (44-13)$$

بنابراین، حاصلضرب $t\Delta E$ نمی‌تواند کمتر از \hbar باشد. این حاصلضرب رابطهٔ عدم قطعیت زمان-انرژی را تداعی می‌کند، هر چند t در اینجا یک بازهٔ زمانی مشخصهٔ تحول آزاد سیستم نیست، بلکه از خارج اعمال می‌شود.

(ج) اعتبار روش اختلال

حال می‌خواهیم حدود اعتبار محاسباتی را که به نتیجهٔ (۴۱-۱۳) منجر می‌شوند بررسی کنیم. ابتدا تقریب تشدید را مورد بحث قرار می‌دهیم، که شامل چشمپوشی از عبارت پاد تشدید A_+ است، و سپس تقریب مرتبهٔ اول در بسط اختلال بردار حالت را بررسی می‌کنیم.

۱. بحث تقریب تشدید

با استفاده از فرض $\omega \simeq \omega_{fi}$ از A_+ در مقابل A_- صرف نظر کرده‌ایم. از این رو قدرمطلقهای A_+ و A_- را با هم مقایسه خواهیم کرد.

شکل تابع $|A_-(\omega)|^2$ در شکل ۱۳-۳ نشان داده شده است. چون $|A_+(\omega)|^2 = |A_-(-\omega)|^2$ می‌توان $|A_+(\omega)|^2$ را با رسم قرینه منحنی پیش نسبت به محور عمودی $\omega = 0$ ، به دست آورد. اگر این دو منحنی، به پهنای $\Delta\omega$ ، در نقاطی متمرکز باشند که فاصله جدایی آنها خیلی از $\Delta\omega$ بیشتر است، واضح است که در حوالی $\omega_{fi} = \omega$ ، قدرمطلق A_+ نسبت به A_- قابل چشمپوشی است. بنابراین، تقریب تشدیدي به شرطی^۱ موجه است که

$$2|\omega_{fi}| \gg \Delta\omega \quad (۴۵-۱۳)$$

یعنی با استفاده از (۴۳-۱۳)

$$t \gg \frac{1}{|\omega_{fi}|} \simeq \frac{1}{\omega} \quad (۴۶-۱۳)$$

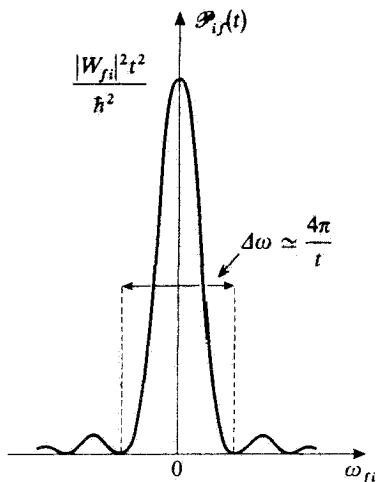
بنابراین، نتیجه (۴۱-۱۳) فقط وقتی معتبر است که اختلال سینوسی در مدت زمان t که در مقایسه با $1/\omega$ بزرگ است، عمل کند. معنی فیزیکی چنین شرطی روشن است: در بازه زمانی $[0, t]$ اختلال مورد نظر باید نوسانات متعددی را انجام دهد تا برای سیستم به صورت یک اختلال سینوسی تجلی کند. از طرف دیگر، اگر t در مقایسه با $1/\omega$ کوچک بود، اختلال فرصت نوسان پیدا نمی‌کرد و معادل اختلالی بود که یا به طور خطی نسبت به زمان تغییر می‌کرد [در مورد (۳۱-الف)] و یا مقداری ثابت بود [در مورد (۳۱-ب)].

یادداشت:

برای یک اختلال ثابت، چون ω مساوی صفر است، شرط (۴۶-۱۳) هرگز نمی‌تواند برآورده شود. اما تطبیق محاسبات بخش (۱۳-۲-۳ ب) در بالا به این مورد مشکلی نیست یا در واقع [در (۱۳-۳۶)] با قرار دادن مستقیم $\omega = 0$ در فرمول (۱۳-۳۵ ب)، احتمال گذار $\mathcal{P}_{if}(t)$ را برای یک اختلال ثابت به دست آورده‌ایم. توجه کنید که به این ترتیب دو جمله A_+ و A_- مساوی‌اند؛ یعنی اگر شرط (۴۶-۱۳) برآورده نشود، جمله یاد تشدیدي قابل چشمپوشی نیست.

تغییرات احتمال $\mathcal{P}_{if}(t)$ نسبت به اختلاف انرژی $\hbar\omega_{fi}$ (با زمان ثابت t) در شکل ۱۳-۴ نشان داده شده است. این احتمال به‌ازای $\omega_{fi} = 0$ بیشینه است که با آنچه در بخش (۱۳-۲-۳ ب) پیدا کردیم متناظر است. اگر بسامد زاویه‌ای آن صفر باشد، اختلال هنگامی تشدیدي است که $\omega_{fi} = 0$ باشد (ترازهای واگن). به بیان کلیتر، نکات بخش ۱۳-۲-۳ ب مربوط به جنبه‌های تشدید را می‌توان به این مورد تعمیم داد.

۱. توجه کنید که اگر شرط (۴۰-۱۳) برقرار نباشد، جملات تشدیدي و یاد تشدیدي تداخل می‌کنند، یعنی صحیح نیست که به سادگی $|A_+|^2$ و $|A_-|^2$ را اضافه کنیم.



شکل ۱۳-۴ تغییرات احتمال گذار $\mathcal{P}_{if}(t)$ و وابسته به یک اختلال ثابت نسبت به $\omega_{fi} = (E_f - E_i)/\hbar$ برای t ثابت یک تشدید متمرکز در اطراف $\omega_{fi} = 0$ (بایستگی انرژی) با همان پهنای تشدید شکل ۱۳-۳ ظاهر می‌شود، ولی شدت آن ۴ بار بیشتر است (چون جملات تشدید و پاد تشدید تداخل سازنده برای یک اختلال ثابت با هم برابری).

۲. حدود محاسبه مرتبه اول

قبلاً گفتیم (یادداشت انتهای بخش ۱۳-۲-۳ ب) که تقریب مرتبه اول ممکن است وقتی زمان t خیلی بزرگ می‌شود اعتبار خود را از دست بدهد. این مطلب را می‌توان از رابطه (۱۳-۴۱)، که در حالت تشدید می‌توانیم آن را به صورت زیر بنویسیم، مشاهده کرد

$$\mathcal{P}_{if}(t; \omega = \omega_{fi}) = \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2} t^2 \quad (۱۳-۴۷)$$

وقتی $t \rightarrow \infty$ ، این تابع نامتناهی می‌شود، که بی‌معنی است، زیرا یک احتمال هرگز نمی‌تواند بزرگتر از ۱ باشد.

در عمل، برای اینکه تقریب مرتبه اول در حالت تشدید معتبر باشد، باید احتمال (۱۳-۴۷)

خیلی کوچکتر از ۱ باشد، یعنی^۱

۱. برای اینکه این نظریه معنی داشته باشد لازم است شرایط (۱۳-۴۶) و (۱۳-۴۸) سازگار باشند، یعنی باید داشته باشیم

$$\frac{1}{|\omega_{fi}|} \ll \frac{\hbar}{|W_{fi}|}$$

این نامساوی بدین معنی است که اختلاف انرژی $|E_f - E_i| = \hbar|\omega_{fi}|$ خیلی بزرگتر از عنصر ماتریسی $W(t)$ بین $|i\rangle$ و $|f\rangle$ است.

$$t \ll \frac{h}{|W_{fi}|} \quad (۴۸-۱۳)$$

برای اینکه دقیقاً نشان دهیم که چرا این نامساوی به اعتبار تقریب مرتبه اول ارتباط دارد، لازم است که از رابطه (۱۳-۲۰) تصحیحات مرتبه بالاتر را حساب کنیم و ببینیم تحت چه شرایطی این تصحیحات قابل صرف نظر کردن هستند. به این ترتیب خواهیم دید که هر چند نامساوی (۱۳-۴۸) لازم است ولی دقیقاً کافی نیست: به عنوان مثال، در جملات مرتبه دوم یا بالاتر، غیر از عناصر \bar{W}_{fi} ، عناصر مختلط W_{kn} از \bar{W} ظاهر می شوند، که باید بعضی شرایط را بر آنها تحمیل کنیم، تا تصحیحات متناظر کوچک شوند.

توجه کنید که مسئله محاسبه احتمال گذار را هنگامی که t در (۱۳-۴۸) صدق نمی کند، در مکمل ۳ از فصل ۱۳، که در آن یک تقریب از نوع متفاوت به کار می رود (تقریب جواب مشخصه)، مطرح خواهیم کرد.

۱۳-۳-۳ جفت شدگی با حالت‌های طیف پیوسته

اگر انرژی E_f متعلق به قسمت پیوسته طیف H_0 باشد، یعنی، اگر حالت‌های نهایی را با شاخصهای پیوسته مشخص کنیم، نمی توانیم احتمال یافتن سیستم را در یک حالت کاملاً معین $|\varphi_f\rangle$ در زمان t اندازه بگیریم. اصول موضوع فصل ۳ حاکی از آن است که در این مورد کمیت $|\langle \varphi_f | \psi(t) \rangle|^2$ که در بالا پیدا کردیم (تقریباً)، یک چگالی احتمال است. به این ترتیب، پیش‌بینیهای فیزیکی مربوط به یک اندازه‌گیری مفروض، شامل یک انتگرال‌گیری از این چگالی احتمال بر روی گروهی از حالت‌های نهایی (که به اندازه‌گیری مورد نظر بستگی دارد) خواهد بود. در این مورد، بررسی خواهیم کرد که نتایج بخشهای قبلی، به چه صورتی در می آیند.

الف) انتگرال‌گیری بر روی یک پیوستاری از حالت‌های نهایی: چگالی حالتها

۱. مثال

برای پی بردن به اینکه چگونه این انتگرال‌گیری بر روی حالت‌های نهایی را انجام دهیم، ابتدا یک مثال واقعی را در نظر می‌گیریم.

برای این منظور پراکندگی یک ذره بدون اسپین و به جرم m را توسط پتانسیل $W(\mathbf{r})$ مورد بحث قرار می‌دهیم (فصل ۸). حالت $\langle \psi(t) |$ ذره در لحظه t را می‌توانیم روی حالت‌های $|p\rangle$ که دارای تکانه‌های کاملاً معین p و انرژیهای زیر هستند بسط دهیم

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (۴۹-۱۳)$$

توابع موج متناظر عبارت‌اند از امواج تخت

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right)^{3/2} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \quad (50-13)$$

چگالی احتمال وابسته به یک اندازه‌گیری تکانه برابر است با $|\langle \mathbf{p} | \psi(t) \rangle|^2$ (فرض بر این است که $|\psi(t)\rangle$ بهنجار باشد).

وقتی ذره با تکانه \mathbf{p}_f پراکنده می‌شود، آشکارساز به‌کار رفته در آزمایش (به‌عنوان مثال، شکل ۲ از فصل ۸ را ببینید) یک علامت می‌دهد. البته، این آشکارساز همواره دارای یک دهانه زاویه‌ای متناهی (غیر صفر) است، و از این رو قدرت تمیز انرژی آن کامل نیست؛ هر وقت تکانه \mathbf{p} ذره در داخل زاویه فضایی $\delta\Omega_f$ حول \mathbf{p}_f ، و انرژی آن در بازه δE_f متمرکز در $E_f = \mathbf{p}_f^2/2m$ باشد، آشکارساز یک علامت می‌دهد. بنابراین، اگر حوزه فضای \mathbf{p} که تحت این شرایط تعریف می‌شود را با D_f نمایش دهیم احتمال به‌دست آوردن یک علامت از آشکارساز برابر خواهد بود با

$$\delta\mathcal{P}(\mathbf{p}_f, t) = \int_{\mathbf{p} \in D_f} d^3p |\langle \mathbf{p} | \psi(t) \rangle|^2 \quad (51-13)$$

برای استفاده از نتایج بخشهای قبل، مجبور خواهیم بود تغییر متغیرهایی بدهیم که به یک انتگرال‌گیری بر روی انرژیها منجر می‌شود. این مطلب، هیچ اشکالی ایجاد نمی‌کند، زیرا می‌توانیم بنویسیم

$$d^3p = p^2 dp d\Omega \quad (52-13)$$

و متغیر p را با انرژی E ، که طبق رابطه (۴۹-۱۳) به هم مربوط‌اند، جایگزین کنیم. بنابراین داریم

$$d^3p = \rho(E) dE d\Omega \quad (53-13)$$

که در آن تابع $\rho(E)$ ، موسوم به چگالی حالت‌های نهایی، را می‌توانیم، طبق رابطه‌های (۴۹-۱۳)، (۵۲-۱۳)، و (۵۳-۱۳)، به‌صورت زیر بنویسیم

$$\rho(E) = p^2 \frac{dp}{dE} = p^2 \frac{m}{p} = m\sqrt{2mE} \quad (54-13)$$

به این ترتیب، فرمول (۵۱-۱۳) به‌صورت زیر در می‌آید

$$\delta\mathcal{P}(\mathbf{p}_f, t) = \int_{\left\{ \begin{array}{l} \Omega \in \delta\Omega_f \\ E \in \delta E_f \end{array} \right.} d\Omega dE \rho(E) |\langle \mathbf{p} | \psi(t) \rangle|^2 \quad (55-13)$$

۲. حالت کلی

فرض کنید در یک مسئله خاص، بعضی ویژه‌حالت‌های H_0 را با یک مجموعه از شاخصهای پیوسته، که آنها را با نماد α نشان می‌دهیم، مشخص کنیم، به گونه‌ای که رابطه راست‌هنجارش را بتوان به صورت زیر نوشت

$$\langle \alpha | \alpha' \rangle = \delta(\alpha - \alpha') \quad (56-13)$$

سیستم در لحظه t توسط کت بهنجار $|\psi(t)\rangle$ توصیف می‌شود. می‌خواهیم احتمال $\mathcal{P}(\alpha_f, t)$ را برای یافتن سیستم، در یک اندازه‌گیری در گروه مفروضی از حالت‌های نهایی محاسبه کنیم این گروه حالت را با حوزه D_f از مقادیر پارامترهای α ، متمرکز در α_f ، مشخص می‌کنیم، و فرض می‌کنیم که انرژیهای آنها یک پیوستار تشکیل دهند. به این ترتیب، از اصول موضوع مکانیک کوانتومی داریم:

$$\delta \mathcal{P}(\alpha_f, t) = \int_{\alpha \in D_f} d\alpha |\langle \alpha | \psi(t) \rangle|^2 \quad (57-13)$$

همانند مثال بخش ۱۳-۳-الف-۱ در بالا، تغییر متغیر می‌دهیم، و چگالی انرژی حالت‌های نهایی را معرفی می‌کنیم: به جای مشخص کردن این حالت‌ها با پارامترهای α ، انرژی E و یک مجموعه از پارامترهای دیگر مانند β (که وقتی H_0 به تنهایی یک مجموعه کاملی از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاپذیر تشکیل نمی‌دهد ضروری هستند) را به‌کار خواهیم برد. به این ترتیب، می‌توانیم $d\alpha$ را برحسب dE و $d\beta$ بیان کنیم

$$d\alpha = \rho(\beta, E) d\beta dE \quad (58-13)$$

که در آن چگالی حالت‌های نهایی $\rho(\beta, E)$ ظاهر می‌شود. اگر گستره مقادیر پارامترهای β و E را که با D_f تعریف می‌شوند با $\delta\beta_f$ و δE_f نمایش دهیم، داریم

$$\delta \mathcal{P}(\alpha_f, t) = \int_{\substack{\beta \in \delta\beta_f \\ E \in \delta E_f}} d\beta dE \rho(\beta, E) |\langle \beta, E | \psi(t) \rangle|^2 \quad (59-13)$$

که در آن نمادگذاری $|\alpha\rangle$ را توسط $|\beta, E\rangle$ جایگزین کرده‌ایم تا وابستگی چگالی احتمال $|\langle \alpha | \psi(t) \rangle|^2$ را به E و β مشخص کنیم.

۱. در حالت کلی، چگالی حالت‌های ρ هم به E بستگی دارد و هم به β . اما غالباً (مثال ۱۳-۳-الف-۱ در بالا ببینید) ρ فقط به E بستگی دارد.

ب) قاعدهٔ طلایی فرمی

در رابطه (۵۹-۱۳)، $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle$ عبارت است از بردار حالت بهنجارشدهٔ سیستم در زمان t . همانند بخش ۱۳-۱ از این فصل، سیستمی را در نظر می‌گیریم که ابتدا در یک ویژه‌حالت $|\varphi_i\rangle$ از H_0 باشد [بنابراین $|\varphi_i\rangle$ متعلق است به طیف گسستهٔ H_0 ، زیرا حالت اولیهٔ سیستم باید مثل $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle$ بهنجارپذیر باشد]. در رابطه (۵۹-۱۳)، نمادگذاری $\delta \mathcal{P}(\alpha_f, t)$ را با $\delta \mathcal{P}(\varphi_i, \alpha_f, t)$ جایگزین خواهیم کرد تا به خاطر داشته باشیم که سیستم از حالت $|\varphi_i\rangle$ شروع می‌کند.

وقتی حالت نهایی سیستم به طیف پیوستهٔ H_0 تعلق داشته باشد، محاسبات بخش ۱۳-۲ و کاربرد آنها در مورد یک اختلال سینوسی یا ثابت (بخشهای ۱۳-۳-۱ و ۱۳-۳-۲) معتبر می‌ماند، اگر فرض کنیم که W ثابت است، می‌توانیم با استفاده از فرمول (۱۳-۳۶) چگالی احتمال $|\langle \beta, E | \psi(t) \rangle|^2$ را تا مرتبهٔ اول در W حساب کنیم. به این ترتیب داریم

$$|\langle \beta, E | \psi(t) \rangle|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |\langle \beta, E | W | \varphi_i \rangle|^2 F\left(t, \frac{E - E_i}{\hbar}\right) \quad (۶۰-۱۳)$$

که در آن E و E_i ، به ترتیب، انرژیهای حالت‌های $|\beta, E\rangle$ و $|\varphi_i\rangle$ هستند، و F تابعی است که با رابطه (۱۳-۳۷) تعریف می‌شود. بالاخره برای $\delta \mathcal{P}(\varphi_i, \alpha_f, t)$ داریم

$$\delta \mathcal{P}(\varphi_i, \alpha_f, t) = \frac{1}{\hbar^2} \int_{\substack{\beta \in \delta \beta_f \\ E \in \delta E_f}} d\beta dE \rho(\beta, E) |\langle \beta, E | W | \varphi_i \rangle|^2 F\left(t, \frac{E - E_i}{\hbar}\right) \quad (۶۱-۱۳)$$

تابع $F(t, E - E_i/\hbar)$ در مجاورت $E = E_i$ سریعاً تغییر می‌کند (شکل ۱۳-۴). اگر t به قدر کافی بزرگ باشد، این تابع را می‌توان، با یک ضریب ثابت، تقریباً با تابع $\delta(E - E_i)$ مساوی گرفت، زیرا، طبق فرمولهای (۱۱) و (۲۰) از پیوست ۲ داریم

$$\lim_{t \rightarrow \infty} F\left(t, \frac{E - E_i}{\hbar}\right) = \pi t \delta\left(\frac{E - E_i}{\hbar}\right) = 2\pi \hbar t \delta(E - E_i) \quad (۶۲-۱۳)$$

از طرف دیگر، تابع $|\langle \beta, E | W | \varphi_i \rangle|^2 \rho(\beta, E)$ معمولاً نسبت به E خیلی کندتر تغییر می‌کند. در اینجا فرض می‌کنیم که t آن قدر بزرگ است که می‌توان از تغییرات این تابع در یک بازهٔ انرژی به پهنای $2\pi\hbar/t$ و متمرکز در $E = E_i$ ، صرف‌نظر کرد.^۱ به این ترتیب، می‌توانیم در (۶۱-۱۳) به جای $F(t, E - E_i/\hbar)$ حد (۶۲-۱۳)ی آن را قرار دهیم. با این کار می‌توانیم بلافاصله انتگرال

۱. $\rho(\beta, E) |\langle \beta, E | W | \varphi_i \rangle|^2$ باید آن قدر به کندی تغییر کند که یافتن آن مقادیری از t که شرط گفته‌شده را برآورده

بر روی E را انجام دهیم. اگر، علاوه بر این، $\delta\beta_f$ خیلی کوچک باشد، انتگرال‌گیری بر روی β غیرضروری است، و سرانجام خواهیم داشت:

$$\left. \begin{aligned} & \text{- وقتی انرژی } E_i \text{ متعلق به حوزه } \delta E_f \text{ باشد} \\ \delta \mathcal{P}(\varphi_i, \alpha_f, t) &= \delta\beta_f \frac{\gamma\pi}{h} t |\langle \beta_f, E_f = E_i | W | \varphi_i \rangle|^2 \rho(\beta_f, E_f = E_i) \\ & \text{- وقتی انرژی } E_i \text{ به این حوزه تعلق نداشته باشد} \end{aligned} \right\} \begin{aligned} & \text{(الف ۶۳-۱۳)} \\ & \text{(ب ۶۳-۱۳)} \end{aligned}$$

$$\delta \mathcal{P}(\varphi_i, \alpha_f, t) = 0$$

همان‌طور که در یادداشت بخش (۱۳-۲-۳-ج-۲) دیدیم، یک اختلال ثابت فقط می‌تواند گذارهایی را بین حالت‌های با انرژیهای مساوی القا کند. یعنی، سیستم باید در حالت‌های اولیه و نهایی (با تقریب $2\pi\hbar/t$) یک مقدار انرژی داشته باشد. به این دلیل است که اگر انرژی E_i در حوزه δE_f نباشد، احتمال گذار صفر است.

احتمال (الف ۶۳-۱۳) به‌طور خطی با زمان افزایش می‌یابد. در نتیجه، احتمال گذار در واحد زمان، $\delta \mathcal{W}(\varphi_i, \alpha_f)$ ، که به‌صورت زیر تعریف می‌شود مستقل از زمان است.

$$\delta \mathcal{W}(\varphi_i, \alpha_f) = \frac{d}{dt} \delta \mathcal{P}(\varphi_i, \alpha_f, t) \quad (۶۴-۱۳)$$

چگالی احتمال گذار بر واحد زمان و بر واحد فاصله متغیر β_f را به‌صورت زیر تعریف می‌کنیم

$$w(\varphi_i, \alpha_f) = \frac{\delta \mathcal{W}(\varphi_i, \alpha_f)}{\delta \beta_f} \quad (۶۵-۱۳)$$

این عبارت برابر است با

$$w(\varphi_i, \alpha_f) = \frac{\gamma\pi}{h} |\langle \beta_f, E_f = E_i | W | \varphi_i \rangle|^2 \rho(\beta_f, E_f = E_i) \quad (۶۶-۱۳)$$

این نتیجه مهم، قاعده طلایی فرمی نامیده می‌شود.

یادداشتها:

۱. فرض می‌کنیم W یک اختلال سینوسی به شکل (الف ۳۱-۱۳) یا (ب ۳۱-۱۳) باشد، که یک حالت $|\varphi_i\rangle$ را به یک پیوستار از حالت‌های $|\beta_f, E_f\rangle$ با انرژیهای E_f نزدیک به $(E_i + \hbar\omega)$ ، \rightarrow کنند ممکن سازد و در عین حال این تغییرات باید آن‌قدر کوچک باشند که تلقی W به‌صورت اختلال معتبر باشد. به‌علاوه در اینجا فرض می‌کنیم که $\delta E_f \gg \varepsilon\pi\hbar/t$.

جفت می‌کند. با شروع از فرمول (۱۳-۴۱)، می‌توانیم همان روش بالا را به کار ببریم و نتیجه بگیریم که

$$w(\varphi_i, \alpha_f) = \frac{\pi}{2\hbar} |\langle \beta_f, E_f = E_i + \hbar\omega | W | \varphi_i \rangle|^2 \rho(\beta_f, E_f = E_i + \hbar\omega) \quad (۶۷-۱۳)$$

۲. به مسئله پراکندگی یک ذره توسط پتانسیل W که عناصر ماتریسی آن در نمایش $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ با رابطه زیر داده می‌شوند، برمی‌گردیم

$$\langle \mathbf{r} | W | \mathbf{r}' \rangle = W(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (۶۸-۱۳)$$

اکنون فرض می‌کنیم که حالت اولیه سیستم یک حالت با تکانه کاملاً معین است:

$$|\psi(t=0)\rangle = |\mathbf{p}_i\rangle \quad (۶۹-۱۳)$$

و احتمال پراکندگی یک ذره فرودی با تکانه \mathbf{p}_i را به حالت‌های با تکانه کاملاً معین \mathbf{p} که حول یک مقدار مفروض \mathbf{p}_f (با $|\mathbf{p}_f| = |\mathbf{p}_i|$) دسته‌بندی شده‌اند، محاسبه می‌کنیم. رابطه (۱۳-۶۶) احتمال پراکندگی $w(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_f)$ را در واحد زمان و واحد زاویه فضایی حول $\mathbf{p} = \mathbf{p}_f$ به دست می‌دهد

$$w(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_f) = \frac{\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{p}_f | W | \mathbf{p}_i \rangle|^2 \rho(E_f = E_i) \quad (۷۰-۱۳)$$

به این ترتیب، با در نظر گرفتن رابطه‌های (۱۳-۵۰) و (۱۳-۶۸) و عبارت (۱۶-۵۴) برای $\rho(E)$ ، داریم

$$w(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_f) = \frac{\pi}{\hbar} m \sqrt{2mE_i} \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^3 \left| \int d^3r e^{i(\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_f) \cdot \mathbf{r} / \hbar} W(\mathbf{r}) \right|^2 \quad (۷۱-۱۳)$$

در طرف راست این تساوی، تبدیل فوریه پتانسیل $W(\mathbf{r})$ ، که به ازای مقدار $\mathbf{p} = \mathbf{p}_i - \mathbf{p}_f$ محاسبه شده است، دیده می‌شود.

توجه کنید که حالت اولیه $|\mathbf{p}_i\rangle$ که در اینجا انتخاب کرده‌ایم، بهنجاریز نیست، و نمی‌تواند حالت فیزیکی یک ذره را نشان دهد. اما، با وجود اینکه ترم $|\mathbf{p}_i\rangle$ نامتناهی است، طرف راست (۱۳-۷۱) یک مقدار متناهی باقی می‌ماند. بنابراین می‌توانیم به‌طور شهودی انتظار داشته باشیم که نتیجه فیزیکی صحیحی از این رابطه به دست آوریم. اگر احتمال به دست آمده را بر جریان احتمال

$$J_i = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^3 \frac{\hbar k_i}{m} = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^3 \sqrt{2E_i} \quad (۷۲-۱۳)$$

که، طبق رابطه (۱۳-۵۰)، به حالت $|\mathbf{p}_i\rangle$ وابسته است، تقسیم کنیم خواهیم داشت

$$\frac{w(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_f)}{J_i} = \frac{m^3}{4\pi^2\hbar^3} \left| \int d^3r e^{i(\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_f) \cdot \mathbf{r} / \hbar} W(\mathbf{r}) \right|^2 \quad (۷۳-۱۳)$$

که همان عبارت سطح مقطع پراکندگی در تقریب بورن است (بخش ۸-۲-۴ از فصل ۸).
 اگرچه بررسی اخیر دقیق نیست، ولی با استفاده از آن می‌توان نشان داد که سطوح مقطع پراکندگی
 تقریب بورن را با استفاده از قاعده طلایی فرمی، و با یک روش وابسته به زبان، نیز می‌توان به دست آورد.

مراجع برای مطالعه بیشتر

Perturbation series expansion of the evolution operator: Messiah (1.17),
 chap. XVII, §§1 and 2.

Sudden or adiabatic modification of the Hamiltonian: Messiah (1.17),
 chap. XVII, §II; Schiff (1.18), chap. 8, §35.

Diagrammatic representation of a perturbation series (Feynman diagrams):
 Ziman (2.26), chap. 3; Mandl (2.9), chaps. 12 to 14; Bjorken and Drell
 (2.10), chaps. 16 and 17.

۱. برهم‌کنش یک اتم با یک موج الکترومغناطیسی

۱. توضیح نکات کلی بخش ۱۳-۳-۲ از فصل ۱۳، با استفاده از مثال مهم برهم‌کنش یک اتم با یک موج الکترومغناطیسی سینوسی. مفاهیم اساسی همانند قواعد گزینش خط طیفی، جذب و گسیل القایی تابش، قدرت نوسانگر، و... معرفی می‌شوند. با وجود مشکل بودن نسبی، اما به دلیل اهمیت مفاهیم معرفی شده مطالعه آن توصیه می‌شود.

۲. پاسخ خطی و غیرخطی یک سیستم دو ترازوی به یک اختلال سینوسی

۲. مدل ساده‌ای برای مطالعه بعضی اثرهای غیرخطی که در برهم‌کنش یک موج الکترومغناطیسی با یک سیستم اتمی ظاهر می‌شوند (اثرهای اشباع، گذارهای چند کوانتومی و...). از مکمل ۱ فصل ۱۳ (در سطح فوق لیسانس) مشکلتر است. از این رو، توصیه می‌شود که مطالعه آن به مراحل بعدی واگذار شود.

۳. نوسانهای یک سیستم بین دو حالت گسسته تحت تأثیر یک اختلال تشدیدی

۳. مطالعه رفتار یک سیستم با ترازهای انرژی گسسته تحت تأثیر یک اختلال سینوسی، در یک فاصله زمانی طولانی. نتایج بخش ۱۳-۳-۲ از فصل ۱۳ را که فقط برای زمانهای کوتاه معتبرند به طور بسیار دقیقی کامل می‌کند. نسبتاً ساده است.

۴. واپاشی یک حالت گسسته که به طور تشدیدی به پیوستاری از حالت‌های نهایی جفت شده است

۴. مطالعه رفتاری یک حالت گسسته، در یک فاصله زمانی طولانی، که به طور تشدیدی به یک پیوستار از حالت‌های نهایی جفت شده است. نتایج به دست آمده در بخش ۱۳-۳-۳ از فصل ۱۳ (قاعده طلایی فرمی) را که فقط برای فواصل زمانی کوتاه معتبر بودند، به طور بسیار دقیقی کامل می‌کند. ثابت می‌کند که احتمال یافتن ذره در حالت گسسته

به طور نمایی کاهش می‌یابد و مفهوم طول عمرهایی را که در مکمل K_{III} به طور پدیده شناختی معرفی کردیم، توجیه می‌کند. به خاطر کاربردهای متعدد فیزیکی حائز اهمیت است؛ در سطح فوق لیسانس.

۵. تمرینات

۵. تمرین ۱۰ را می‌توانیم در آخر مکمل ۱ از فصل ۱۳ حل کنیم؛ این تمرین یک مطالعه گام به گام از اثر درجات آزادی خارجی یک سیستم مکانیک کوانتومی بر بسامدهای تابش الکترومغناطیسی است که می‌تواند جذب کند (اثر دوپلر، انرژی پس‌زنی اثر موسباؤر).

بعضی تمرینات (بخصوص ۸ و ۹) از تمرینهای مکملهای دیگر مشکلتر است، ولی پدیده‌های فیزیکی مهمی را بررسی می‌کند.

مکمل ۱

برهم‌کنش یک اتم با یک موج الکترومغناطیسی

۱. هامیلتونی برهم‌کنش. قواعد گزینش

الف) میدانها و پتانسیلهای وابسته به یک موج الکترومغناطیسی تخت

ب) هامیلتونی برهم‌کنش در حد شدت کم

ج) هامیلتونی دوقطبی الکتريکی

د) هامیلتونیهای دوقطبی مغناطیسی و چهارقطبی الکتريکی

۲. برانگیختگی غیرتشدیدی. مقایسه با مدل الکترونی که به‌طور کوشسان مقید است

الف) مدل کلاسیک الکترونی که به‌طور کوشسان مقید است

ب) محاسبه مکانیک کوانتومی گشتاور دوقطبی القایی

ج) بحث. قدرت نوسانگر

۳. برانگیختگی تشدیدي. جذب و گسیل القایی

الف) احتمال گذار وابسته به یک موج تکفام

ب) برانگیختگی خط پهن. احتمال گذار در واحد زمان

در بخش ۱۳-۳ از فصل ۱۳، حالت خاص یک اختلال را که به‌طور سینوسی به زمان بستگی دارد مطالعه کردیم: $W(t) = W \sin \omega t$. پدیده تشدیدي را که به هنگام نزدیک بودن ω به یکی از بسامدهای زاویه‌ای بور $\omega_{fi} = (E_f - E_i)/\hbar$ سیستم فیزیکی مورد مطالعه رخ می‌دهد، بررسی کردیم.

یک کاربرد مخصوصاً مهم این نظریه، مطالعه اتمی است که با یک موج تکفام برهم‌کنش می‌کند. در این مکمل، از این مثال برای توضیح نکات کلی فصل ۱۳ و اشاره به بعضی از مفاهیم اساسی فیزیک اتمی مانند قواعد گزینش خط طیفی، جذب و گسیل القایی تابش، قدرت نوسانگر و غیره، استفاده خواهیم کرد.

همانند فصل ۱۳ مطالعه خود را به محاسبات اختلال تا مرتبه اول محدود خواهیم ساخت. بعضی از اثرهای مرتبه بالاتر در برهم‌کنش یک اتم با یک موج الکترومغناطیسی (اثرهای "غیرخطی") را در مکمل ۲ از فصل ۱۳ بررسی خواهیم کرد.

ابتدا (در بخش ۱۳-۱) ساختار هامیلتونی برهم‌کنش بین یک اتم و میدان الکترومغناطیسی را تجزیه و تحلیل خواهیم کرد. این کار به ما امکان خواهد داد تا جملات مربوط به دوقطبی الکتريکی،

دوقطبی مغناطیسی و چهارقطبی الکتریکی را جدا و قواعد گزینش متناظر را مطالعه کنیم. سپس گشتاور دوقطبی الکتریکی القایی توسط یک موج غیرتشدیدی فرودی را محاسبه (بخش ۱۳-۲) و نتایج به دست آمده را با نتایج مدل الکترونی که به طور کوشسان مقید است، مقایسه خواهیم کرد. سرانجام، (بخش ۱۳-۳) فرایندهای جذب و گسیل القایی تابش را که هنگام برانگیختگی تشدیدی یک اتم ظاهر می‌شوند، مورد مطالعه قرار خواهیم داد.

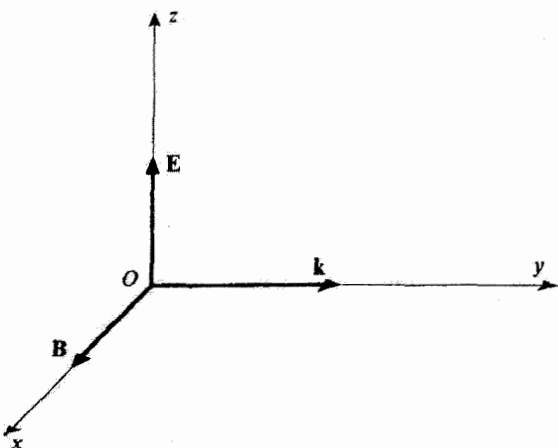
۱. هامیلتونی برهم‌کنش. قواعد گزینش

الف) میدانها و پتانسیلهای وابسته به یک موج الکترومغناطیسی تخت

یک موج الکترومغناطیسی تخت^۱ با بردار موجی \mathbf{k} (موازی با Oy) و بسامد زاویه‌ای $\omega = ck$ را در نظر بگیرید. میدان الکتریکی موج موازی با Oz و میدان مغناطیسی آن موازی با Ox است (شکل ۱).

برای یک چنین موجی، همواره می‌توان، با انتخاب مناسب یک پیمانه (پیوست ۳، بخش ۱۳-۲-۴) پتانسیل نرده‌ای $U(\mathbf{r}, t)$ را صفر کرد. در این صورت، پتانسیل برداری $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ با عبارت حقیقی زیر داده می‌شود

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{A}_0 \mathbf{e}_z e^{i(ky - \omega t)} + \mathcal{A}_0^* \mathbf{e}_z e^{-i(ky - \omega t)} \quad (۱)$$



شکل ۱ میدان الکتریکی \mathbf{E} و میدان مغناطیسی \mathbf{B} یک موج تخت با بردار موجی \mathbf{k} .

۱. برای سهولت در اینجا مطالعه خود را به مورد یک موج تخت محدود خواهیم کرد. اما، نتایج به دست آمده در این مکمل را می‌توان به یک میدان الکترومغناطیسی دلخواه تعمیم داد.

که در آن \mathcal{A}_0 یک ثابت مختلط است که آرگومان آن به انتخاب مبدأ زمان بستگی دارد. در این صورت داریم

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = i\omega\mathcal{A}_0 e_z e^{i(ky-\omega t)} - i\omega\mathcal{A}_0^* e_z e^{-i(ky-\omega t)} \quad (2)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = ik\mathcal{A}_0 e_x e^{i(ky-\omega t)} - ik\mathcal{A}_0^* e_x e^{-i(ky-\omega t)} \quad (3)$$

مبدأ زمان را طوری انتخاب می‌کنیم که ثابت \mathcal{A}_0 موهومی محض شود، و قرار می‌دهیم

$$i\omega\mathcal{A}_0 = \frac{\mathcal{E}}{2} \quad (4\text{-الف})$$

$$ik\mathcal{A}_0 = \frac{\mathcal{B}}{2} \quad (4\text{-ب})$$

که در آن \mathcal{E} و \mathcal{B} دو کمیت حقیقی هستند به گونه‌ای که

$$\frac{\mathcal{E}}{\mathcal{B}} = \frac{\omega}{k} = c \quad (5)$$

در این صورت به دست می‌آوریم

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{E} e_z \cos(ky - \omega t) \quad (6)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{B} e_x \cos(ky - \omega t) \quad (7)$$

بنابراین \mathcal{E} و \mathcal{B} به ترتیب دامنه‌های میدانهای الکتریکی و مغناطیسی موج تخت مورد نظرند. سرانجام بردار پوینتینگ \mathbf{G} ای وابسته به این موج تخت را محاسبه می‌کنیم

$$\mathbf{G} = \epsilon_0 c^2 \mathbf{E} \times \mathbf{B} \quad (8)$$

با قرار دادن \mathbf{E} و \mathbf{B} از روابط (۶) و (۷) در رابطه (۸)، و با گرفتن مقدار متوسط زمانی بر روی تعداد زیادی تناوب، به کمک (۵)، داریم

$$\overline{\mathbf{G}} = \epsilon_0 c \frac{\mathcal{E}^2}{2} e_y \quad (9)$$

ب) هامیلتونی برهم‌کنش در حد شدت کم

موج قبلی با یک الکترون اتمی (به جرم m و بار q) که در فاصله r از O قرار دارد و توسط پتانسیل مرکزی $V(r)$ (حاصل از هسته‌ای که بنا به فرض در O بدون حرکت است) به این نقطه O مقید است، برهم‌کنش می‌کند. هامیلتونی مکانیک کوانتومی این الکترون را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$H = \frac{1}{2m} [\mathbf{P} - q\mathbf{A}(\mathbf{R}, t)]^2 + V(R) - \frac{q}{m} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{R}, t) \quad (10)$$

آخرین جمله رابطه (۱۰) معرف برهم‌کنش گشتاور مغناطیسی اسپین الکترون با میدان مغناطیسی نوسانی موج تخت است. $\mathbf{A}(\mathbf{R}, t)$ و $\mathbf{B}(\mathbf{R}, t)$ عملگرهایی هستند که با قرار دادن مشاهده‌پذیرهای X, Y, Z به جای x, y, z در روابط کلاسیک (۱) و (۳)، به دست می‌آیند.

هنگام بسط جمله با توان دوم در سمت راست معادله (۱۰)، باید، از لحاظ نظری، توجه داشت اصولاً \mathbf{P} در حالت کلی با تابعی از \mathbf{R} جابه‌جا نمی‌شود. اما، یک چنین احتیاطی در مورد حاضر لازم نیست، زیرا، چون \mathbf{A} موازی Oz است [فرمول (۱)]، فقط مؤلفه P_z در حاصلضرب دوگانه وارد می‌شود؛ در این صورت، P_z با مؤلفه Y ام \mathbf{R} ، که تنها مؤلفه‌ای است که در رابطه (۱) مربوط به $\mathbf{A}(\mathbf{R}, t)$ ظاهر می‌شود، جابه‌جا می‌شود و می‌توان نوشت

$$H = H_0 + W(t) \quad (11)$$

که در آن

$$H_0 = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(R) \quad (12)$$

هامیلتونی اتمی است، و

$$W(t) = -\frac{q}{m} \mathbf{P} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}, t) - \frac{q}{m} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{R}, t) + \frac{q^2}{2m} [\mathbf{A}(\mathbf{R}, t)]^2 \quad (13)$$

هامیلتونی برهم‌کنش با موج تخت فرودی است [وقتی \mathcal{A}_0 به سمت صفر میل کند، عناصر ماتریسی $W(t)$ به سمت صفر میل می‌کنند].

دو جمله اول طرف راست (۱۳) به طور خطی و جمله سوم به طور مربعی به \mathcal{A}_0 بستگی دارند. با چشمه‌های نور معمولی، شدت آن قدر ضعیف است که می‌توان از اثر جمله \mathcal{A}_0^2 در مقابل

جمله \mathcal{A} صرف نظر کرد. بنابراین می‌نویسیم

$$W(t) \simeq W_I(t) + W_{II}(t) \quad (14)$$

که در آن

$$W_I(t) = -\frac{q}{m} \mathbf{P} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}, t) \quad (15)$$

$$W_{II}(t) = -\frac{q}{m} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{R}, t) \quad (16)$$

حال، مرتبه‌های بزرگی نسبی عناصر ماتریسی $W_I(t)$ و $W_{II}(t)$ بین دو حالت مقید الکترون را برآورد می‌کنیم. عناصر ماتریسی \mathbf{S} از مرتبه \hbar ، و عناصر ماتریسی \mathbf{B} از مرتبه $k\mathcal{A}$ هستند [فرمول (۳) را ببینید]. بنابراین

$$\frac{W_{II}(t)}{W_I(t)} \simeq \frac{\frac{q}{m} \hbar k \mathcal{A}}{\frac{q}{m} p \mathcal{A}} = \frac{\hbar k}{p} \quad (17)$$

بنا بر روابط عدم قطعیت، \hbar/p حداکثر از مرتبه ابعاد اتمی (که با شعاع بور، $0.5 \text{ \AA} \simeq a_0$ مشخص می‌شود) است. k مساوی $2\pi/\lambda$ است، که در آن λ طول موج وابسته به موج فرودی است. در حوزه‌های طیفی که در فیزیک اتمی به کار می‌بریم (حوزه‌های نوری یا هرتز)، λ بسیار بزرگتر از a_0 است، به طوری که

$$\frac{W_{II}(t)}{W_I(t)} \simeq \frac{a_0}{\lambda} \ll 1 \quad (18)$$

ج) هامیلتونی دوقطبی الکتریکی

۱. تقریب دوقطبی الکتریکی. تعبیر

با استفاده از رابطه (۱) برای $\mathbf{A}(\mathbf{R}, t)$ ، می‌توان $W_I(t)$ را به صورت زیر نوشت

$$W_I(t) = -\frac{q}{m} P_z \left[\mathcal{A}_0 e^{ikY} e^{-i\omega t} + \mathcal{A}_0^* e^{-ikY} e^{i\omega t} \right] \quad (19)$$

با بسط تابع نمایی $e^{\pm ikY}$ برحسب توانهای kY داریم

$$e^{\pm ikY} = 1 \pm ikY - \frac{1}{2} k^2 Y^2 + \dots \quad (20)$$

چون Y از مرتبه ابعاد اتمی است، مثل قبل، داریم

$$kY \simeq \frac{a_0}{\lambda} \ll 1 \quad (21)$$

بنابراین، با حفظ فقط جمله اول بسط (۲۰)، تقریب خوبی برای W_I به دست می آوریم. فرض کنید W_{DE} عملگری باشد که از قرار دادن ۱ به جای $e^{\pm ikY}$ در طرف راست (۱۹) به دست می آید. با استفاده از (۴-الف) خواهیم داشت

$$W_{DE} = \frac{q\mathcal{E}}{m\omega} P_z \sin \omega t \quad (22)$$

$W_{DE}(t)$ "هامیلتونی دوقطبی الکتریکی" نامیده می شود. بنابراین، تقریب دوقطبی الکتریکی که مبتنی بر شرایط (۱۸) و (۲۱) است، عبارت است از چشموشی از $W_{II}(t)$ در مقابل $W_I(t)$ و مساوی گرفتن $W_{DE}(t)$ با $W_I(t)$

$$W(t) \simeq W_{DE}(t) \quad (23)$$

حال، نشان می دهیم که اگر $W(t)$ را با $W_{DE}(t)$ جایگزین کنیم، الکترون طوری نوسان می کند که گویی تحت تأثیر یک میدان الکتریکی سینوسی یکنواخت $\mathcal{E} e_z \cos \omega t$ قرار دارد که دامنه آن همان دامنه میدان الکتریکی موج تخت فرودی در نقطه O است. از لحاظ فیزیکی این بدان معناست که تابع موج الکترون مقید، به قدری در اطراف O جایگزیده است که الکترون نمی تواند تغییرات فضایی میدان الکتریکی موج تخت فرودی را "حس" کند. از این رو، تحول $\langle \mathbf{R} \rangle(t)$ را محاسبه خواهیم کرد. بنا بر قضیه اهرنفتست (فصل ۳، بخش D-۱-d) داریم

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \langle \mathbf{R} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\mathbf{R}, H_0 + W_{DE}] \rangle = \frac{\langle \mathbf{P} \rangle}{m} + \frac{q\mathcal{E}}{m\omega} e_z \sin \omega t \\ \frac{d}{dt} \langle \mathbf{P} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\mathbf{P}, H_0 + W_{DE}] \rangle = -\langle \nabla V(R) \rangle \end{cases} \quad (24)$$

با حذف $\langle \mathbf{P} \rangle$ از این دو معادله، بعد از کمی عملیات ساده، خواهیم داشت

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle \mathbf{R} \rangle = \langle \nabla V(R) \rangle + q\mathcal{E} e_z \cos \omega t \quad (25)$$

که در واقع، همان نتیجه پیش‌بینی شده است: مرکز بسته موج وابسته به الکترون، مانند ذره‌ای به جرم m و بار q حرکت می‌کند. که علاوه بر نیروی مرکزی پیوند اتمی [اولین جمله طرف راست (۲۵)] تحت تأثیر یک میدان الکتریکی یکنواخت [جمله دوم در (۲۵)] نیز قرار دارد.

یادداشت:

رابطه (۲۲) برای هامیلتونی برهم‌کنش دوقطبی الکتریکی، برای ذره‌ای با بار q که با یک میدان الکتریکی یکنواخت $\mathbf{E} = \mathcal{E} \mathbf{e}_z \cos \omega t$ برهم‌کنش می‌کند نسبتاً غیرعادی به نظر می‌رسد. هامیلتونی برهم‌کنش را به صورت زیر می‌نویسیم

$$W'_{DE}(t) = -\mathbf{D} \cdot \mathbf{E} = -q\mathcal{E}Z \cos \omega t \quad (26)$$

که در آن $\mathbf{D} = q\mathbf{R}$ گشتاور دوقطبی الکتریکی وابسته به الکترون است. در واقع، دو عبارت (۲۲) و (۲۶) معادل یکدیگرند. نشان خواهیم داد که می‌توان با یک تبدیل پیمانه‌ای (که محتوای فیزیکی مکانیک کوانتومی را تغییر نمی‌دهد، مکمل H ، فصل ۳، جلد اول، کتاب فارسی) از یکی به دیگری رسید. پیمانه‌ای که برای به‌دست آوردن (۲۲) به‌کار می‌بریم عبارت است از

$$\begin{cases} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{\mathcal{E}}{\omega} \mathbf{e}_z \sin(ky - \omega t) & (27\text{-الف}) \\ U(\mathbf{r}, t) = 0 & (27\text{-ب}) \end{cases}$$

[برای نوشتن رابطه (۲۷-الف)، در رابطه (۱) به جای \mathcal{E} مقدار $\mathcal{E}/\sqrt{2}$ را قرار داده‌ایم، فرمول (۴-الف) را ببینید]. حال تبدیل پیمانه‌ای وابسته به تابع زیر را در نظر بگیرید

$$\chi(\mathbf{r}, t) = z \frac{\mathcal{E}}{\omega} \sin \omega t \quad (28)$$

بنابراین، یک پیمانه جدید $\{\mathbf{A}', U'\}$ را که به صورت زیر مشخص می‌شود، معرفی می‌کنیم

$$\begin{cases} \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla \chi = \mathbf{e}_z \frac{\mathcal{E}}{\omega} [\sin(ky - \omega t) + \sin \omega t] & (29\text{-الف}) \\ U' = U - \frac{\partial \chi}{\partial t} = -z\mathcal{E} \cos \omega t & (29\text{-ب}) \end{cases}$$

تقریب دوقطبی الکتریکی معادل این است که همه جا ky را با 0 جایگزین کنیم. به این ترتیب ملاحظه می‌کنیم که در این تقریب

$$\mathbf{A}' \simeq \mathbf{e}_z \frac{\mathcal{E}}{\omega} [\sin(-\omega t) + \sin \omega t] = 0 \quad (30)$$

به علاوه اگر، مانند بالا، از جملات برهم‌کنش مغناطیسی مربوط به اسپین صرف‌نظر کنیم، برای هامیلتونی

سیستم داریم

$$\begin{aligned}
 H' &= \frac{1}{2m} (\mathbf{P} - q\mathbf{A}')^2 + V(R) + qU'(\mathbf{R}, t) \\
 &= \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(R) + qU'(\mathbf{R}, t) \\
 &= H_0 + W'(t)
 \end{aligned} \tag{۳۱}$$

که در آن H_0 هامیلتونی اتمی است که توسط (۱۲) داده می‌شود و

$$W'(t) = qU'(\mathbf{R}, t) = -qZ\mathcal{E} \cos \omega t = W'_{DE}(t) \tag{۳۲}$$

شکل معمولی (۲۶) هامیلتونی برهم‌کنش دوقطبی الکتریکی است.

یادآور می‌شویم که حالت سیستم وقتی از پیمانه (۲۷) به پیمانه (۲۹) می‌رویم دیگر با همان کت توصیف نمی‌شود (مکمل H، فصل ۳، جلد اول، کتاب فارسی). از این رو، جایگزین کردن $W_{DE}(t)$ با $W'_{DE}(t)$ باید با یک تغییر بردار حالت همراه باشد، که البته، محتوای فیزیکی تغییر نمی‌کند. در بقیه این مکمل، استفاده از پیمانه (۲۷) را ادامه خواهیم داد. ■

۲. عناصر ماتریسی هامیلتونی دوقطبی الکتریکی

بعداً، به عبارتهای عناصر ماتریسی W_{DE} بین $|\varphi_i\rangle$ و $|\varphi_f\rangle$ ، که ویژه‌حالت‌های H_0 با ویژه‌مقدارهای E_f و E_i هستند، احتیاج خواهیم داشت. بر طبق رابطه (۲)، این عناصر ماتریسی را می‌توانیم به صورت زیر بنویسیم

$$\langle \varphi_f | W_{DE}(t) | \varphi_i \rangle = \frac{q\mathcal{E}}{m\omega} \sin \omega t \langle \varphi_f | P_z | \varphi_i \rangle \tag{۳۳}$$

به راحتی می‌توان در طرف راست (۳۳)، عناصر ماتریسی P_z را با عناصر ماتریسی Z جایگزین کرد. مادامی که از تمام اثرهای مغناطیسی در هامیلتونی اتمی صرف‌نظر می‌کنیم [رابطه (۱۲) مربوط به H_0 را ببینید]، می‌توانیم بنویسیم

$$[Z, H_0] = i\hbar \frac{\partial H_0}{\partial P_z} = i\hbar \frac{P_z}{m} \tag{۳۴}$$

که از آن نتیجه می‌شود

$$\begin{aligned}
 \langle \varphi_f | [Z, H_0] | \varphi_i \rangle &= \langle \varphi_f | ZH_0 - H_0 Z | \varphi_i \rangle \\
 &= -(E_f - E_i) \langle \varphi_f | Z | \varphi_i \rangle = \frac{i\hbar}{m} \langle \varphi_f | P_z | \varphi_i \rangle
 \end{aligned} \tag{۳۵}$$

سپس با معرفی بسامد زاویه‌ای بور $\omega_{fi} = (E_f - E_i)/\hbar$ ، به دست می‌آوریم

$$\langle \varphi_f | P_z | \varphi_i \rangle = im \omega_{fi} \langle \varphi_f | Z | \varphi_i \rangle \quad (۳۶)$$

و در نتیجه

$$\langle \varphi_f | W_{DE}(t) | \varphi_i \rangle = iq \frac{\omega_{fi}}{\omega} e^{i\omega t} \sin \omega t \langle \varphi_f | Z | \varphi_i \rangle \quad (۳۷)$$

بنابراین، عناصر ماتریسی $W_{DE}(t)$ با عناصر ماتریسی Z متناسب‌اند.

یادداشت:

علت اینکه عنصر ماتریسی Z در رابطه (۳۷) ظاهر می‌شود آن است که میدان الکتریکی $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ را موازی با Oz انتخاب کرده‌ایم. در عمل ممکن است مجبور شویم که دستگاه مختصات $Oxyz$ را طوری انتخاب کنیم که نه به قطبش نور، بلکه به تقارن حالت‌های $\langle \varphi_i \rangle$ و $\langle \varphi_f \rangle$ مربوط باشد. به‌عنوان مثال، اگر آنها در میدان مغناطیسی یکنواخت \mathbf{B}_0 قرار داشته باشند، مسلماً مناسبترین محور کوانتش برای مطالعه حالت‌های مانای $\langle \varphi_n \rangle$ آنها، محور موازی با \mathbf{B}_0 است. در این صورت، قطبش میدان الکتریکی $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ می‌تواند نسبت به Oz اختیاری باشد. در این مورد، باید در رابطه (۳۷) عنصر ماتریسی Z را با یک ترکیب خطی از عناصر ماتریسی X ، Y ، و Z جایگزین کنیم. ■

۳. قواعد گزینش گذار دوقطبی الکتریکی

اگر عنصر ماتریسی W_{DE} بین حالت‌های $\langle \varphi_i \rangle$ و $\langle \varphi_f \rangle$ مخالف صفر باشد، یعنی، اگر $\langle \varphi_f | Z | \varphi_i \rangle$ ناصفر باشد، گذار $\langle \varphi_f \rangle \rightarrow \langle \varphi_i \rangle$ یک گذار دوقطبی الکتریکی نامیده می‌شود. در این صورت، برای مطالعه گذارهای القایی بین $\langle \varphi_i \rangle$ و $\langle \varphi_f \rangle$ توسط موج فرودی، می‌توانیم $W_{DE}(t)$ را به جای $W(t)$ قرار دهیم. از طرف دیگر، اگر عنصر ماتریسی $W_{DE}(t)$ بین $\langle \varphi_i \rangle$ و $\langle \varphi_f \rangle$ صفر باشد، باید بسط $W(t)$ را بیشتر ادامه دهیم، و گذار حاصل، یا یک گذار دوقطبی مغناطیسی است یا یک انتقال چهارقطبی الکتریکی، و مانند آن^۱ (بخش‌های بعدی). چون $W_{DE}(t)$ خیلی بزرگتر از جملات بعدی بسط رشته‌نمایی $W(t)$ برحسب توانهای a_0/λ است، گذارهای دوقطبی

۱. در واقع کافی است که یکی از سه عدد $\langle \varphi_f | Z | \varphi_i \rangle$ ، $\langle \varphi_f | X | \varphi_i \rangle$ یا $\langle \varphi_f | Y | \varphi_i \rangle$ مخالف صفر باشد (یادداشت بخش ۲ در بالا).

۲. ممکن است حالتی پیش آید که در آن تمام جملات بسط عناصر ماتریسی صفر داشته باشند. در این صورت اصطلاحاً می‌گوییم که گذارها تا تمام مرتبه‌ها ممنوع‌اند (می‌توان نشان داد که اگر $\langle \varphi_i \rangle$ و $\langle \varphi_f \rangle$ هر دو دارای تکانه زاویه‌ای صفر باشند، این حالت همیشه برقرار است).

الکتريکی، شديدترين گذارها خواهند بود. در واقع، اغلب خطوط نوري گسيل شده توسط اتمها، مربوط به گذارهای دوقطبی الکتريکی اند. فرض کنید

$$\begin{cases} \varphi_{n_i, l_i, m_i}(\mathbf{r}) = R_{n_i, l_i}(r) Y_{l_i}^{m_i}(\theta, \varphi) \\ \varphi_{n_f, l_f, m_f}(\mathbf{r}) = R_{n_f, l_f}(r) Y_{l_f}^{m_f}(\theta, \varphi) \end{cases} \quad (38)$$

توابع موج وابسته به حالت‌های $|\varphi_i\rangle$ و $|\varphi_f\rangle$ باشند. چون

$$z = r \cos \theta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_1^0(\theta) \quad (39)$$

عنصر ماتریسی Z بین $|\varphi_i\rangle$ و $|\varphi_f\rangle$ ، با انتگرال زاویه‌ای زیر متناسب است

$$\int d\Omega Y_{l_f}^{m_f}(\theta, \varphi) Y_1^0(\theta) Y_{l_i}^{m_i}(\theta, \varphi) \quad (40)$$

بنابر نتایج مکمل ۳ از فصل ۱۰، این انتگرال فقط وقتی مخالف صفر است که داشته باشیم

$$l_f = l_i \pm 1 \quad (41)$$

و

$$m_f = m_i \quad (42)$$

در واقع کافی است قطبش دیگری از میدان الکتريکی (مثلاً موازی Ox یا Oy ؛ یادداشت بخش ۲ را ببینید) را انتخاب کنیم تا داشته باشیم

$$m_f = m_i \pm 1 \quad (43)$$

از رابطه‌های (۴۱)، (۴۲) و (۴۳)، قواعد گزینش انتقال دوقطبی الکتريکی را به دست می‌آوریم

$\Delta l = l_f - l_i = \pm 1$	(۴۴-الف)
$\Delta m = m_f - m_i = -1, 0, +1$	(۴۴-ب)

یادداشتها:

۱. Z یک عملگر فرد است و می‌تواند فقط دو حالت با پارته‌های مختلف را به هم متصل کند. چون پارته‌های (φ_i) و (φ_f) برابر پارته‌های l_i و l_f اند، باید $\Delta l = l_f - l_i$ فرد باشد، و این چیزی است که با رابطه (۴۴-الف) سازگار است.

۲. اگر جفت‌شدگی اسپین-مدار $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ $\xi(r)$ بین \mathbf{L} و \mathbf{S} وجود داشته باشد (فصل ۱۲، بخش ۱۲-۲-۱-ب-۲)، حالت‌های مانای الکترون را با اعداد کوانتومی l, s, J, m_J (با $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$) مشخص می‌کنیم. قواعد گزینش گذار دوقطبی را می‌توان با جستجوی عناصر ماتریسی غیر صفر \mathbf{R} در پایه $\{|l, s, J, m_J\rangle\}$ به دست آورد. با استفاده از بسط این بردارهای پایه بر روی کتهای $(s, m_s)|l, m\rangle$ (مکمل ۱ از فصل ۱۰، بخش ۱-۲) و از روی روابط (۴۴-الف) و (۴۴-ب)، قواعد گزینش زیر به دست می‌آیند

$$\begin{cases} \Delta J = 0, \pm 1 & \text{(ج-۴۴)} \\ \Delta l = \pm 1 & \text{(د-۴۴)} \\ \Delta m_J = 0, \pm 1 & \text{(ه-۴۴)} \end{cases}$$

توجه کنید که گذار $\Delta J = 0$ ممنوع نیست [مگر اینکه $J_i = J_f = 0$ باشد، به صفحه قبل توجه کنید]. این مطلب از اینجا ناشی می‌شود که J به پارته تراز مربوط نیست. سرانجام، خاطرنشان می‌کنیم که قواعد گزینش (ج-۴۴، د، ه) را می‌توانیم به اتمهای چندالکترونی تعمیم دهیم.

د) هامیلتونیهای دوقطبی مغناطیسی و چهارقطبی الکتریکی

۱. جملات مرتبه‌های بالاتر در هامیلتونی برهم‌کنش هامیلتونی برهم‌کنشی که با رابطه (۱۴) داده می‌شود را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$W(t) = W_I(t) + W_{II}(t) = W_{DE}(t) + [W_I(t) - W_{DE}(t)] + W_{II}(t) \quad (۴۵)$$

تا اینجا، $W_{DE}(t)$ را مطالعه کرده‌ایم. همان طوری که دیدیم، نسبت $[W_I(t) - W_{DE}(t)]$ و $W_{II}(t)$ به $E_{DE}(t)$ از مرتبه a_0/λ است.

برای محاسبه $[W_I(t) - W_{DE}(t)]$ ، کافی است در رابطه (۱۹) به جای $e^{\pm ikY}$ مقدار $e^{\pm ikY} - 1 \simeq \pm ikY$ را قرار دهیم، که در این صورت

$$W_I(t) - W_{DE}(t) = -\frac{q}{m} [ik\mathcal{A}_0 e^{-i\omega t} - ik\mathcal{A}_0^* e^{i\omega t}] P_z Y + \dots \quad (۴۶)$$

یا، با استفاده از رابطه (۴-ب)

$$W_I(t) - W_{DE}(t) = -\frac{q}{m} \mathcal{B} \cos \omega t P_z Y + \dots \quad (۴۷)$$

اگر $P_z Y$ را به صورت زیر بنویسیم

$$P_z Y = \frac{1}{2} (P_z Y - Z P_y) + \frac{1}{2} (P_z Y + Z P_y) = \frac{1}{2} L_x + \frac{1}{2} (P_z Y + Z P_y) \quad (۴۸)$$

سرانجام به دست می‌آوریم

$$W_I(t) - W_{DE}(t) = -\frac{q}{2m} L_x \mathcal{B} \cos \omega t - \frac{q}{2m} \cos \omega t [Y P_z + Z P_z] + \dots \quad (۴۹)$$

در عبارت $W_{II}(t)$ [فرمولهای (۱۶) و (۳)]، کاملاً منطقی است که $e^{\pm ikY}$ را با ۱ جایگزین کنیم. به این ترتیب، جمله‌ای به دست می‌آوریم که نسبت به $W_I(t)$ از مرتبه a_0/λ یعنی از همان مرتبه بزرگی $W_I(t) - W_{DE}(t)$ است

$$W_{II}(t) = -\frac{q}{m} S_x \mathcal{B} \cos \omega t + \dots \quad (۵۰)$$

با قرار دادن رابطه‌های (۴۹) و (۵۰) در (۴۵) و مرتب کردن جملات به صورتی دیگر، به دست می‌آوریم

$$W(t) = W_{DE}(t) + W_{DM}(t) + W_{QE}(t) + \dots \quad (۵۱)$$

که در آن

$$W_{DM} = -\frac{q}{2m} (L_x + 2S_x) \mathcal{B} \cos \omega t \quad (۵۲)$$

$$W_{QE} = -\frac{q}{2mc} (Y P_z + Z P_y) \mathcal{E} \cos \omega t \quad (۵۳)$$

[در رابطه (۵۳) به جای \mathcal{B} مقدار \mathcal{E}/c را قرار داده‌ایم]. W_{QE} و W_{DM} (که از پیش می‌دانیم دارای یک مرتبه بزرگی هستند)، به ترتیب، هامیلتونی دوقطبی مغناطیسی و چهار قطبی الکتریکی هستند.

۲. گذارهای دوقطبی مغناطیسی

گذارهایی که توسط W_{DM} القا می‌شوند، گذارهای دوقطبی مغناطیسی نامیده می‌شوند. W_{DM} معرف برهم‌کنش گشتاور مغناطیسی کل الکترون با میدان مغناطیسی نوسانی موج فرودی است.

قواعد گزینش گذار دوقطبی مغناطیسی را می‌توان با در نظر گرفتن شرایطی که باید توسط $|\varphi_i\rangle$ و $|\varphi_f\rangle$ برآورده شوند تا W_{DM} دارای یک عنصر ماتریسی غیر صفر بین این دو حالت باشد، به دست آورد. چون نه L_x و نه S_x هیچ‌کدام عدد کوانتومی l را تغییر نمی‌دهند، قبل از هر چیز باید داشته باشیم $\Delta l = 0$. از طرفی، L_x ویژه‌مقدار L_z یعنی m_L را به اندازه ± 1 تغییر می‌دهد و از این رو $\Delta m_L = \pm 1$. از طرف دیگر S_x ویژه‌مقدار S_z یعنی m_S را به میزان ± 1 تغییر می‌دهند، بنابراین $\Delta m_S = \pm 1$. به علاوه، توجه کنید که اگر میدان مغناطیسی موج فرودی موازی با Oz بود، به دست می‌آوردیم $\Delta m_L = 0$ و $\Delta m_S = 0$. با دسته‌بندی این نتایج، قواعد گزینش گذار دوقطبی مغناطیسی را به دست می‌آوریم

$$\begin{cases} \Delta l = 0 \\ \Delta m_L = \pm 1, 0 \\ \Delta m_S = \pm 1, 0 \end{cases} \quad (54)$$

یادداشت:

ویژه‌حالت‌های H_0 ، در حضور یک جفت‌شدگی اسپین-مدار، را با اعداد کوانتومی l و J مشخص می‌کنیم. چون L_x و S_x با J^2 جابه‌جا نمی‌شوند، W_{DE} می‌تواند حالت‌های با l یکسان ولی J ی مختلف را به هم متصل کند. با استفاده از فرمول‌های جمع مربوط به یک تکانه زاویه‌ای l و یک تکانه زاویه‌ای $1/2$ (مکمل 1 از فصل ۱۰، بخش $(10-2)$)، به راحتی می‌توان نشان داد که قواعد گزینش (۵۴) به صورت زیر در می‌آیند

$$\begin{cases} \Delta l = 0 \\ \Delta J = \pm 1, 0 \\ \Delta m_J = \pm 1, 0 \end{cases} \quad (55)$$

توجه کنید که گذار فوق ریز $F = 1 \leftrightarrow F = 0$ حالت پایه اتم هیدروژن (فصل ۱۲، بخش ۱۲-۴ را ببینید) یک گذار دوقطبی مغناطیسی است، زیرا مؤلفه‌های S دارای عناصر ماتریسی غیر صفر بین حالت‌های تراز $F = 1$ و حالت $\{F = 0, m_F = 0\}$ می‌باشند.

۳. گذارهای چهارقطبی الکتریکی
با استفاده از رابطه (۳۴) می‌توانیم بنویسیم

$$\begin{aligned} YP_z + ZP_y &= YP_z + P_yZ = \frac{m}{i\hbar} \{Y[Z, H_0] + [Y, H_0]Z\} \\ &= \frac{m}{i\hbar} (YZH_0 - H_0YZ) \end{aligned} \quad (56)$$

که از آن، نظیر رابطه (۳۶)، به‌دست می‌آوریم

$$\langle \varphi_f | W_{QE}(t) | \varphi_i \rangle = \frac{q}{\sqrt{ic}} \omega_{fi} \langle \varphi_f | YZ | \varphi_i \rangle e^{i\omega t} \cos \omega t \quad (57)$$

بنابراین، عنصر ماتریسی $W_{DE}(t)$ با عناصر ماتریسی YZ ، که یک مؤلفه گشتاور چهارقطبی الکتریکی اتم است (مکمل ۵ از فصل ۱۰)، متناسب است. به‌علاوه، کمیت زیر در رابطه (۵۷) ظاهر می‌شود

$$\frac{q\omega_{fi}}{c} e^{i\omega t} = q \frac{\omega_{fi}}{\omega} \frac{\omega}{c} e^{i\omega t} = q \frac{\omega_{fi}}{\omega} k e^{i\omega t} \quad (58)$$

که بنا بر رابطه (۲)، از مرتبه $q\partial\mathcal{E}_z/\partial y$ است. بنابراین، $W_{QE}(t)$ را می‌توان به‌عنوان برهم‌کنش گشتاور چهارقطبی الکتریکی اتم با گرادیان^۱ میدان الکتریکی موج تخت، تعبیر کرد. برای به‌دست آوردن قواعد گزینش گذار چهارقطبی الکتریکی، کافی است توجه کنیم که، در نمایش $\{r\}$ ، YZ یک ترکیب خطی از $r^2 Y_1^1(\theta, \varphi)$ و $r^2 Y_1^{-1}(\theta, \varphi)$ است. بنابراین، در عنصر ماتریسی $\langle \varphi_f | YZ | \varphi_i \rangle$ ، انتگرالهای زاویه‌ای زیر ظاهر می‌شوند

$$\int d\Omega Y_{l_f}^{m_f}(\theta, \varphi) Y_1^{\pm 1}(\theta, \varphi) Y_{l_i}^{m_i}(\theta, \varphi) \quad (59)$$

که بنا بر نتایج مکمل ۳ از فصل ۱۰، تنها وقتی مخالف صفرند که $\Delta l = 0, \pm 2$ و $\Delta m = \pm 1$ باشد. رابطه اخیر، وقتی قطبش دلخواهی از موج فرودی را در نظر بگیریم، به‌صورت $\Delta m = \pm 2, \pm 1, 0$ در می‌آید (یادداشت بخش ۱۳-ج-۲ را ببینید)، و قواعد گزینش گذار چهارقطبی الکتریکی را می‌توانیم نهایتاً به‌صورت زیر بنویسیم

$$\begin{cases} \Delta l = 0, \pm 2 \\ \Delta m = 0, \pm 1, \pm 2 \end{cases} \quad (60)$$

۱. طبیعی است که گرادیان میدان الکتریکی ظاهر شود، زیرا $W_{QE}(t)$ با بسط پتانسیل به‌صورت رشته تیلور در مجاورت O ، به‌دست آمده است.

یادداشتها:

۱. W_{DM} و W_{QE} عملگرهای زوج‌اند و از این رو می‌توانند فقط حالت‌های با پارامترهای مساوی را به هم وصل کنند، که با روابط (۵۴) و (۶۰) سازگار است. برای یک گذار مفروض، W_{DM} و W_{QE} هرگز با W_{DE} در رقابت نیستند. این مطلب، مشاهده گذارهای دوقطبی مغناطیسی و چهارقطبی الکتریکی را آسان می‌کند.
- اغلب گذارهایی که در حوزه امواج میکروموج یا امواج بسامد رادیویی رخ می‌دهد، بخصوص، گذارهای تشدید مغناطیسی (مکمل ۶ از فصل ۴)، گذارهای دوقطبی مغناطیسی هستند.
۲. برای گذار $\Delta l = 0, \pm 1, \Delta m = 0$ ، دو عملگر W_{DM} و W_{QE} به‌طور هم‌زمان دارای عناصر ماتریسی غیر صفرند. اما، می‌توان شرایطی تجربی پیدا کرد که در آن، فقط گذارهای دوقطبی مغناطیسی القا شوند. آنچه لازم است انجام دهیم این است که اتم را به‌جای اینکه در مسیر یک موج تخت قرار دهیم، آن را در داخل یک کاواک یا حلقه‌های بسامد رادیویی، جایی که در آن B بزرگ ولی گرادیان E قابل چشمپوشی است، بگذاریم.
۳. برای گذار $\Delta l = 2$ ، W_{DM} نمی‌تواند با W_{QE} در رقابت باشد، و ما یک گذار چهارقطبی محض داریم. به‌عنوان یک مثال از گذار چهارقطبی، می‌توانیم خط سبز اکسیژن اتمی (5577\AA)، که در طیف شفق شمالی ظاهر می‌شود، را نام ببریم.
۴. اگر بسط $e^{\pm iky}$ را تا جملات بیشتری ادامه دهیم، جملات هشت‌قطبی الکتریکی و چهارقطبی مغناطیسی و غیره را خواهیم یافت.

در بقیه این مکمل، مطالعه خود را به گذارهای دوقطبی الکتریکی محدود خواهیم کرد. از طرف دیگر، در مکمل بعدی، ۲ از فصل ۱۳، یک گذار دوقطبی مغناطیسی را بررسی خواهیم کرد.

۲. برانگیختگی غیرتشدید

مقایسه با مدل الکترونی که به‌طور کشسان مقید است

در این بخش فرض خواهیم کرد که اتمی که ابتدا در حالت پایه (φ_0) قرار دارد، توسط یک موج تخت غیرتشدید برانگیخته شده باشد: w بر هیچ‌کدام از بسامدهای زاویه‌ای بور وابسته به گذارها از (φ_0) ، منطبق نیست.

تحت تأثیر این برانگیختگی، اتم یک گشتاور دوقطبی الکتریکی $\langle D \rangle(t)$ به‌دست می‌آورد که با بسامد زاویه‌ای w (نوسان واداشته) نوسان می‌کند و وقتی \mathcal{E} کوچک است با \mathcal{E} متناسب است (پاسخ خطی). برای محاسبه این گشتاور دوقطبی القایی از نظریه اختلال استفاده می‌کنیم و نشان می‌دهیم که نتایج حاصل، به نتایج حاصل از مدل کلاسیک الکترونی که به‌طور کشسان مقید است،

بسیار نزدیک است.

این مدل، در مطالعهٔ خواص نوری مواد، نقش بسیار مهمی ایفا کرده است. به کمک آن می‌توانیم قطبش القاشده توسط موج فرودی در ماده را محاسبه کنیم. این قطبش، که به‌طور خطی به میدان \mathcal{E} بستگی دارد، مانند یک جملهٔ مربوط به چشمه در معادلات ماکسول رفتار می‌کند. وقتی این معادلات را حل می‌کنیم، امواج تختی پیدا می‌کنیم که با سرعتی متفاوت با c در ماده منتشر می‌شوند. به این ترتیب، می‌توانیم ضریب شکست ماده را برحسب مشخصات مختلف الکترونیایی که به‌طور کثشان مقیدند (بسامدهای طبیعی، تعداد در واحد حجم، و غیره) محاسبه کنیم. بنابراین، ملاحظه می‌شود که مقایسهٔ پیشگوییهای این مدل (که در بخش ۱۳-۲-الف آن را مرور خواهیم کرد) با پیشگوییهای مکانیک کوانتومی، بسیار مهم است.

الف) مدل کلاسیک الکترونی که به‌طور کثشان مقید است

۱. معادلهٔ حرکت

الکترونی را در نظر بگیرید که تحت یک نیروی بازگرداننده، که جهت آن به سمت O و متناسب با تغییر مکان است، قرار دارد. به این ترتیب، در هامیلتونی کلاسیک متناظر با رابطه (۱۲)، داریم

$$V(r) = \frac{1}{2} m \omega_0^2 r^2 \quad (61)$$

که در آن، ω_0 بسامد زاویه‌ای طبیعی الکترون است.

اگر، با استفاده از هامیلتونی برهم‌کنش کلاسیک، همان تقریبهایی را که به کمک آنها توانستیم رابطه (۲۲) را برای $W_{DE}(t)$ در مکانیک کوانتومی به‌دست آوریم (تقریب دوقطبی الکتریکی) به‌کار ببریم، محاسبه‌ای نظیر محاسبهٔ بخش ۱۳-ج-۱ [معادله (۲۵)]، معادلهٔ حرکت زیر را می‌دهد

$$\frac{d^2 z}{dt^2} + \omega_0^2 z = \frac{q\mathcal{E}}{m} \cos \omega t \quad (62)$$

این معادله، معادلهٔ نوسانگر هماهنگی است که تحت یک نیروی سینوسی قرار دارد.

۲. جواب عمومی

جواب عمومی معادله (۶۲) را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$z = A \cos(\omega_0 t - \varphi) + \frac{q\mathcal{E}}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} \cos \omega t \quad (63)$$

که در آن A و φ ثابت‌های حقیقی‌اند که به شرایط اولیه بستگی دارند. جمله اول (۶۳)، $A \cos(\omega_0 t - \varphi)$ ، معرف جواب عمومی معادله بدون طرف ثانی است (حرکت آزاد الکترون). جمله دوم، یک جواب خصوصی از معادله با طرف ثانی است (حرکت واداشته الکترون).

تاکنون میرایی را به حساب نیاورده‌ایم. بدون وارد شدن در جزئیات محاسبه اثرها میرایی ضعیف را ذکر می‌کنیم: میرایی پس از زمان معین τ باعث ناپدیدشدن حرکت طبیعی می‌شود و حرکت واداشته را به مقدار بسیار ناچیزی تغییر می‌دهد (به شرط اینکه از تشدید بسیار دور باشیم $|\omega - \omega_0| \gg 1/\tau$). بنابراین، فقط جمله دوم (۶۳) را نگه خواهیم داشت

$$z = \frac{q \mathcal{E} \cos \omega t}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} \quad (64)$$

یادداشت:

برعکس تشدید، سازوکار دقیق میرایی، در صورتی که ضعیف باشد، از اهمیت کمی برخوردار است. از این رو، مسئله توصیف دقیق میرایی را چه در مکانیک کوانتومی و چه در مکانیک کلاسیک مورد بررسی قرار نخواهیم داد. صرفاً از این واقعیت که میرایی وجود دارد، استفاده خواهیم کرد تا از حرکت آزاد الکترون چشمپوشی کنیم.

در مورد برانگیختگی تشدید و وضعیت کاملاً فرق می‌کند: در این حالت، گشتاور دوقطبی القایی، شدیداً به سازوکار دقیق میرایی بستگی دارد (گسیل خودبه‌خودی، واهلش گرمایی، و غیره). به همین دلیل در بخش ۱۳-۳، $\langle D \rangle(t)$ (مورد برانگیختگی تشدید) را محاسبه خواهیم کرد و فقط به محاسبه احتمالات گذار خواهیم پرداخت.

در مکمل ۲ از فصل ۱۳، یک مدل خاص از سیستمی را که تحت تأثیر یک موج الکترومغناطیسی، و در عین حال، تحت فرایندهای اتلافی واقع است، مطالعه خواهیم کرد (معادلات بلاخ سیستم چنداسپینی).
■ آنگاه خواهیم توانست گشتاور دوقطبی القایی را برای هر بسامد برانگیزنده‌ای محاسبه کنیم.

۳. پذیرفتاری

فرض کنید $qz = \mathcal{D}$ گشتاور دوقطبی الکتريکی سیستم باشد. بنابر رابطه (۶۴)، داریم

$$\mathcal{D} = qz = \frac{q^2}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} \mathcal{E} \cos \omega t = \chi \mathcal{E} \cos \omega t \quad (65)$$

که در آن "پذیرفتاری" χ با رابطه زیر داده می‌شود

$$\chi = \frac{q^2}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} \quad (66)$$

ب) محاسبه مکانیک کوانتومی گشتاور دوقطبی القایی

ابتدا بردار حالت $|\psi(t)\rangle$ اتم در لحظه t را، تا مرتبه اول نسبت به \mathcal{E} ، محاسبه می‌کنیم. برای هامیلتونی برهم‌کنش، هامیلتونی دوقطبی الکتریکی، W_{DE} ، را که توسط (۲۲) داده می‌شود، انتخاب خواهیم کرد. علاوه بر این، فرض خواهیم کرد که

$$|\psi(t=0)\rangle = |\varphi_0\rangle \quad (67)$$

نتایج بخش ۱۳-۳-۱ از فصل ۱۳ را، با قرار دادن $\langle \varphi_n | P_z | \varphi_i \rangle$ به جای $q\mathcal{E}/m\omega$ و W_{ni} و $|\varphi_0\rangle$ به جای $|\varphi_i\rangle$ ، به کار می‌بریم. به این ترتیب، به دست می‌آوریم^۱

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iE_0 t/\hbar} |\varphi_0\rangle + \sum_{n \neq 0} \lambda b_n^{(1)}(t) e^{-iE_n t/\hbar} |\varphi_n\rangle \quad (68)$$

یا، با استفاده از فرمول ۱۳-۳۴ از فصل ۱۳ و ضرب کردن $|\psi(t)\rangle$ در ضریب فاز کلی $e^{iE_0 t/\hbar}$ ، که هیچ اهمیت فیزیکی ندارد، داریم

$$|\psi(t)\rangle = |\varphi_0\rangle + \sum_{n \neq 0} \frac{q\mathcal{E}}{2im\hbar\omega} \langle \varphi_n | P_z | \varphi_0 \rangle \times \left\{ \frac{e^{-i\omega_n t} - e^{i\omega t}}{\omega_n + \omega} - \frac{e^{-i\omega_n t} - e^{-i\omega t}}{\omega_n - \omega} \right\} |\varphi_n\rangle \quad (69)$$

از این رابطه، $|\psi(t)\rangle$ و $\langle \psi(t) | qZ | \psi(t) \rangle = \langle D_z \rangle(t)$ را پیدا می‌کنیم. در محاسبه این مقدار متوسط، فقط جمله‌های خطی بر حسب \mathcal{E} را نگه می‌داریم و از تمام جملاتی که با بسامدهای زاویه‌ای $\pm\omega_n$ نوسان می‌کنند (حرکت طبیعی، که اگر میرایی ضعیف را به حساب آوریم، ناپدید می‌شود) صرف‌نظر می‌کنیم. بالاخره، پس از جایگزینی $\langle \varphi_n | P_z | \varphi_0 \rangle$ با عبارت آن بر حسب $\langle \varphi_n | Z | \varphi_0 \rangle$ [معادله (۳۶)]، به دست می‌آوریم

$$\langle D_z \rangle(t) = \frac{2q^2}{\hbar} \mathcal{E} \cos \omega t \sum_n \frac{\omega_{n0} |\langle \varphi_n | Z | \varphi_0 \rangle|^2}{\omega_{n0}^2 - \omega^2} \quad (70)$$

۱. چون W_{DE} فرد است، $\langle \varphi_0 | W_{DE}(t) | \varphi_0 \rangle$ صفر است. بنابراین $b_0^{(1)}(t) = 0$.

ج) بحث. قدرت نوسانگر

 ۱. مفهوم قدرت نوسانگر
 قرار می‌دهیم

$$f_{n_0} = \frac{2m\omega_{n_0} |\langle \varphi_n | Z | \varphi_0 \rangle|^2}{\hbar} \quad (71)$$

f_{n_0} یک عدد حقیقی بدون بُعد و مشخصه گذار $|\varphi_n\rangle \leftrightarrow |\varphi_0\rangle$ است که قدرت نوسانگر این گذار نامیده می‌شود. اگر $|\varphi_0\rangle$ حالت پایه باشد، f_{n_0} مانند ω_{n_0} مثبت است. قدرتهای نوسانگر قاعده جمع زیر (قاعده جمع توماس-ریش-کوهن) را برآورده می‌کنند

$$\sum_n f_{n_0} = 1 \quad (72)$$

این مطلب را می‌توان به صورت زیر اثبات کرد. با استفاده از (۳۶)، می‌توان نوشت

$$f_{n_0} = \frac{1}{i\hbar} \langle \varphi_0 | Z | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | P_z | \varphi_0 \rangle - \frac{1}{i\hbar} \langle \varphi_0 | P_z | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | Z | \varphi_0 \rangle \quad (73)$$

جمع‌بندی بر روی n را می‌توان با استفاده از رابطه بستاری مربوط به پایه $\{|\varphi_n\rangle\}$ انجام داد، و به رابطه زیر رسید

$$\sum_n f_{n_0} = \frac{1}{i\hbar} \langle \varphi_0 | [ZP_z - P_z Z] | \varphi_0 \rangle = \langle \varphi_0 | \dot{x} | \varphi_0 \rangle = 1 \quad (74)$$

۲. توجیه مکانیک کوانتومی برای مدل الکترونی که به طور کشسان مقید است
 تعریف (۷۱) را در رابطه (۷۰) قرار می‌دهیم و عبارت حاصل را در تعداد \mathcal{N} اتمهای موجود در حجمی که ابعاد خطی آن از طول موج λ تابش بسیار کوچکتر است، ضرب می‌کنیم. به این ترتیب، گشتاور دوقطبی الکتریکی کل القاشده در این حجم را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\mathcal{N} \langle D_z \rangle(t) = \sum_n \mathcal{N} f_{n_0} \frac{q^2}{m(\omega_{n_0}^2 - \omega^2)} \mathcal{E} \cos \omega t \quad (75)$$

با مقایسه روابط (۷۵) و (۶۵)، مشاهده می‌کنیم که گویی \mathcal{N} نوسانگر کلاسیک داریم [زیرا بنا به رابطه (۷۲)، $\sum_n \mathcal{N} f_{n_0} = \mathcal{N}$] که بسامدهای زاویه‌ای طبیعی آنها همه برابر نیستند، زیرا عملگر Z به این دلیل در (۷۱) وارد می‌شود که موج فرودی در امتداد Oz قطبیده خطی است. اما، این امکان وجود دارد که، مستقن از قطبش موج فرودی، یک تعریف عام از قدرت نوسانگر به دست بدهیم.

این بسامدها با بسامدهای زاویه‌ای مختلف بور اتم که وابسته به گذارهایی از (φ_0) هستند، برابرند. بنا بر رابطه (۷۵) کسری از نوسانگرها که دارای بسامد زاویه‌ای ω_{fi} هستند، عبارت است از f_{fi} . از این رو، برای یک موج غیرتشدیدی، مدل کلاسیک الکترونی که به طور کثسان مقید است را توجیه کرده‌ایم. مکانیک کوانتومی، بسامدهای نوسانگرهای مختلف و کسری از نوسانگرها را که دارای یک بسامد مفروض هستند، به دست می‌دهد. این نتیجه، اهمیت مفهوم قدرت نوسانگر را که نشان می‌دهد و این امکان را فراهم می‌سازد که ما، به طریق استقرای، به اهمیت فراوان مدل الکترونی که به طور کثسان مقید است، در مطالعه خواص نوری مواد پی ببریم.

۳. برانگیختگی تشدیدی. جذب و گسیل القایی

الف) احتمال گذار وابسته به یک موج تکفام

اتمی را در نظر بگیرید که ابتدا در حالت (φ_i) است و تحت تأثیر یک موج الکترومغناطیسی که بسامد زاویه‌ای آن نزدیک به بسامد زاویه‌ای بور ω_{fi} است، قرار می‌گیرد.

نتایج بخش ۱۳-۳-۱ از فصل ۱۳ (برانگیختگی سینوسی) را می‌توانیم مستقیماً بر محاسبه احتمال گذار $\mathcal{P}_{if}(t; \omega)$ اعمال کنیم. با استفاده از رابطه (۳۷) (یا، با استفاده از تقریب دو قطبی الکترونیکی) داریم

$$\mathcal{P}_{if}(t; \omega) = \frac{q^2}{4\hbar^2} \left(\frac{\omega_{fi}}{\omega} \right)^2 |\langle \varphi_f | Z | \varphi_i \rangle|^2 \mathcal{E}^2 F(t, \omega - \omega_{fi}) \quad (76)$$

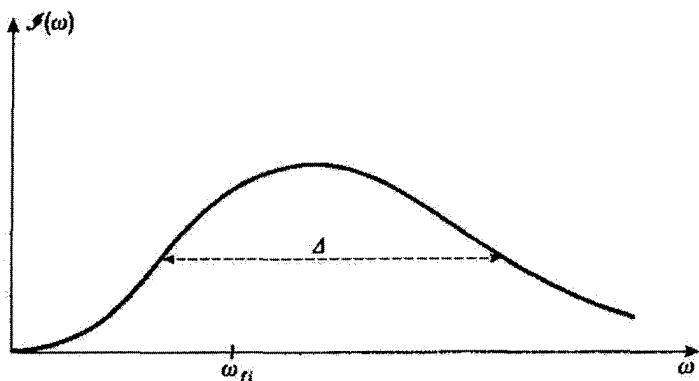
که در آن

$$F(t, \omega - \omega_{fi}) = \left\{ \frac{\sin[(\omega_{fi} - \omega)t/2]}{(\omega_{fi} - \omega)/2} \right\}^2 \quad (77)$$

ماهیت تشدیدی $\mathcal{P}_{if}(t; \omega)$ را قبلاً در فصل ۱۳ مورد بحث قرار داده‌ایم. در تشدید، $\mathcal{P}_{if}(t; \omega)$ با \mathcal{E}^2 ، یعنی با شار فرودی انرژی الکترومغناطیسی، متناسب است [فرمول (۹)].

ب) برانگیختگی خط پهن. احتمال گذار در واحد زمان

در عمل، تابشی که به اتم برخورد می‌کند، اغلب غیر تکفام است. شار فرودی انرژی الکترومغناطیسی در واحد سطح و در بازه $[\omega, \omega + d\omega]$ را با $\mathcal{E}(\omega) d\omega$ نمایش می‌دهیم. تغییرات $\mathcal{E}(\omega)$ نسبت به ω در شکل ۲ نشان داده شده است. Δ پهنای خط برانگیخته است. اگر Δ نامتناهی باشد می‌گوییم که با یک "طیف سفید" سروکار داریم.



شکل ۲ توزیع طیفی شار فرودی انرژی الکترومغناطیسی در واحد سطح. Δ پهنای این توزیع طیفی است.

امواج تکفام مختلفی که تابش فرودی را تشکیل می‌دهند عموماً غیرهمدوس‌اند: آنها هیچ رابطه فازی کاملاً معینی ندارند. بنابراین، احتمال کل گذار \mathcal{P}_{if} را می‌توان با جمع کردن احتمالات گذار وابسته به هر یک از این امواج تکفام، به دست آورد. در نتیجه، باید در رابطه (۷۶) به جای \mathcal{E}^2 مقدار $\int \mathcal{J}(\omega) d\omega / \epsilon_0 c$ را قرار دهیم [فرمول (۹)] و روی ω انتگرال بگیریم. حاصل می‌شود

$$\mathcal{P}_{if}(t) = \frac{q^2}{4\epsilon_0 c \hbar^2} |\langle \varphi_f | Z | \varphi_i \rangle|^2 \times \int d\omega \left(\frac{\omega_{fi}}{\omega} \right)^2 \mathcal{J}(\omega) F(t, \omega - \omega_{fi}) \quad (78)$$

سپس می‌توانیم مانند بخش ۱۳-۳-۳ از فصل ۱۳ ادامه دهیم تا انتگرالی را که در (۷۸) ظاهر می‌شود، برآورد کنیم. در مقایسه با تابعی از ω که پهنای آن خیلی بزرگتر از $4\pi/t$ است، تابع $F(t, \omega - \omega_{fi})$ (شکل ۱۳-۳ از فصل ۱۳ را ببینید) مانند $\delta(\omega - \omega_{fi})$ رفتار می‌کند. اگر t آن قدر بزرگ باشد که $4\pi/t \ll \Delta$ (پهنای خط برانگیخته است) و در عین حال آن قدر کوچک بماند که بررسی به روش اختلال معتبر باشد، می‌توان در رابطه (۷۸)، فرض کرد که

$$F(t, \omega - \omega_{fi}) \simeq 2\pi t \delta(\omega - \omega_{fi}) \quad (79)$$

که نتیجه می‌دهد

$$\overline{\mathcal{P}}_{if}(t) = \frac{\pi q^2}{\varepsilon_0 c \hbar^2} |\langle \varphi_f | Z | \varphi_i \rangle|^2 \mathcal{J}(\omega_{fi}) t \quad (۸۰)$$

رابطه (۸۰) را می‌توانیم به صورت زیر بنویسیم

$$\overline{\mathcal{P}}_{if}(t) = C_{if} \mathcal{J}(\omega_{fi}) t \quad (۸۱)$$

که در آن

$$C_{if} = \frac{2\pi^2}{\hbar} |\langle \varphi_f | Z | \varphi_i \rangle|^2 \alpha \quad (۸۲)$$

و α ثابت ساختار ریز است

$$\alpha = \frac{q^2}{2\pi\varepsilon_0} \frac{1}{\hbar c} = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137} \quad (۸۳)$$

این نتیجه نشان می‌دهد که $\overline{\mathcal{P}}_{if}(t)$ به‌طور خطی با زمان افزایش می‌یابد. بنابراین، احتمال گذار در واحد زمان، \mathcal{W}_{if} ، برابر است با

$$\mathcal{W}_{if} = C_{if} \mathcal{J}(\omega_{fi}) \quad (۸۴)$$

\mathcal{W}_{if} ، با مقدار شدت فرودی مربوط به بسامد تشدید ω_{fi} ، با ثابت ساختار ریز α ، و با مربع قدرمطلق عنصر ماتریسی Z ، که [توسط رابطه (۷۱)] به قدرت نوسانگر گذار $|\varphi_i\rangle \leftrightarrow |\varphi_f\rangle$ مربوط می‌شود، متناسب است.

در این مکمل، موردی از تابش را بررسی کرده‌ایم که در امتداد یک جهت معین منتشر می‌شود و در یک حالت قطبش کاملاً معین قرار دارد. با معادل‌گیری ضرایب C_{if} بر روی تمام جهات انتشار و بر روی تمام حالت‌های قطبش ممکن، می‌توان ضرایب B_{if} را، همانند ضرایب C_{if} ، که مبین احتمالات گذار در واحد زمان برای یک اتم واقع در تابش همسانگردند، معرفی کرد. ضرایب B_{if} (و B_{fi}) همان ضرایب معرفی شده توسط اینشتین برای توصیف جذب (و گسیل القایی) هستند. از این رو، مشاهده می‌کنیم که چگونه مکانیک کوانتومی، محاسبه این ضرایب را ممکن می‌سازد.

یادداشت:

ضریب سوم A_{ν} ، توسط اینشتین برای توصیف گسیل خودبه‌خودی یک فوتون که به هنگام برگشتن اتم از حالت بالاتر (ψ_2) به حالت پایتتر (ψ_1) پدید می‌آید، معرفی شده است. نظریهٔ ارائه‌شده در این مکمل، گسیل خودبه‌خودی را توضیح نمی‌دهد. در غیاب تابش فرودی، هامیلتونی برهم‌کنش صفر است و ویژه‌حالت‌های H_0 (که در این حالت، هامیلتونی کل است)، حالت‌های مانا هستند.

در واقع، مدل قبلی نارساست زیرا سیستم اتمی (که کوانتیده است) و میدان الکترومغناطیسی (که آن را کلاسیک در نظر می‌گیریم) را به‌طور نامتقارن بررسی می‌کند. وقتی هر دو سیستم را کوانتومی می‌کنیم، درمی‌یابیم که، حتی در غیاب فوتونهای فرودی، جفت‌شدگی بین اتم و میدان الکترومغناطیسی هنوز هم آثار قابل مشاهده‌ای دارد (یک تعبیر ساده از این اثرها در مکمل ۱۰ از فصل ۵ آمده است). ویژه‌حالت‌های H_0 دیگر حالت‌های مانا نیستند، زیرا H_0 دیگر هامیلتونی سیستم کل نیست، و می‌توان، در واقع، احتمال گسیل خودبه‌خودی یک فوتون در واحد زمان را محاسبه کرد. از این رو مکانیک کوانتومی، محاسبهٔ ضرایب A_{ν} ی اینشتین را نیز ممکن می‌سازد.

مراجع برای مطالعهٔ بیشتر

Schiff (1.18), chap. 11; Bethe and Jackiw (1.21), Part II, chaps. 10 and 11; Bohm (5.1), chap. 18, §§12 to 44.

برای مدل الکترونی که به‌طور کشسان مقید است

Berkeley 3 (7.1), supplementary topic 9; Feynman I (6.3), chap. 31 and Feynman II (7.2), chap. 32.

برای ضرایب اینشتین:

The original article (1.31), Cagnac and Pebay-Peyroula (11.2), chap. III and chap. XIX, §4.

برای تعریف دقیق قدرت نوسانگر:

Sobel'man (11.12), chap. 9, §31.

برای تابش چندقطبی اتمی و قواعد گزینش آن:

Sobel'man (11.12), chap. 9, §32.

مکمل ۲

پاسخ خطی و غیرخطی یک سیستم دو ترازوی به یک اختلال سینوسی

۱. توصیف مدل

الف) معادلات بلاخ برای یک سیستم با اسپینهای $1/2$ در برهم‌کنش با یک میدان بسامد

رادویبی

ب) چند مورد دقیقاً و تقریباً قابل حل

ج) واکنش یک سیستم اتمی

۲. حل تقریبی معادلات بلاخ برای سیستم

الف) معادلات اختلال

ب) بسط جواب برحسب سری فوریه

ج) ساختار عمومی جواب

۳. بحث

الف) جواب مرتبه صفرام: رقابت بین دمش و واهلش

ب) جواب مرتبه اول: واکنش خطی

ج) جواب مرتبه دوم: گسیل القایی و جذب

د) جواب مرتبه سوم: آثار اشباع و گذارهای چند کوانتومی

۴. تمرینات: کاربردهای این مکمل

در مکمل قبل، نظریه اختلال وابسته به زمان مرتبه اول را برای بررسی بعضی آثار ناشی از برهم‌کنش یک سیستم اتمی و یک موج الکترومغناطیسی به‌کار بردیم: پیدایش یک گشتاور دوقطبی القایی، فرایندهای گسیل و جذب القایی، و غیره.

حال، مثال ساده‌ای را در نظر می‌گیریم که در آن می‌توان، بدون مشکلات زیاد، محاسبات اختلال را تا مرتبه‌های بالاتر ادامه داد. این مثال، به ما امکان خواهد داد تا بعضی اثرهای "غیرخطی" جالب را نشان دهیم: اثرهای اشباع، پذیرفتاری غیرخطی، گسیل القایی و جذب چند فوتون، و مانند آن. علاوه بر این، مدلی که توصیف خواهیم کرد، (به‌طور پدیده‌شناختی) جفت‌شدگی اتلافی سیستم اتمی را با محیط اطرافش (فرایند واهلش) در نظر می‌گیرد. این باعث می‌شود که بتوانیم

نتایج مربوط به "واکنش خطی" به دست آمده در مکمل قبل را تکمیل کنیم. به عنوان مثال، گشتاور دوقطبی القایی آتم را نه تنها دور از تشدید، بلکه در تشدید نیز محاسبه خواهیم کرد.

بعضی از اثرهایی را که می‌خواهیم توصیف کنیم، در حال حاضر موضوع بسیاری از تحقیقات هستند. مطالعه آنها مستلزم میدانهای الکترومغناطیسی بسیار قوی است. تنها اخیراً (از زمان ابداع لیز به بعد) توانسته‌ایم چنین میدانهایی را ایجاد کنیم. به این ترتیب، شاخه‌های تحقیقاتی نوینی همانند الکترونیک کوانتومی، اپتیک غیرخطی، و مانند آنها پیدا شده‌اند. روشهای محاسبه‌ای که در این مکمل (برای یک مدل بسیار ساده) توصیف می‌کنیم، در مورد این مسائل کاربرد دارند.

۱. توصیف مدل

الف) معادلات بلاخ برای یک سیستم با اسپینهای $1/2$ در برهم‌کنش با یک میدان بسامد رادیویی

به سیستمی که در بخش ۴-۴ الف از مکمل ۶ فصل ۴ توصیف کردیم، برمی‌گردیم؛ سیستمی با اسپینهای $1/2$ واقع در میدان ایستای B_0 موازی با Oz ، که با یک میدان بسامد رادیویی برهم‌کنش می‌کند و تحت فرایندهای "دمش" و "واهلش" قرار دارد.

اگر $\mathcal{M}(t)$ مغناطش کل سیستم اسپینی موجود در محفظه باشد (شکل ۶ از مکمل ۶ فصل ۴) نشان دادیم که

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

جمله اول طرف راست آمادگی، یا "دمش" سیستم را بیان می‌کند: تعداد n اسپین در واحد زمان وارد محفظه می‌شوند که هر کدام دارای مغناطش اولیه μ_0 موازی با Oz هستند. جمله دوم ناشی از فرایند واهلش است، که با زمان متوسط T_R لازم برای اینکه یک اسپین محفظه را ترک کند یا جهت آن بر اثر برخورد با دیواره‌ها تغییر کند مشخص می‌شود. سرانجام، جمله آخر در (۱) مربوط به حرکت تقدیمی اسپینها حول میدان مغناطیسی کل

$$B(t) = B_0 e_z + B_1(t) \quad (2)$$

است. $B(t)$ عبارت است از مجموع یک میدان ایستا $B_0 e_z$ موازی Oz و یک میدان بسامد رادیویی $B_1(t)$ با بسامد زاویه‌ای ω .

یادداشتها:

۱. گذارهایی را که در این مکمل مطالعه خواهیم کرد (که دو حالت $(+)$ و $(-)$ ی هر اسپین $1/2$ را به هم مربوط می‌کنند) گذارهای دوقطبی مغناطیسی هستند.

۲. این سؤال مطرح می‌شود که چرا به جای استفاده از معادله شرویدینگر، از رابطه (۱) مربوط به مقادیر متوسط استفاده کرده‌ایم. دلیل این کار این است که ما در حال مطالعه یک مجموعه آماری از اسپین‌هایی هستیم که (از طریق برخورد با دیواره‌های محفظه) به یک حمام گرمایی جفت شده است. ما نمی‌توانیم این مجموعه را برحسب یک بردار حالت توصیف کنیم: باید از یک عملگر چگالی استفاده کنیم (مکمل ۵ را ببینید). معادله حرکت این عملگر، را "معادله مادر" می‌گویند، و می‌توانیم نشان دهیم که این معادله دقیقاً هم‌ارز رابطه (۱) است. (مکمل ۶ از فصل ۴، بخش‌های ۳-۴ و ۴-۴ و مکمل ۵ از فصل ۴، که در آنها نشان می‌دهیم که مقدار متوسط مغناطش، ماتریس چگالی یک مجموعه از اسپین‌های $1/2$ را تعیین می‌کند).

در واقع، معادله مادر که توسط عملگر چگالی و معادله شرویدینگر (بخش ۱۳-۳-۱ از فصل ۱۳) برآورده می‌شود دارای همان ساختار معادله (۱) است: یک معادله دیفرانسیل خطی با ضرایب ثابت یا ضرایبی که به‌طور سینوسی تغییر می‌کنند. از این‌رو، روشهای تقریبی‌ای که در این فصل توصیف می‌کنیم در مورد هر کدام از این معادلات به‌کار می‌رود. ■

ب) چند مورد دقیقاً و تقریباً قابل حل

اگر میدان بسامد رادیویی $B_1(t)$ چرخان باشد، یعنی اگر

$$B_1(t) = B_1(e_x \cos \omega t + e_y \sin \omega t) \quad (3)$$

معادله (۱) را می‌توان به‌طور دقیق حل کرد [تغییر دستگاه مختصات به دستگاه مختصاتی که با B_1 دوران می‌کند، معادله (۱) را به یک دستگاه معادله دیفرانسیل خطی مستقل از زمان تبدیل می‌کند]. حل دقیق معادله (۱) متناظر با چنین وضعیتی در بخش ۴-۴-ب از مکمل ۶ از فصل ۴ آمده است.

در اینجا، فرض می‌کنیم که B_1 در امتداد Oz قطبیده خطی باشد

$$B_1(t) = B_1 e_x \cos \omega t \quad (4)$$

در این مورد، نمی‌توان^۱ یک حل تحلیلی دقیق از معادله (۱) به دست آورد (هیچ تبدیلی وجود ندارد که معادل تبدیل به یک دستگاه چرخان باشد). اما، خواهیم دید که می‌توان جوابی به صورت یک بسط نمایی از توانهای B_1 پیدا کرد.

یادداشت:

محاسباتی را که در اینجا برای اسپینهای $1/2$ ارائه خواهیم داد، می‌توانیم در مورد وضعیتهای دیگری که در آنها مطالعه خود را به دو تراز از سیستم محدود می‌کنیم و از بقیه چشم می‌پوشیم نیز به کار ببریم. می‌دانیم که (مکمل ۳ از فصل ۴) می‌توان به هر سیستم دو ترازوی، یک اسپین مجازی $1/2$ نسبت داد. از این رو، مسئله‌ای که در اینجا مطرح است عبارت است از یک سیستم دو ترازوی دلخواه که تحت یک اختلال سینوسی قرار گرفته است. ■

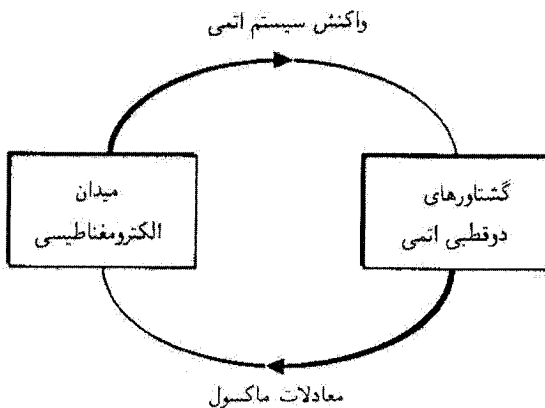
ج) واکنش یک سیستم اتمی

مجموعه جملاتی که، در M_x, M_y, M_z به B_1 بستگی دارند، "واکنش" اتم نسبت به اختلال الکترومغناطیسی را تشکیل می‌دهند. این جملات، معرف گشتاور دوقطبی مغناطیسی القا شده توسط میدان بسامد رادیویی، در سیستم اسپین هستند. خواهیم دید که یک چنین گشتاور دوقطبی لزوماً متناسب با B_1 نیست؛ جملات موجود در B_1 معرف واکنش خطی، و جملات دیگر (جملات موجود در B_1^2, B_1^3, \dots) معرف "واکنش غیرخطی" هستند. به علاوه، خواهیم دید که گشتاور دوقطبی القایی نه تنها در بسامد زاویه‌ای ω ، بلکه در هماهنگیهای مختلف ω آن ($p = 0, 2, 3, 4, \dots$) نیز نوسان خواهد کرد.

به سادگی می‌توان مشاهده کرد که چرا محاسبه واکنش یک سیستم اتمی برای ما جالب است. چنین محاسبه‌ای بخش مهمی از نظریه انتشار یک موج الکترومغناطیسی در یک ماده یا نظریه نوسانگرهای اتمی، "میزرها" یا "لیزرها" را تشکیل می‌دهد.

یک میدان الکترومغناطیسی را در نظر بگیرید. به علت جفت‌شدگی بین این میدان و سیستم اتمی، یک قطبش در ماده ظاهر می‌شود، که ناشی از گشتاورهای دوقطبی اتمی (پیکان به طرف راست در شکل ۱) است. این قطبش، مانند یک جمله چشمه‌ای در معادلات ماکسول عمل می‌کند و در ایجاد میدان الکترومغناطیسی سهیم است (پیکان به طرف چپ در شکل ۱). وقتی "حلقه را می‌بندیم"، یعنی، وقتی

۱. میدان قطبیده خطی حاصل از برهم‌نهی یک مؤلفه دایره‌ای راست و یک مؤلفه دایره‌ای چپ است. می‌توان یک جواب دقیق برای هر کدام از این مؤلفه‌ها که به طور جداگانه در نظر گرفته می‌شوند، پیدا کرد. اما، معادله (۱) خطی نیست، به این معنا که یک جواب متناظر (۴) را نمی‌توان از برهم‌نهی دو جواب دقیق، یکی متناظر با (۳) و دیگری متناظر با میدان چرخان در جهت مخالف، به دست آورد [در جمله $\mathcal{M} \times \mathbf{B}$ ، γ که در طرف راست (۱) ظاهر می‌شود، \mathcal{M} به B_1 بستگی دارد].



شکل ۱ نمایش طرح‌وار محاسباتی که باید در مطالعه انتشار یک موج الکترومغناطیسی در ماده (با عمل یک نوسانگر اتمی، لیزر یا میزرا) انجام داد؛ ابتدا از محاسبه گشتاورهای دوقطبی القایی توسط یک موج الکترومغناطیسی معین در ماده شروع می‌کنیم (واکنش سیستم اتمی). قطبش متناظر مانند یک جمله چشمه‌ای در معادلات ماکسول عمل و در ایجاد میدان الکترومغناطیسی شرکت می‌کند. پس میدان به دست آمده را مساوی میدانی که با آن شروع کردیم می‌گیریم.

میدانی را که به این ترتیب ایجاد شده است مساوی با میدانی که با آن شروع کردیم می‌گیریم، معادلات انتشار موج در ماده (ضریب شکست) یا معادلات نوسانگرها را به دست می‌آوریم (در غیاب میدانهای خارجی، در صورتی که تقویت کافی باشد، ممکن است یک میدان الکترومغناطیسی در ماده ظاهر شود؛ در این صورت سیستم ناپایدار می‌شود و می‌تواند خودبه‌خود نوسان کند). در این مکمل، فقط به اولین مرحله محاسبه (واکنش اتمی) خواهیم پرداخت.

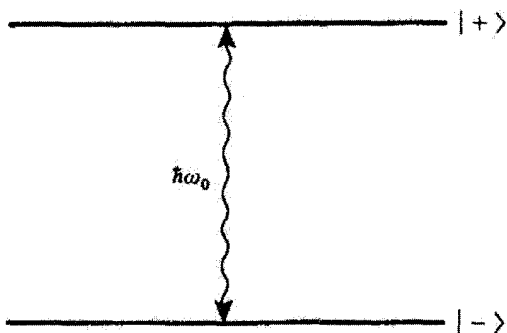
۲. حل تقریبی معادلات بلاخ برای سیستم

الف) معادلات اختلال

مانند مکمل ۶ از فصل ۴ قرار می‌دهیم

$$\begin{cases} \omega_0 = -\gamma B_0 & (5) \\ \omega_1 = -\gamma B_1 & (6) \end{cases}$$

که در آن $\hbar\omega_0$ معرف اختلاف انرژی حالت‌های اسپینی (+) و (-) است (شکل ۲). با قرار دادن (۴) در (۲) و (۲) در (۱)، پس از یک محاسبه ساده، داریم



شکل ۲ ترازهای انرژی یک اسپین ۱/۲ در میدان مغناطیسی ایستای B_0 ؛ ω_0 بسامد زاویه‌ای لارمور در میدان B_0 است.

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} M_z = n\mu_0 - \frac{M_z}{T_R} + i\frac{\omega_1}{\gamma} \cos \omega t (M_- - M_+) & \text{(الف-۷)} \\ \frac{d}{dt} M_{\pm} = -\frac{M_{\pm}}{T_R} \pm i\omega_0 M_{\pm} \mp i\omega_1 \cos \omega t M_z & \text{(ب-۷)} \end{cases}$$

که در آن

$$M_{\pm} = M_x \pm iM_y \quad (A)$$

توجه کنید که جمله چشمه‌ای $n\mu_0$ فقط در معادله حرکت M_z وجود دارد، زیرا μ_0 موازی Oz است، و دمش را دمش طولی می‌نامیم. همچنین خاطر نشان می‌سازیم که زمان واهلش می‌تواند برای مؤلفه‌های طولی (M_z) و مؤلفه‌های عرضی (M_{\pm}) مغناطیس، متفاوت باشد. در اینجا، برای سهولت یک زمان واهلش منفرد انتخاب خواهیم کرد.

معادلات (الف-۷) و (ب-۷)، که "معادلات بلاخ" نامیده می‌شوند، را نمی‌توانیم به‌طور دقیق حل کنیم. از این رو، جواب آنها را به صورت یک بسط سری نمایی برحسب ω_1 تعیین خواهیم کرد

$$\begin{cases} M_z = {}^{(0)}M_z + \omega_1 {}^{(1)}M_z + \omega_1^2 {}^{(2)}M_z + \dots + \omega_1^n {}^{(n)}M_z + \dots & \text{(الف-۹)} \\ M_{\pm} = {}^{(0)}M_{\pm} + \omega_1 {}^{(1)}M_{\pm} + \omega_1^2 {}^{(2)}M_{\pm} + \dots + \omega_1^n {}^{(n)}M_{\pm} + \dots & \text{(ب-۹)} \end{cases}$$

۱. در بعضی آزمایشها، دمش "عرضی" است (μ_0 عمود بر B_0 است). تمرین ۱ آخرین مکمل را ببینید.

با قرار دادن (۹-الف) و (۹-ب) در (۷-الف) و (۷-ب)، و مساوی قرار دادن ضرایب جملات n^0 ، معادلات اختلال زیر را به دست می آوریم

$$n = 0$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt} {}^{(0)}M_z = n\mu_0 - \frac{\lambda}{T_R} {}^{(0)}M_z \quad (10\text{-الف}) \\ \frac{d}{dt} {}^{(0)}M_{\pm} = -\frac{\lambda}{T_R} {}^{(0)}M_{\pm} \pm i\omega_0 {}^{(0)}M_{\pm} \quad (10\text{-ب}) \end{array} \right.$$

$$n \neq 0$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt} {}^{(n)}M_z = -\frac{\lambda}{T_R} {}^{(n)}M_z + \frac{i}{\nu} \cos \omega t [{}^{(n-1)}M_- - {}^{(n-1)}M_+] \quad (11\text{-الف}) \\ \frac{d}{dt} {}^{(n)}M_{\pm} = -\frac{\lambda}{T_R} {}^{(n)}M_{\pm} \pm i\omega_0 {}^{(n)}M_{\pm} \mp i \cos \omega t {}^{(n-1)}M_z \quad (11\text{-ب}) \end{array} \right.$$

ب) بسط جواب برحسب سری فوریه

چون تنها جملات وابسته به زمان در طرف راست (۱۰) و (۱۱) جملات سینوسی هستند، جواب حالت پایای (۱۰) و (۱۱) تناوبی است و زمان تناوب آن برابر $2\pi/\omega$ است. می توانیم آن را برحسب سری فوریه بسط دهیم

$$\left\{ \begin{array}{l} {}^{(n)}M_z = \sum_{p=-\infty}^{+\infty} {}^{(n)}M_z^{(p)} e^{ip\omega t} \quad (12\text{-الف}) \\ {}^{(n)}M_{\pm} = \sum_{p=-\infty}^{+\infty} {}^{(n)}M_{\pm}^{(p)} e^{ip\omega t} \quad (12\text{-ب}) \end{array} \right.$$

که در آن ${}^{(n)}M_z^{(p)}$ و ${}^{(n)}M_{\pm}^{(p)}$ معرف تعداد pn مؤلفه فوریه جواب مرتبه n اند. اگر ${}^{(n)}M_z$ را حقیقی و ${}^{(n)}M_{\pm}$ و ${}^{(n)}M_{\mp}$ را مزدوج مختلط یکدیگر در نظر بگیریم، شرایط حقیقی بودن زیر را به دست می آوریم

$$\left\{ \begin{array}{l} {}^{(n)}M_z^{(p)} = [{}^{(n)}_{-p}M_z]^{*} \quad (13\text{-الف}) \\ {}^{(n)}M_{\pm}^{(p)} = [{}^{(n)}_{-p}M_{\mp}]^{*} \quad (13\text{-ب}) \end{array} \right.$$

با قرار دادن (۱۲-الف) و (۱۲-ب) در (۱۰) و (۱۱)، و مساوى صفر قرار دادن ضريب هر تابع نمايى $e^{ip\omega t}$ ، به دست مى آوريم

$$n = 0$$

$$\begin{cases} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \mathcal{M}_z = n \mu_0 T_R \\ \begin{pmatrix} 0 \\ p \end{pmatrix} \cdot \mathcal{M}_z = 0 & \text{اگر } p \neq 0 \text{ باشد} \\ \begin{pmatrix} 0 \\ p \end{pmatrix} \cdot \mathcal{M}_{\pm} = 0 & \text{برای تمام } p \text{ ها} \end{cases} \quad (۱۴)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(ip\omega + \frac{1}{T_R} \right) \begin{pmatrix} n \\ p \end{pmatrix} \cdot \mathcal{M}_z = \frac{i}{\varphi} \left[\begin{pmatrix} n-1 \\ p+1 \end{pmatrix} \cdot \mathcal{M}_- + \begin{pmatrix} n-1 \\ p-1 \end{pmatrix} \cdot \mathcal{M}_- - \begin{pmatrix} n-1 \\ p+1 \end{pmatrix} \cdot \mathcal{M}_+ - \begin{pmatrix} n-1 \\ p-1 \end{pmatrix} \cdot \mathcal{M}_+ \right] \\ \left[i(p\omega \mp \omega_0) \frac{1}{T_R} \right] \begin{pmatrix} n \\ p \end{pmatrix} \cdot \mathcal{M}_{\pm} = \mp \frac{i}{\varphi} \left[\begin{pmatrix} n-1 \\ p+1 \end{pmatrix} \cdot \mathcal{M}_z + \begin{pmatrix} n-1 \\ p-1 \end{pmatrix} \cdot \mathcal{M}_z \right] \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (۱۵-الف) \\ (۱۵-ب) \end{array}$$

این معادلات جبرى را مى توان به راحتی حل کرد

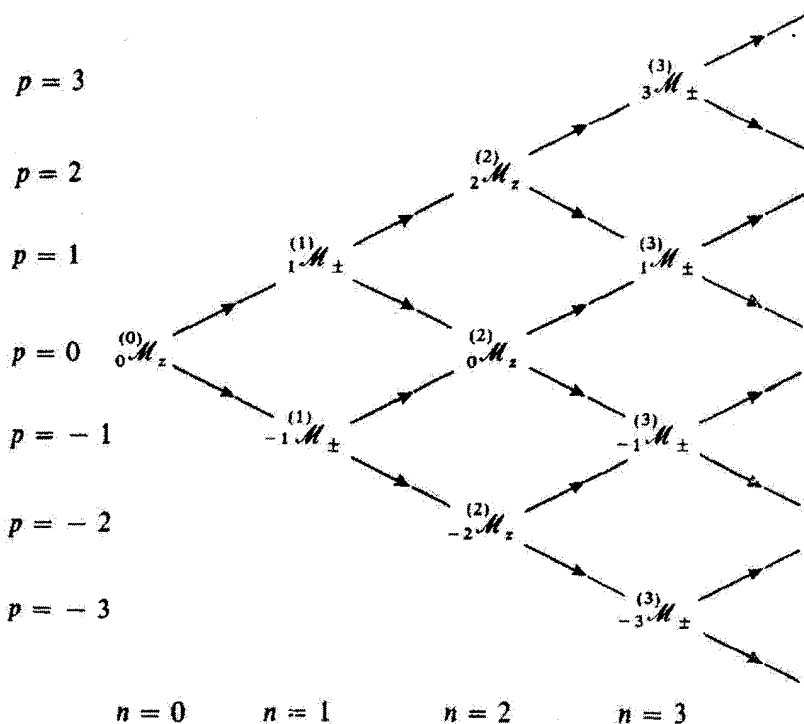
$$\left\{ \begin{array}{l} \begin{pmatrix} n \\ p \end{pmatrix} \cdot \mathcal{M}_z = \frac{i}{\varphi \left(ip\omega + \frac{1}{T_R} \right)} \left[\begin{pmatrix} n-1 \\ p+1 \end{pmatrix} \cdot \mathcal{M}_- + \begin{pmatrix} n-1 \\ p-1 \end{pmatrix} \cdot \mathcal{M}_- - \begin{pmatrix} n-1 \\ p+1 \end{pmatrix} \cdot \mathcal{M}_+ - \begin{pmatrix} n-1 \\ p-1 \end{pmatrix} \cdot \mathcal{M}_+ \right] \\ \begin{pmatrix} n \\ p \end{pmatrix} \cdot \mathcal{M}_{\pm} = \pm \frac{i}{\varphi \left[i(p\omega \pm \omega_0) + \frac{1}{T_R} \right]} \left[\begin{pmatrix} n-1 \\ p+1 \end{pmatrix} \cdot \mathcal{M}_z + \begin{pmatrix} n-1 \\ p-1 \end{pmatrix} \cdot \mathcal{M}_z \right] \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (۱۶-الف) \\ (۱۶-ب) \end{array}$$

از این رو، روابط (۱۶) به طور صریح جواب مرتبه n ام را برحسب جواب مرتبه $(n-1)$ ام مى دهند. چون جواب مرتبه صفرام معلوم است [معادلات (۱۴) را ببینید]، مسئله، از دیدگاه نظرى، کاملاً حل شده است.

ج) ساختار عمومى جواب

مى توان جملات مختلف بسط جواب را در جدولی با دو ورودی مرتب کرد که در آن مرتبه اختلال n معرف ستونها، و درجه p هماهنگ ωp ى مورد نظر، معرف سطرها باشد. تا مرتبه صفر، فقط $\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \mathcal{M}_z$ مخالف صفر است. مى توانيم، با استفاده از رابطه (۱۶) و روش تکرار، ساير جملات غیر صفر مرتبه های بالاتر را نتیجه گیری کنیم (جدول ۱). و به این ترتیب یک "ساختار درخت مانند"

جدول ۱ جدول دوجورودی که مؤلفه‌های فوریه M_z مغناطش را که تا اختلال مرتبه m نسبت به ω_1 غیر صفرند نشان می‌دهد.



به دست می‌آوریم. خواص زیر را می‌توان مستقیماً، با استفاده از رابطه (۱۶) و به طریق بازگشت به دست آورد.

۱. در مرتبه‌های زوج اختلال فقط مغناطش طولی، و در مرتبه‌های فرد، تنها مغناطش عرضی تغییر می‌کند.

۲. در مرتبه‌های زوج اختلال، تنها هماهنگیهای زوج و در مرتبه‌های فرد، فقط هماهنگیهای فرد وارد می‌شوند.

۳. برای هر مقدار m ، مقداری از p که باید نگه‌داشته شوند عبارت‌اند از $m - 2, m - 4, \dots, -m, -m + 2$.

یادداشت:

این ساختار فقط برای یک قطبش خاص از میدان بسامد رادیویی $B_1(t)$ (عمود بر B_0) معتبر است. جدولهای مشابهی را می‌توان برای سایر قطبشهای بسامد رادیویی رسم کرد. ■

۳. بحث

حال نتایج محاسبه قبل را، تا مرتبه سوم، تعبیر می‌کنیم.

الف) جواب مرتبه صفرام: رقابت بین دمش و واهلش

بنابر رابطه (۱۴)، تنها مؤلفه مرتبه صفر غیر صفر عبارت است از

$$({}^{\circ})M_z = n\mu_0 T_R \quad (۱۷)$$

بنابراین، در نبود میدانهای بسامد رادیویی فقط یک مغناطش طولی ایستا ($p = 0$) وجود دارد. چون M_z با اختلاف جمعیت حالت‌های (+) و (-)، که در شکل ۲ نشان داده‌ایم، متناسب است (مکمل ۶ را ببینید)، می‌توان گفت که دمش باعث نابرابری جمعیت‌های این دو حالت می‌شود.

هرچه تعداد ذراتی که وارد محفظه می‌شوند بیشتر (یعنی هر چه دمش مؤثرتر باشد) و T_R طولانیتر باشد (یعنی هر چه واهلش کندتر باشد)، $({}^{\circ})M_z$ بزرگتر خواهد بود. بنابراین، جواب مرتبه صفرام (۱۷)، تعادل دینامیکی حاصل از رقابت بین فرایندهای دمش و واهلش را توصیف می‌کند. از این پس، برای ساده کردن نمادگذاری، قرار خواهیم داد

$$M_0 = ({}^{\circ})M_z \quad (۱۸-الف)$$

$$\Gamma_R = \frac{1}{T_R} \quad (۱۸-ب)$$

ب) جواب مرتبه اول: واکنش خطی

تا مرتبه اول، فقط مغناطش عرضی M_{\perp} مخالف صفر است. چون $M_+ = M_-^*$ است، کافی است M_+ را مطالعه کنیم.

۱. حرکت مغناطش عرضی

بنابر جدول ۱، به‌ازای $n = 1$ داریم $p = \pm 1$. با قرار دادن $n = 1$ و $p = \pm 1$ در (۱۶-ب)، و استفاده از رابطه (۱۸)، به‌دست می‌آید

$$\begin{cases} ({}^{(1)}_{+})M_+ = \frac{M_0}{2} \frac{1}{\omega_0 - \omega + i\Gamma_R} & (۱۹-الف) \\ ({}^{(1)}_{-})M_+ = \frac{M_0}{2} \frac{1}{\omega_0 + \omega + i\Gamma_R} & (۱۹-ب) \end{cases}$$

با قرار دادن این عبارات در رابطه (۱۲-ب) و سپس در (۹-ب)، M_+ تا مرتبه اول نسبت به ω به دست می‌آید

$$M_+ = \omega_1 \frac{M_0}{2} \left[\frac{e^{i\omega t}}{\omega_0 - \omega + i\Gamma_R} + \frac{e^{-i\omega t}}{\omega_0 + \omega + i\Gamma_R} \right] \quad (20)$$

نقطه معرف M_+ همان حرکتی را در صفحه مختلط توصیف می‌کند که تصویر M_+ بر دایره M_+ در صفحه عمود بر B_0 . این حرکت بنابر رابطه (۲۰)، از ترکیب دو حرکت دایره‌ای نتیجه می‌شود که سرعت زاویه‌ای آنها یکسان و یکی از آنها دایره‌ای راست (جمله $e^{i\omega t}$) و دیگری دایره‌ای چپ (جمله $e^{-i\omega t}$) است. بنابراین، حرکت برآیند در حالت کلی، بیضی شکل است.

۲. وجود دو تشدید

حرکت دایره‌ای راست به ازای $\omega = \omega_0$ و حرکت دایره‌ای چپ به ازای $\omega = -\omega_0$ ، یک دامنهٔ پیشینه دارند. بنابراین، M_+ دو تشدید را نشان می‌دهد (در حالی که برای یک میدان چرخان، یک تشدید منفرد وجود داشت؛ مکمل ۶ از فصل ۴ را ببینید). تعبیر این پدیده به صورت زیر است: میدان بسامد رادیویی خطی می‌تواند به دو میدان دایره‌ای چپ و راست تجزیه شود، که هر یک از آنها یک تشدید القا می‌کند؛ چون جهت‌های دوران مخالف یکدیگرند، میدانهای ایستای B_0 که برای آنها تشدیدها ظاهر می‌شوند، مختلف‌الجهت خواهند بود.

۳. پذیرفتاری خطی

در نزدیکی یک تشدید (به عنوان مثال $\omega \simeq \omega_0$) می‌توان در رابطه (۲۰) از جمله غیر تشدیدی صرف نظر کرد. در این صورت داریم

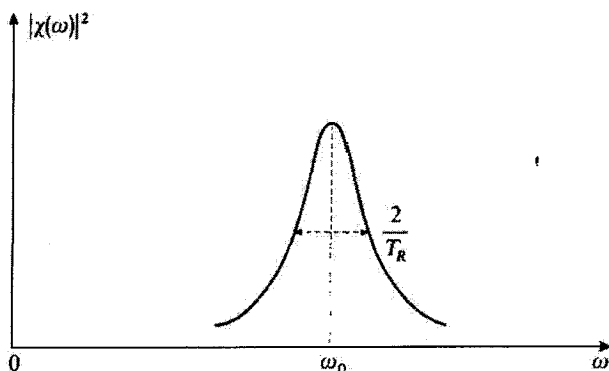
$$M_+ \simeq_{\omega \simeq \omega_0} \omega_1 \frac{M_0}{2} \frac{e^{i\omega t}}{\omega_0 - \omega + i\Gamma_R} \quad (21)$$

بنابراین، M_+ متناسب است با مؤلفهٔ چرخان میدان بسامد رادیویی در راستای متناظر با تشدید، که در اینجا $B_0 e^{i\omega t} / 2$ است.

نسبت M_+ به این مؤلفه، پذیرفتاری خطی $\chi(\omega)$ نامیده می‌شود

$$\chi(\omega) = -\gamma M_0 \frac{1}{\omega_0 - \omega + i\Gamma_R} \quad (22)$$

به علت وجود یک اختلاف فاز بین M_+ و مؤلفهٔ چرخان میدان بسامد رادیویی که عامل تشدید است، $\chi(\omega)$ یک پذیرفتاری مختلط است.



شکل ۳ تغییرات مربع قدرمطلق $|\chi(\omega)|^2$ پذیرفتاری خطی سیستم اسپین نسبت به ω . یک تشدید به پهنای $2/T_R$ ، به مرکز $\omega = \omega_0$ ظاهر می‌شود.

مربع قدرمطلق $\chi(\omega)$ در نزدیکی $\omega = \omega_0$ (شکل ۳)، و روی یک بازه به پهنای زیر دارای شکل تشدیدی کلاسیک است

$$\Delta\omega = 2\Gamma_R = \frac{2}{T_R} \quad (23)$$

بنابراین، هر چه زمان واهلش T_R طولانیتر باشد، منحنی تشدید تیزتر خواهد بود. از این پس، فرض خواهیم کرد که دو تشدید $\omega = \omega_0$ و $\omega = -\omega_0$ کاملاً از هم جدا هستند، یعنی

$$\frac{\omega}{\Gamma_R} = \omega T_R \gg 1 \quad (24)$$

در عبور از تشدید، اختلاف فاز از 0 تا $\pm\pi$ تغییر می‌کند و مقدار آن در تشدید برابر $\pm\pi/2$ است؛ این زمانی است که \mathcal{M}_x و مولفه چرخان، دارای اختلاف فاز $\pi/2$ هستند که در این صورت کار جفت نیروی واردشده توسط میدان بر \mathcal{M}_x ، بیشینه است. علامت این کار به علامت \mathcal{M}_0 ، یعنی به علامت \mathcal{M}_0 بستگی دارد؛ این علامت بسته به اینکه حالت‌های اسپین ذرات فرودی (+) یا (-) باشند فرق می‌کند. در یک مورد (که اسپینها در تراز پایین هستند)، این کار توسط میدان تأمین، و انرژی از میدان به اسپینها منتقل می‌شود (جذب). در مورد مخالف (که ذرات در تراز بالا هستند)، کار منفی است، و انرژی از اسپینها به میدان منتقل می‌شود (گسیل القایی). وضعیت اخیر در تقویت‌کننده‌های اتمی و نوسانگرهای اتمی (میزرها و لیزرها) رخ می‌دهد.

(ج) جواب مرتبه دوم؛ گسیل القایی و جذب

تا مرتبه دوم، بنابر جدول ۱، فقط $M_z^{(2)}$ و $M_z^{(2)\pm}$ غیر صفرند. ابتدا $M_z^{(2)}$ ، یعنی، اختلاف جمعیت ایستا بین حالت‌های $|+\rangle$ و $|-\rangle$ را تا مرتبه دوم مطالعه می‌کنیم. سپس $M_z^{(2)\pm}$ ، یعنی تولید هماهنگ دوم را بررسی خواهیم کرد.

۱. تغییر اختلاف جمعیت بین دو حالت سیستم

$M_z^{(2)}$ ، نتیجه به دست آمده تا مرتبه صفر برای $M_z^{(0)}$ را تصحیح می‌کند. بنابر روابط (۱۶-الف) و (۱۳-ب) داریم

$$\begin{aligned} M_z^{(2)} &= \frac{i}{4\Gamma_R} \left[M_{-}^{(1)} + M_{-}^{(1)} - M_{+}^{(1)} - M_{+}^{(1)} \right] \\ &= \frac{i}{4\Gamma_R} \left[M_{+}^{(1)*} + M_{+}^{(1)*} - M_{+}^{(1)} - M_{+}^{(1)} \right] \end{aligned} \quad (25)$$

که بر طبق جوابهای مرتبه اول (۱۹-الف) و (۱۹-ب)، می‌دهد

$$M_z^{(2)} = -\frac{M_0}{4} \left[\frac{1}{(\omega - \omega_0)^2 + \Gamma_R^2} + \frac{1}{(\omega + \omega_0)^2 + \Gamma_R^2} \right] \quad (26)$$

با دسته‌بندی جملات ایستا ($p = 0$) در (۹-الف) تا جمله مرتبه دوم، به دست می‌آوریم

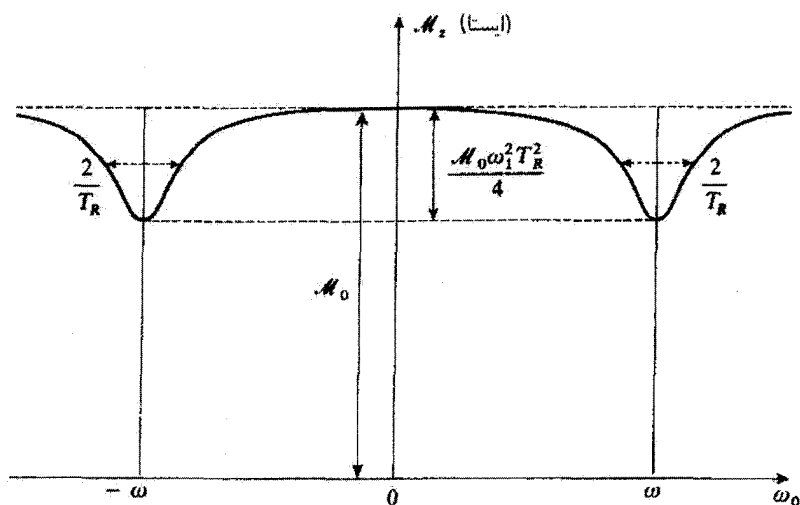
$$M_z(\text{ایستا}) = M_0 \left\{ 1 - \frac{\omega_1^2}{4} \left[\frac{1}{(\omega - \omega_0)^2 + \Gamma_R^2} + \frac{1}{(\omega + \omega_0)^2 + \Gamma_R^2} \right] + \dots \right\} \quad (27)$$

شکل ۴ این مغناطش طولی ایستا را به صورت تابعی از ω نشان می‌دهد.

بنابراین، اختلاف جمعیت تا مرتبه دوم، همواره نسبت به مقدار آن در نبود بسامد رادیویی کاهش می‌یابد، و این کاهش با شدت میدان بسامد رادیویی متناسب است. این مطلب به سادگی قابل فهم است: تحت تأثیر میدان فرودی، گذارهایی از $|+\rangle$ به $|-\rangle$ (گسیل القایی) یا از $|-\rangle$ به $|+\rangle$ (جذب) القا می‌شوند؛ صرف نظر از علامت اختلاف جمعیت اولیه، هر چه جمعیت حالت بیشتر باشد، تعداد گذارها از آن بیشتر است. بنابراین، گذارها اختلاف جمعیت را کاهش می‌دهند.

یادداشت:

مقدار بیشینه $|M_z^{(2)}|$ برابر است با $M_0 \omega_1^2 / 4\Gamma_R^2 = M_0 \omega_1^2 / 4\Gamma_R^2$ (دامنه تشدیدي که



شکل ۴ تغییرات مغناطش طولی ایستا نسبت به ω_0 در بررسی اختلال مرتبه دوم، دو تشدید به پهنای $2/T_R$ و متمرکز در $\omega = -\omega_0$ و $\omega = \omega_0$ ظاهر می‌شوند. این محاسبه، تنها وقتی معتبر است که شدت نسبی تشدیدها کوچک باشد، یعنی وقتی که $\omega_0 T_R \ll 1$ باشد.

به صورت یک فرورفتگی در شکل ۴ ظاهر می‌شود). بنابراین، برای اینکه بسط اختلال مفهوم داشته باشد، لازم است که

$$\omega_0 T_R \ll 1 \quad (28)$$

۲. تولید هماهنگ دوم

بنابر روابط (۱۶-الف)، (۱۳-ب)، (۱۹-الف) و (۱۹-ب) داریم

$$\begin{aligned} {}^{(2)}M_z &= \frac{1}{4(2\omega - i\Gamma_R)} \left[{}^{(1)}M_+^* - {}^{(1)}M_+ \right] \\ &= \frac{M_0}{\lambda(2\omega - i\Gamma_R)} \left[\frac{1}{\omega_0 + \omega - i\Gamma_R} - \frac{1}{\omega_0 - \omega + i\Gamma_R} \right] \quad (29) \end{aligned}$$

${}^{(2)}M_z$ یک اختلال دوقطبی مغناطیسی را در طول Oz با بسامد 2ω توصیف می‌کند. بنابراین، سیستم می‌تواند موجی با بسامد زاویه‌ای 2ω تابش کند که در امتداد Oz قطبیده خطی است (تا جایی که میدان مغناطیسی مورد نظر است).

از این رو، می بینیم که یک سیستم اتمی عموماً یک سیستم خطی نیست. این سیستم می تواند بسامد برانگیختگی را دو برابر، سه برابر (همان طوری که بعداً خواهیم دید) و غیره کند. همین پدیده در اپتیک برای شدتهای بسیار زیاد ("اپتیک غیرخطی") وجود دارد: یک پرتو سرخ لیزر (که به عنوان مثال، توسط یک لیزر یاقوتی تولید می شود) وقتی به ماده ای نظیر یک بلور کوآرتز برخورد کند می تواند یک پرتو نور فرابنفش تولید کند (بسامد دو برابر).

یادداشت:

بهتر است که مقادیر $|M_z^{(2)}|$ و $|M_z^{(1)}|$ را در مجاورت $\omega = \omega_0$ با هم مقایسه کنیم. بنابر رابطه (۲۹)، برای $\omega \simeq \omega_0$ داریم

$$\left| M_z^{(1)} \right| \simeq \frac{M_0}{16\omega_0 T_R} \quad (30)$$

همین طور، رابطه (۲۶) می رساند که

$$\left| M_z^{(2)} \right| \simeq \frac{M_0}{4T_R^2} \quad (31)$$

بنابراین، بر طبق رابطه (۲۴)، برای $\omega \simeq \omega_0$ داریم

$$\frac{\left| M_z^{(1)} \right|}{\left| M_z^{(2)} \right|} \simeq \frac{T_R}{4\omega_0} = \frac{1}{4\omega_0 T_R} \ll 1 \quad (32)$$

(د) جواب مرتبه سوم: آثار اشباع و گذارهای چند کوانتومی

جدول ۱ نشان می دهد که، تا مرتبه سوم، فقط $M_{+1}^{(2)}$ و $M_{\pm 2}^{(2)}$ غیر صفرند؛ از این رو کافی است $M_{-1}^{(2)}$ را مطالعه کنیم.

$M_{+1}^{(2)}$ حرکت دایره ای راستگرد M_{-1} را، که آن را تا مرتبه اول پیدا و در بخش ۱۳-۳-ب تحلیل کردیم، تا مرتبه سوم تصحیح می کند. خواهیم دید که $M_{+1}^{(2)}$ مربوط است به یک اثر اشباع در پذیرفتاری سیستم.

$M_{-1}^{(2)}$ معرف یک مؤلفه جدید از حرکت M_{-1} با بسامد زاویه ای $3\omega_0$ است (تولید هماهنگ سوم). به علاوه، طبیعت تشدید $M_{-1}^{(2)}$ ، در مجاورت $3\omega_0 = \omega$ را می توان به عنوان نتیجه ای از جذب همزمان سه فوتون بسامد رادیویی تعبیر کرد. فرایندی که در آن هم انرژی کل پایسته است و هم تکانه زاویه ای کل.

۱. اشباع پذیرفتاری سیستم
بنابر رابطه (۱۶-ب)، داریم

$${}^{(2)}M_+ = \frac{1}{2} \frac{1}{\omega_0 - \omega + i\Gamma_R} \left[{}^{(2)}M_z + {}^{(2)}M_z \right] \quad (33)$$

چون تصحیح حرکت دایره‌ای راستگرد که در بخش ۱۳-۳-ب مطالعه شد و در $\omega = \omega_0$ تشدید دارد، مورد نظر ماست، خود را در مجاورت $\omega = \omega_0$ قرار می‌دهیم. در این صورت می‌توانیم، طبق یادداشت بخش قبل، [فرمول (۳۲)]، از ${}^{(1)}M_z$ در مقابل ${}^{(2)}M_z$ چشم‌پوشیم. بنابراین، با استفاده از رابطه (۲۶) برای ${}^{(2)}M_z$ (با چشم‌پوشی از جمله‌ای که قله تشدید آن در $\omega = \omega_0$ است)، به دست می‌آوریم

$${}^{(2)}M_+ \simeq -\frac{M_0}{\lambda} \frac{1}{\omega_0 - \omega + i\Gamma_R} \frac{1}{(\omega - \omega_0)^2 + \Gamma_R^2} \quad (34)$$

اگر نتایج (۳۴) و (۱۹-الف) را مجدداً دسته‌بندی کنیم، برای حرکت دایره‌ای راستگرد M_- در بسامد $\omega/2\pi$ ، تا مرتبه سوم نسبت به ω ، رابطه زیر را به دست می‌آوریم

$$M_+ (\text{دایره‌ای راستگرد}) = \frac{M_0}{\omega_1} \frac{e^{i\omega t}}{\omega_0 - \omega + i\Gamma_R} \left[1 - \frac{\omega_1^2}{4} \frac{1}{(\omega - \omega_0)^2 + \Gamma_R^2} \right] \quad (35)$$

با مقایسه رابطه‌های (۳۵) و (۲۱)، می‌بینیم که پذیرفتاری سیستم از مقدار (۲۲) به مقدار زیر می‌رسد

$$\gamma(\omega) = -\gamma_0 M_0 \frac{1}{\omega_0 - \omega + i\Gamma_R} \left[1 - \frac{\omega_1^2}{4} \frac{1}{(\omega_0 - \omega)^2 + \Gamma_R^2} \right] \quad (36)$$

که در ضریبی کوچکتر از یک ضرب شده است؛ هر چه شدت میدان بسامد رادیویی بیشتر باشد و هر چه به تشدید نزدیکتر باشیم، این ضریب کوچکتر خواهد بود. در این صورت می‌گوییم که سیستم "اشباع‌شده" است. جمله γ_0 در (۳۶)، "پذیرفتاری غیرخطی" نامیده می‌شود. مفهوم فیزیکی این اشباع کاملاً واضح است. یک میدان الکترومغناطیسی ضعیف، در سیستم اتمی یک گشتاور دوقطبی القا می‌کند که با آن متناسب است. اگر دامنه میدان افزایش یابد،

دوقطبی نمی‌تواند متناسب با آن زیاد شود. گذارهای جذبی و گسیلی القاشده توسط میدان، اختلاف جمعیت حالت‌های اتمی درگیر را کاهش می‌دهند. در نتیجه سیستم اتمی کمتر به میدان واکنش نشان می‌دهد. به علاوه، مشاهده می‌کنیم که جمله داخل کروشه در رابطه (۳۶)، همان جمله‌ای است که کاهش در اختلاف جمعیت تا مرتبه دوم را بیان می‌کند [فرمول (۲۷)]، که در آن از جمله تشدید در $\omega = -\omega_0$ چشمپوشی شده است.

یادداشت:

جملات اشباع نقش بسیار مهمی در تمام نظریه‌های میز یا لیزر بازی می‌کنند. بار دیگر شکل ۱ را در نظر بگیرید. اگر در مرحله اول محاسبه، فقط جمله واکنش خطی را در نظر بگیریم (بیکانهای به سمت راست)، گشتاور دوقطبی القایی متناسب با میدان است. اگر ماده تقویت‌کننده باشد (و اگر اتلافهای کاواک الکترومغناطیسی به حد کافی کوچک باشند)، واکنش دوقطبی روی میدان (بیکان به سمت چپ) می‌کوشد میدان را به اندازه کمی متناسب با آن افزایش دهد. بنابراین، برای میدان یک معادله دیفرانسیل خطی به دست می‌آوریم و این معادله به جوابی می‌شود که به طور خطی^۱ با زمان افزایش می‌یابد.

جملات اشباعی از این افزایش نامحدود جلوگیری می‌کنند. این جملات به معادله‌ای منجر می‌شوند که جواب آن محدود باقی می‌ماند و به حدی میل می‌کند که عبارت است از میدان لیزری حالت پایا در کاواک است. از لحاظ فیزیکی، این جملات اشباعی، بیانگر این واقعیت هستند که بنابر آن سیستم اتمی نمی‌تواند برای میدان انرژی بیش از انرژی متناظر با اختلاف جمعیت که ابتدا توسط دمش تولید می‌شود، فراهم کند.

۲. گذارهای سه فوتونی

بنابر (۱۶-ب) و (۲۹) داریم

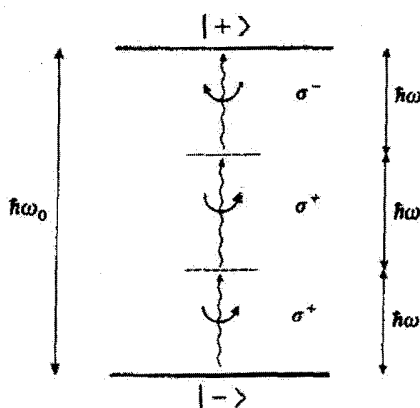
$$\begin{aligned} {}^{(2)}M_+ &= \frac{1}{2} \frac{1}{\omega_0 - 3\omega + i\Gamma_R} {}^{(2)}M_z \\ &= \frac{M_0}{16} \frac{1}{\omega_0 - 3\omega + i\Gamma_R} \frac{1}{2\omega - i\Gamma_R} \left[\frac{1}{\omega_0 + \omega - i\Gamma_R} - \frac{1}{\omega_0 - \omega + i\Gamma_R} \right] \end{aligned} \quad (37)$$

می‌توانیم همان تذکری را که برای $M_z^{(1)}$ عنوان کردیم در مورد $M_+^{(2)}$ نیز عنوان کنیم: سیستم اتمی، هماهنگ‌هایی با بسامد برانگیختگی تولید می‌کند (در اینجا هماهنگ سوم). مورد اختلاف با بحث بخش قبلی درباره $M_z^{(1)}$ ، عبارت است از ظهور یک تشدید متمرکز در $\omega = 3\omega_0$ [ناشی از اولین مخرج تشدید (۳۷)].

۱. در متن فرانسه به جای "به‌طور خطی"، "به‌طور نمایی" آمده است. م.

می‌توانیم برای تشدید $\omega = \omega_0$ ، که در بخشهای قبلی مورد مطالعه قرار دادیم، یک تعبیر ذره‌ای ارائه دهیم: اسپین با جذب یک فوتون (یا گسیل آن، بسته به مکانهای نسبی حالت‌های $|+\rangle$ و $|-\rangle$) از حالت $|-\rangle$ به حالت $|+\rangle$ می‌رود. وقتی انرژی $\hbar\omega$ ی فوتون برابر با انرژی $\hbar\omega_0$ گذار اتمی باشد، تشدید وجود خواهد داشت. می‌توانیم تعبیر ذره‌ای مشابهی برای تشدید $\omega = 3\omega_0$ ارائه دهیم. چون $\hbar\omega = 3\hbar\omega_0$ است، الزاماً سه فوتون در گذار دخیل خواهند بود، زیرا انرژی کل باید پایسته باشد.

ممکن است این سؤال پیش بیاید که چرا هیچ تشدیدی تا مرتبهٔ دوم برای $\hbar\omega = 2\hbar\omega_0$ (گذار دو فوتونی) ظاهر نشده است. دلیل آن این است که تکانهٔ زاویه‌ای کل نیز باید در حین گذار پایسته باشد. همان طوری که قبلاً گفتیم، میدان بسامد رادیویی خطی ترکیب دو میدان است که در جهت‌های مخالف هم دوران می‌کنند. به هر یک از این میدان‌های چرخان، فوتونهایی از نوع متفاوت وابسته است. برای میدان دایره‌ای راستگرد، این فوتون‌های σ^+ هستند که یک تکانهٔ زاویه‌ای $+\hbar$ را نسبت به Oz منتقل می‌کنند. و برای میدان دایره‌ای چپگرد، فوتون‌های σ^- تکانهٔ زاویه‌ای $-\hbar$ را منتقل می‌کنند. برای اینکه اسپین از حالت $|-\rangle$ به حالت $|+\rangle$ برود باید تکانهٔ زاویه‌ای $+\hbar$ را نسبت به Oz (اختلاف بین دو ویژه‌مقدار S_z) جذب کند. این کار می‌تواند با جذب یک فوتون σ^+ انجام شود؛ اگر $\omega = \omega_0$ باشد، پایستگی انرژی کل نیز وجود دارد، که حاکی از ظهور تشدید $\omega = \omega_0$ است. سیستم همچنین می‌تواند با جذب سه فوتون، یک تکانهٔ زاویه‌ای $+\hbar$ کسب کند (شکل ۵): دو فوتون σ^+ و یک فوتون σ^- . بنابراین، اگر $\omega = 3\omega_0$ باشد، هم انرژی و هم تکانهٔ زاویه‌ای کل



شکل ۵ اسپین می‌تواند با جذب سه فوتون با انرژیهای $\hbar\omega$ از حالت $|-\rangle$ به حالت $|+\rangle$ برود. اگر $\hbar\omega = 3\hbar\omega_0$ باشد انرژی کل پایسته است. اگر دو فوتون دارای قطبش σ^+ باشند (هر کدام تکانهٔ زاویه‌ای $+\hbar$ را نسبت به Oz حمل کنند) و فوتون سوم دارای قطبش σ^- باشد (تکانهٔ زاویه‌ای $-\hbar$ را حمل کند)، تکانهٔ زاویه‌ای پایسته است.

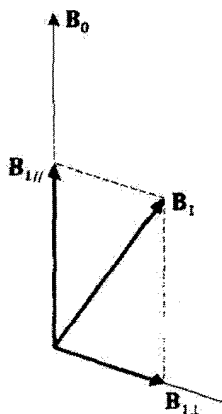
می‌توانند پایسته باشند، که حاکی از وجود تشدید $\omega = 3\omega_0$ است. از طرف دیگر، دو فوتون به هیچ‌وجه نمی‌توانند به یک اتم تکانه زاویه‌ای $h + h$ بدهند؛ یا هر دو، فوتونهای σ^- هستند که $2h$ را منتقل می‌کنند، یا هر دو σ^- هستند و $2h$ را حمل می‌کنند، یا یکی از آنها σ^+ و دیگری σ^- است که هیچ تکانه زاویه‌ای حمل نمی‌کنند.

این استدلالها را می‌توان به راحتی تعمیم و نشان داد که وقتی $\omega_0 = \omega, 3\omega, 5\omega, 7\omega, \dots, (2n+1)\omega$ متناظر با جذب تعداد فردی فوتون باشد، تشدیدهایی پدید می‌آیند. به علاوه، از فرمول (۱۶-ب) می‌بینیم که $M_{+}^{(2n+1)}$ به‌ازای $\omega_0 = (2n+1)\omega$ به یک تله تشدید منجر می‌شود. هیچ وضع مشابهی برای مرتبه‌های زوج اتفاق نمی‌افتد زیرا، بنا به جدول ۱، باید در این صورت معادله (۱۶-الف) را به‌کار ببریم.

یادداشتها:

۱. اگر میدان B_1 چرخان باشد، فقط یک نوع فوتون، σ^- یا σ^+ وجود دارد. استدلال مشابهی نشان می‌دهد که در این صورت یک تک تشدید، در $\omega = n\omega_0$ زمانی می‌تواند رخ دهد که فوتونها σ^+ باشند، و در $\omega = -n\omega_0$ زمانی که فوتونها σ^- باشند. از اینجا پی می‌بریم که چرا محاسبات برای یک میدان چرخان بسیار ساده‌تر است و منجر به یک جواب دقیق منجر می‌شود. جالب است که روش این مکمل را به مورد یک میدان چرخان اعمال کنیم و نشان دهیم که رشته اختلال را می‌توان جمع کرد تا جوابی را که مستقیماً در مکمل ۶ از فصل ۴ پیدا کردیم، به‌دست دهد.
۲. سیستمی را در نظر بگیرید که دو تراز با پاریته‌های مختلف دارد و تحت تأثیر یک میدان الکتریکی نوسانی است. در این صورت هامیلتونی برهم‌کنش دارای همان ساختار هامیلتونی است که در این مکمل مطالعه می‌کنیم. S_n فقط عناصر غیرقطری دارد. همین‌طور، هامیلتونی دوقطبی الکتریکی، چون فرد است، نمی‌تواند عنصر قطری داشته باشد. در مورد دوم، محاسبات بسیار شبیه به محاسبات قبلی است و به نتایج مشابهی منجر می‌شود: تشدیدها به‌ازای $\omega_0 = \omega, 3\omega, 5\omega, \dots$ رخ می‌دهند. به این ترتیب، تعبیر طبیعت "فرد" بودن طیف به‌صورت زیر است: فوتونهای دوقطبی الکتریکی دارای پاریته منفی هستند، و سیستم برای اینکه از یک تراز به تراز با پاریته متفاوت دیگری برود باید تعداد فردی فوتون جذب کند.

۳. برای مورد اسپین ۱/۲، فرض کنید که میدان بسامد رادیویی خطی نه موازی B_0 است و نه عمود بر آن (شکل ۶). در این صورت، B_1 را می‌توانیم به یک مؤلفه موازی با B_0 ، $B_{1//}$ ، و یک مؤلفه π (با تکانه زاویه‌ای صفر نسبت به Oz) به آن وابسته‌اند، و یک مؤلفه $B_{1\perp}$ که همان‌طوری که دیدیم فوتونهای σ^+ و σ^- به آن وابسته‌اند، تجزیه کنیم. در این مورد، اتم می‌تواند تکانه زاویه‌ای خود را نسبت به Oz به اندازه h افزایش دهد، و با جذب دو فوتون (یکی σ^+ و



شکل ۶ میدان مغناطیسی ایستای B_0 و میدان بسامد رادیویی B_1 ، در موردی که B_1 نه موازی با B_0 و نه عمود بر آن است. $B_{1||}$ و $B_{1\perp}$ مؤلفه‌های B_1 در راستای موازی با B_0 و عمود بر آن هستند.

دیگری (π) از $(-)$ به $(+)$ برود. می‌توان با به‌کار بردن روش این مکمل نشان داد که برای این قطبش از بسامد رادیویی، یک طیف کامل (زوج و فرد) از تشدیدها ظاهر می‌شود

$$\omega_0 = \omega, 2\omega, 3\omega, 4\omega, \dots$$

تمرینات: کاربردهای این مکمل

تمرین ۱

در معادلات (۱)، فرض کنید $\omega_1 = 0$ باشد (بسامد رادیویی وجود ندارد) و μ را موازی Oz انتخاب کنید (دمش عرضی).

مقادیر حالت پایای M_x ، M_y ، و M_z را محاسبه کنید. نشان دهید که وقتی میدان ایستا حول صفر جاروب می‌شود، M_x و M_y دستخوش تغییرات تشدید می‌شوند (اثر هائل). یک تعبیر فیزیکی برای این تشدیدها (دمش در رقابت با حرکت تقدیمی لارمور) ارائه و نشان دهید که این تشدیدها اندازه‌گیری حاصلضرب γTH را ممکن می‌سازند.

تمرین ۲

یک سیستم اسپینی در نظر بگیرید که تحت تأثیر همان میدان ایستای B_0 و همان فرآیندهای دمش و واهلش مندرج در این مکمل باشد. این اسپینها تحت تأثیر دو میدان بسامد رادیویی خطی نیز قرار دارند که در آن میدان اولی دارای بسامد زاویه‌ای ω ، دامنه B_1 ، و موازی Oz است و میدان دوم دارای بسامد زاویه‌ای ω' ، دامنه B_1' ، و موازی Ox است.

با استفاده از روشهای مندرج در این مکمل، مغناطش \mathcal{M} سیستم اسپین را تا مرتبه دوم نسبت به $\omega_1 = -\gamma B_1$ و $\omega'_1 = -\gamma B'_1$ (جملات برحسب ω_1 ، ω'_1 ، $\omega_1 \omega'_1$) محاسبه کنید. $\omega_0 = -\gamma B_0$ و ω_1 را ثابت می‌گیریم. فرض کنید $\omega > \omega_0$ ، و ω' تغییر کند. نشان دهید که تا این مرتبه اختلال، دو تشدید، یکی در $\omega = \omega_0 - \omega_1$ و دیگری در $\omega = \omega_0 + \omega_1$ رخ می‌دهد. برای این دو تشدید، یک تعبیر فیزیکی ارائه دهید (تشدید اول متناظر با جذب دو فوتونی، و تشدید دوم متناظر با اثر رامان است).

مراجع برای مطالعه بیشتر: بخش ۱۵ را ببینید.

نظریه‌های نیمه‌کلاسیک لیزر و میز:

Lamb (15.4) and (15.2), Sargent et al. (15.5), chap. VIII, IX and X.

ابتیک غیرخطی:

Baldwin (15.19), Bloembergen (15.21), Giordmaine (15.22).

حل معادلهٔ مادریه روش تکراری:

Bloembergen (15.21), chap. 2, §§3, 4 and 5 and Appendix III.

فرایندهای چند فوتونی در گسترهٔ R. F، اثر هانل:

Brossel's lectures in (15.2).

نوسانهای یک سیستم بین دو حالت گسسته تحت تأثیر یک اختلال تشدیدی

۱. روش: تقریب مشخصه

۲. حل دستگاه معادلات

۳. بحث

روش تقریبی‌ای که در فصل ۱۳ برای محاسبه اثر یک اختلال تشدیدی به‌کار بردیم، در دوره‌های تناوبی طولانی از زمان معتبر نیست. دیدیم که [شرط (۱۳-۴۸)] t باید در شرط زیر صدق کند

$$t \ll \frac{\hbar}{|W_{fi}|} \quad (1)$$

فرض کنید می‌خواهیم رفتار یک سیستم را که در یک مدت زمان طولانی [که برای آن، شرط (۱) صادق نیست] تحت تأثیر یک اختلال تشدیدی قرار دارد، مطالعه کنیم. چون در این حالت، جواب مرتبه اول ناکافی است، برای به‌دست آوردن عبارت بهتری برای $\mathcal{P}_{ig}(t; \omega)$ ، می‌توانیم تعدادی از جملات مرتبه بالاتر را محاسبه کنیم

$$\mathcal{P}_{ig}(t; \omega) = \left| \lambda b_f^{(1)}(t) + \lambda^2 b_f^{(2)}(t) + \lambda^3 b_f^{(3)}(t) + \dots \right|^2 \quad (2)$$

یک چنین روشی به محاسبات طولانی و غیر لازم منجر خواهد شد.

در اینجا خواهیم دید که می‌توان با برآزش روش تقریبی به طبیعت تشدید اختلال، مسئله را با ظرافت بیشتر و سریعتر حل کرد. شرط تشدید $\omega \simeq \omega_{fi}$ حاکی از آن است که فقط دو حالت گسسته $|\varphi_i\rangle$ و $|\varphi_f\rangle$ توسط $W(t)$ ، به‌طور مؤثر جفت می‌شوند. چون سیستم در لحظه اولیه، در حالت $|\varphi_i\rangle$ قرار دارد [$b_i(0) = 1$]، دامنه احتمال $b_f(t)$ برای یافتن آن در زمان t در حالت $|\varphi_f\rangle$ می‌تواند مقدار قابل ملاحظه‌ای باشد. از طرف دیگر، تمام ضرایب $b_n(t)$ (با $n \neq i, f$) خیلی کوچکتر از ۱ می‌مانند زیرا در شرط تشدید صدق نمی‌کنند. این مطلب، اساس روشی است که به‌کار خواهیم برد.

۱. روش: تقریب مشخصه

در فصل ۱۳، تمام مؤلفه‌های $b_k(t)$ در طرف راست (۱۳-۱۷) را با مقادیر آنها در زمان $t = 0$ ، یعنی $b_k(0)$ ، جایگزین کردیم. در اینجا نیز برای مؤلفه‌هایی که برای آنها $k \neq i, f$ است همین کار را خواهیم کرد. اما، $b_i(t)$ و $b_f(t)$ را به‌طور صریح نگه می‌داریم. از این رو، برای تعیین $b_i(t)$ و $b_f(t)$ ، باید دستگاه معادلات زیر را حل کنیم [اختلال به صورت (۱۳-۱-۳-الف) از فصل ۱۳ است]

$$i\hbar \frac{d}{dt} b_i(t) = \frac{1}{2i} \{ [e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}] W_{ii} b_i(t) + [e^{i(\omega - \omega_{fi})t} - e^{-i(\omega + \omega_{fi})t}] W_{if} b_f(t) \}$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} b_f(t) = \frac{1}{2i} \{ [e^{i(\omega + \omega_{fi})t} - e^{-i(\omega - \omega_{fi})t}] W_{fi} b_i(t) + [e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}] W_{ff} b_f(t) \} \quad (۳)$$

در طرف راست این معادلات، بعضی از ضرایب $b_i(t)$ و $b_f(t)$ با $e^{\pm i(\omega - \omega_{fi})t}$ متناسب‌اند. بنابراین، وقتی $\omega \approx \omega_{fi}$ باشد، به آهستگی نسبت به زمان نوسان می‌کنند. از طرف دیگر، ضرایبی که با $e^{\pm i\omega t}$ و یا با $e^{\pm i(\omega + \omega_{fi})t}$ متناسب‌اند، خیلی سریعتر نوسان می‌کنند. در اینجا، از تقریب جواب مشخصه استفاده می‌کنیم که عبارت است از چشم پوشیدن از جملات نوع دوم. در این صورت، جملات باقیمانده که "جملات مشخصه" نامیده می‌شوند، آنهایی هستند که ضرایب آنها به‌ازای $\omega = \omega_{fi}$ به مقادیر ثابتی تقلیل می‌یابند. وقتی نسبت به زمان انتگرال بگیریم، این جملات در تغییرات مؤلفه‌های $b_i(t)$ و $b_f(t)$ سهم به‌سزایی دارند. از طرف دیگر، مشارکت سایر جملات قابل چشم‌پوشی است، زیرا تغییرات آنها بسیار سریع است (انتگرال $e^{i\Omega t}$ باعث می‌شود که یک ضریب $1/\Omega$ ظاهر شود، و مقدار متوسط $e^{i\Omega t}$ روی تعداد بسیار زیادی از تناوبها عملاً صفر است).

یادداشت:

برای اینکه استدلال قبلی معتبر باشد، لازم است که تغییرات زمانی جمله $e^{i\omega t} b_{i,f}(t)$ اصولاً ناشی از قسمت نمایی باشد نه از مؤلفه $b_{i,f}(t)$. چون ω خیلی نزدیک به ω_{fi} است، این مطلب بدان معنی است که $b_{i,f}(t)$ نباید در یک فاصله زمانی از مرتبه $1/|\omega_{fi}|$ ، خیلی زیاد تغییر کند. در واقع، این مطلب با فرضیهایی که کردیم، یعنی با $W \ll H$ ، جور در می‌آید. تغییرات $b_i(t)$ و $b_f(t)$ (که اگر $W = 0$ باشد، اعداد ثابتی هستند) ناشی از حضور اختلال W هستند، و برای زمانهایی از مرتبه \hbar/W_{if} ، مقدار آنها قابل ملاحظه است [این مطلب را می‌توان مستقیماً از فرمولهای (۸)، که در زیر به‌دست آمده است ثابت کرد]. چون بنا به فرض $\hbar|\omega_{fi}| \ll |W_{if}|$ ، این مدت زمان

خیلی بزرگتر از $|W_{fi}|$ است. در پایان، تقریب جواب مشخصه به دستگاه معادلات زیر منجر می‌شود

$$\frac{d}{dt} b_i(t) = -\frac{\lambda}{2\hbar} e^{i(\omega - \omega_{fi})t} W_{fi} b_f(t) \quad (۴-الف)$$

$$\frac{d}{dt} b_f(t) = \frac{\lambda}{2\hbar} e^{-i(\omega - \omega_{fi})t} W_{fi} b_i(t) \quad (۴-ب)$$

که جواب آن به جواب معادلات (۳) بسیار نزدیک و، همان‌طور که در بخش بعد خواهیم دید، محاسبه آن راحت‌تر است.

۲. حل دستگاه معادلات

ابتدا موردی را بررسی می‌کنیم که در آن $\omega = \omega_{fi}$ است. با مشتق گرفتن از (۴-الف) و قرار دادن (۴-ب) در نتیجه حاصل، داریم

$$\frac{d^2}{dt^2} b_i(t) = -\frac{\lambda^2}{4\hbar^2} |W_{fi}|^2 b_i(t) \quad (۵)$$

چون سیستم در زمان $t = 0$ در حالت $|\varphi_i\rangle$ قرار دارد، شرایط اولیه عبارت‌اند از

$$\begin{cases} b_i(0) = 1 \\ b_f(0) = 0 \end{cases} \quad (۶-الف)$$

$$(۶-ب)$$

که بر طبق رابطه (۴) نتیجه می‌شود

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{db_i}{dt}(0) = 0 \\ \frac{db_f}{dt}(0) = \frac{W_{fi}}{2\hbar} \end{array} \right. \quad (۷-الف)$$

$$(۷-ب)$$

جواب (۵) که در (۶-الف) و (۷-الف) صدق می‌کند را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$b_i(t) = \cos\left(\frac{|W_{fi}|t}{2\hbar}\right) \quad (۸-الف)$$

به این ترتیب، می‌توانیم b_f را از (۴-الف) محاسبه کنیم

$$b_f(t) = e^{i\alpha_{fi}} \sin\left(\frac{|W_{fi}|t}{2h}\right) \quad (۸-ب)$$

که در آن α_{fi} آرگومان W_{fi} است. از این رو، در این مورد، احتمال $\mathcal{P}_{i,f}(t; \omega = \omega_{fi})$ یافتن سیستم در لحظه t در حالت $|\varphi_f\rangle$ برابر است با

$$\mathcal{P}_{i,f}(t; \omega = \omega_{fi}) = \sin^2\left(\frac{|W_{fi}|t}{2h}\right) \quad (۹)$$

وقتی ω با ω_{fi} متفاوت است (و در عین حال نزدیک به مقدار تشدید باقی می‌ماند)، دستگاه دیفرانسیل (۴) باز به‌طور دقیق قابل حل است. در حقیقت، این دستگاه کاملاً شبیه به دستگاه معادلاتی است که در مکمل ۶ از فصل ۴ [معادله (۱۵)]. هنگام مطالعه تشدید مغناطیسی یک اسپین ۱/۲ به‌دست آوردیم. محاسباتی از همان نوع محاسبهٔ مکمل مزبور، منجر به رابطهٔ مشابه (۲۷) (فرمول رابی) می‌شود، که در اینجا می‌توان آن را به‌صورت زیر نوشت

$$\mathcal{P}_{fi}(t; \omega) = \frac{|W_{if}|^2}{|W_{if}|^2 + \hbar^2(\omega - \omega_{fi})^2} \sin^2\left[\sqrt{\frac{|W_{if}|^2}{\hbar^2} + (\omega - \omega_{fi})^2} \frac{t}{2}\right] \quad (۱۰)$$

(وقتی $\omega = \omega_{fi}$ باشد، این رابطه به همان رابطه (۹) تقلیل می‌یابد).

۳. بحث

بحث دربارهٔ نتیجهٔ به‌دست آمده در (۱۰) با بحثی که دربارهٔ تشدید مغناطیسی یک اسپین ۱/۲ کردیم (مکمل ۶ از فصل ۴، بخش ۲-۲-ج) یکسان است. احتمال $\mathcal{P}_{i,f}(t; \omega)$ ، یک تابع نوسانی از زمان است؛ و به‌ازای بعضی از مقادیر t ، $\mathcal{P}_{i,f}(t; \omega) = 0$ ، و سیستم به حالت اولیه $|\varphi_i\rangle$ باز می‌گردد.

به‌علاوه، معادله (۱۰) بزرگی پدیدهٔ تشدید را به‌دست می‌دهد. وقتی $\omega = \omega_{fi}$ است، هر چقدر هم اختلال کوچک باشد، باز می‌تواند باعث شود که سیستم کاملاً از حالت $|\varphi_i\rangle$ به حالت $|\varphi_f\rangle$ برود. از طرف دیگر، اگر اختلال تشدید نباشد، احتمال $\mathcal{P}_{i,f}(t; \omega)$ همواره کمتر از ۱ می‌ماند.

۱- بزرگی اختلال، که با $||W_{if}||$ مشخص می‌شود، در تشدید، فقط در مدت زمانی که طول می‌کشد سیستم از $|\varphi_i\rangle$ به $|\varphi_f\rangle$ برود وارد می‌شود. هر چه $||W_{if}||$ کوچکتر باشد، این مدت زمان طولانیتر است.

بالاخره، جالب توجه است که نتیجه به دست آمده در این مکمل را با نتیجه‌ای که با استفاده از نظریه مرتبه اول در فصل ۱۳ به دست آوردیم، مقایسه کنیم. ابتدا توجه کنید که احتمال $\mathcal{P}_{i,f}(t; \omega)$ به دست آمده در رابطه (۱۰)، به ازای تمام مقادیر t ، بین 0 و 1 است. بنابراین، روش تقریبی به کار رفته در اینجا، به ما امکان می‌دهد تا از اشکالاتی که در فصل ۱۳ (بخش ۱۳-۳-۲-ج) با آنها مواجه شدیم، بپرهیزیم. ولتی در (۹)، t را به سمت صفر میل دهیم، نتیجه (۱۳-۴۷)ی این فصل به دست می‌آید. از این رو، در واقع، نظریه اختلال مرتبه اول برای مقادیر به حد کافی کوچک t معتبر است (یادداشت بخش ۱۳-۲-۳-ب). این روش به این نتیجه منجر می‌شود که تابع سینوسی که معرف $\mathcal{P}_{i,f}(t; \omega)$ به صورت تابعی از زمان است را با یک تابع سهمی جایگزین کنیم.

مکمل ۴

واپاشی یک حالت گسسته که به طور تشدیدي به پیوستاری از حالت‌های
نهایی جفت شده است

۱. طرح مسئله

۲. توصیف مدل

الف) فرضیات درباره هامیلتونی مختل نشده H_0

ب) فرضیات درباره جفت‌شدگی W

ج) نتایج نظریه اختلال مرتبه اول

د) معادله انتگرال دیفرانسیلی هم‌ارز با معادله شرودینگر

۳. تقریب زمان-کوتاه. رابطه با نظریه اختلال مرتبه اول

۴. یک روش تقریبی دیگر برای حل معادله شرودینگر

۵. بحث

الف) طول عمر حالت گسسته

ب) انتقال حالت گسسته، بر اثر جفت‌شدگی با پیوستار

ج) توزیع انرژی حالت‌های نهایی

۱. طرح مسئله

در بخش ۱۳-۳ از فصل ۱۳ نشان دادیم که جفت‌شدگی القاشده توسط یک اختلال ثابت بین یک حالت گسسته اولیه با انرژی E_i و یک پیوستار از حالت‌های نهایی (که بعضی از آنها دارای انرژی E_i هستند) باعث می‌شود که سیستم از حالت اولیه به این پیوستار از حالت‌های نهایی برود. به بیان دقیقتر، احتمال یافتن سیستم در یک گروه کاملاً معین از حالت‌های پیوستار در زمان t ، به‌طور خطی با زمان افزایش می‌یابد. در نتیجه، احتمال $\mathcal{P}_{ii}(t)$ یافتن سیستم در لحظه t در حالت اولیه $|\varphi_i\rangle$ باید از مقدار $\mathcal{P}_{ii}(0) = 1$ ، به‌طور خطی با زمان کاهش یابد. واضح است که این نتیجه فقط در زمان‌های کوتاه معتبر است، زیرا برون‌یابی کاهش خطی $\mathcal{P}_{ii}(t)$ به زمان‌های طولانی، منجر به مقادیر منفی $\mathcal{P}_{ii}(t)$ خواهد شد، که برای یک احتمال بی‌معنی است. این مطلب، مسئله تعیین رفتار سیستم بعد از یک زمان طولانی را پیش می‌آورد.

قبلاً، وقتی که گذارهای تشدید القاشده توسط یک اختلال سینوسی بین دو حالت گسسته (φ_i) و (φ_f) را مطالعه می‌کردیم، با مسئله مشابهی برخورد کردیم. نظریه اختلال مرتبه اول برای $\mathcal{P}_{ii}(t)$ ، یک کاهش متناسب با t^2 ، از مقدار اولیه $\mathcal{P}_{ii}(0) = 1$ پیشگویی می‌کند، روش مندرج در مکمل ۳ از فصل ۱۳ نشان می‌دهد که سیستم، در واقع بین حالت‌های (φ_i) و (φ_f) نوسان می‌کند. کاهش متناسب با t^2 ، که در بخش ۱۳-۳ از فصل ۱۳ پیدا کردیم، صرفاً نشان‌دهنده "شروع" تابع سینوسی مربوط است.

ممکن است انتظار داشته باشیم که در مسئله‌ای که در اینجا مورد نظر ماست (نوسانات سیستم بین حالت گسسته و پیوستار) نتیجه مشابهی به‌دست آوریم. نشان خواهیم که این چنین نیست: سیستم فیزیکی، (φ_i) را به‌طور برگشت‌ناپذیر ترک می‌کند. برای $\mathcal{P}_{ii}(t)$ ، یک کاهش نمایی $e^{-\Gamma t}$ به‌دست می‌آوریم (که برای آن، بررسی اختلال فقط رفتار زمان-کوتاه $1 - \Gamma t$ را می‌دهد). بنابراین، طبیعت پیوسته مجموعه حالت‌های نهایی باعث می‌شود که برگشت‌پذیری که در مکمل ۳ از فصل ۱۳ پیدا کردیم، از بین برود؛ این طبیعت پیوسته، عامل واباشی حالت اولیه است که به این ترتیب یک عمر متناهی کسب می‌کند (حالت ناپایدار؛ مکمل IX، فصل ۳، جلد اول، کتاب فارسی را نگاه کنید). وضعیتی را که در این مکمل بررسی می‌کنیم، وضعیتی است که اغلب در فیزیک با آن مواجه می‌شویم. به‌عنوان مثال، سیستمی که ابتدا در یک حالت گسسته است، می‌تواند تحت تأثیر یک جفت‌شدگی داخلی (که در نتیجه، توسط هامیلتونی مستقل از زمان W توصیف می‌شود) به دو قسمت متمایز تقسیم شود که انرژی‌های آنها (انرژی جنبشی در مورد ذرات مادی و انرژی الکترومغناطیسی در مورد فوتونها) ممکن است، از دیدگاه نظری، هر مقداری باشند؛ این امر به مجموعه حالت‌های نهایی، یک طبیعت پیوسته می‌دهد. بنابراین، در α واباشی، هسته‌ای که ابتدا در یک حالت گسسته است (از طریق اثر تونل) به یک سیستم متشکل از یک ذره α و یک هسته دیگر تبدیل می‌شود. اتم چندالکترونی A که ابتدا در بیکربندی است (مکمل‌های ۲ از فصل ۱۴ و ۱ از فصل ۱۴) که در آن چندین الکترون برانگیخته هستند، می‌تواند تحت تأثیر برهم‌کنش‌های الکتروستاتیکی بین الکترونها، به سیستمی منجر شود که از یک یون A^+ و یک الکترون آزاد تشکیل شده است (البته، انرژی بیکربندی اولیه باید از حد انرژی یونش ساده A بزرگتر باشد). این پدیده را پدیده "خود یونشی" می‌گویند. همچنین می‌توانیم گسیل خودبه‌خودی یک فوتون توسط یک حالت اتمی (یا هسته‌ای) برانگیخته را ذکر کنیم: برهم‌کنش اتم با میدان الکترومغناطیسی کوانتیده، حالت اولیه گسسته (یعنی، اتم برانگیخته در غیاب فوتونها) را به یک پیوستار از حالت‌های نهایی (اتم در حالت پایینتر در حضور یک فوتون با جهت، قطبش، و انرژی دلخواه) جفت می‌کند. بالاخره، می‌توانیم اثر فوتوالکتریک را ذکر کنیم که در آن، یک اختلال که این بار سینوسی است، یک حالت گسسته از یک اتم A را به یک پیوستار از حالت‌های نهایی (یون A^+ و فوتوالکترون e^-) جفت می‌کند.

این چند مثال از حالت‌های ناپایدار که از قلمروهای مختلف فیزیک در نظر گرفتیم، برای نشان دادن اهمیت مسئله مورد بررسی در این مکمل، کافی هستند.

۲. توصیف مدل

الف) فرضیات دربارهٔ هامیلتونی مختل‌نشدهٔ H_0

برای اینکه محاسبات را تا حد ممکن ساده کنیم، فرض‌های زیر را دربارهٔ طیف هامیلتونی مختل‌نشدهٔ H_0 اتخاذ خواهیم کرد. این طیف شامل موارد زیر است:

۱. یک حالت گسستهٔ $\langle \varphi_i |$ با انرژی E_i (ناواگن)

$$H_0 |\varphi_i\rangle = E_i |\varphi_i\rangle \quad (۱)$$

۲. یک مجموعه حالت‌های $|\alpha\rangle$ که یک پیوستار تشکیل می‌دهند

$$H_0 |\alpha\rangle = E |\alpha\rangle \quad (۲)$$

E می‌تواند بینهایت مقدار پیوسته بگیرد که بر روی بخشی از محور حقیقی که شامل E_i نیز هست، توزیع شده‌اند. به‌عنوان مثال، فرض کنید که E از 0 تا $+\infty$ تغییر کند

$$E \geq 0 \quad (۳)$$

هر حالت $|\alpha\rangle$ توسط انرژی E ی آن و یک مجموعه پارامترهای دیگر که ما آنها را با β نشان خواهیم داد (نظیر بخش ۱۳-۳-۳ الف-۲ از فصل ۱۳)، مشخص می‌شود. از این رو، $|\alpha\rangle$ را می‌توان به‌صورت $|\beta, E\rangle$ نیز نوشت. داریم [فرمول (۱۳-۵۸) از فصل ۱۳]

$$d\alpha = \rho(\beta, E) d\beta dE \quad (۴)$$

که در آن $\rho(\beta, E)$ چگالی حالت‌های نهایی است.

ویژه‌حالت‌های H_0 در روابط زیر (روابط تعامد و بستاری) صدق می‌کنند

$$\begin{cases} \langle \varphi_i | \varphi_i \rangle = 1 & \text{(الف-۵)} \\ \langle \varphi_i | \alpha \rangle = 0 & \text{(ب-۵)} \\ \langle \alpha | \alpha' \rangle = \delta(\alpha - \alpha') & \text{(ج-۵)} \end{cases}$$

$$|\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| + \int d\alpha|\alpha\rangle\langle\alpha| = 1 \quad (۶)$$

(ب) فرضیات دربارهٔ جفت‌شدگی W

فرض می‌کنیم که W به طور صریح به زمان بستگی نداشته و دارای عناصر قطری نباشد

$$\langle\varphi_i|W|\varphi_i\rangle = \langle\alpha|W|\alpha\rangle = 0 \quad (۷)$$

(اگر این عناصر قطری صفر نبودند، می‌توانستیم همواره آنها را به عناصر H_0 اضافه کنیم، که در این صورت، انرژیهای مختل‌نشده تغییر می‌کردند. همچنین، فرض خواهیم کرد که W نتواند دو حالت پیوستار را به هم جفت کند

$$\langle\alpha|W|\alpha'\rangle = 0 \quad (۸)$$

در این صورت، تنها عناصر ماتریسی غیر صفر W آنهایی هستند که حالت گسسته $|\varphi_i\rangle$ را به حالت‌های پیوستار جفت می‌کنند. این عناصر ماتریسی، $\langle\alpha|W|\varphi_i\rangle$ عامل وایاشی حالت $|\varphi_i\rangle$ هستند.

فرضهای قبلی خیلی محدودکننده نیستند. مخصوصاً، شرط (۸) اغلب در مسائل فیزیکی که در آخر بخش ۱۳-۴ به آنها اشاره کردیم، صادق است. برتری این مدل در این است که با استفاده از آن می‌توانیم، بدون محاسبات بسیار پیچیده، فیزیک پدیدهٔ وایاشی را بررسی کنیم. به کار بردن یک مدل دقیقتر در نتایج اساسی فیزیکی تغییری ایجاد نخواهد کرد.

قبل از پرداختن به روش جدید حل معادلهٔ شرودینگر، که در این مکمل توصیف می‌کنیم، نتایج نظریهٔ اختلال مرتبهٔ اول فصل ۱۳ را وقتی در مورد این مدل به کار می‌روند، بیان خواهیم کرد.

(ج) نتایج نظریهٔ اختلال مرتبهٔ اول

بحث بخش ۱۳-۳ از فصل ۱۳ به ما امکان می‌دهد تا [بخصوص با استفاده از، فرمول (۱۳-۶۶)] احتمال یافتن سیستم فیزیکی (که ابتدا در حالت $|\varphi_i\rangle$ است) را در زمان t و در یک حالت نهایی با انرژی دلخواه محاسبه کنیم؛ انرژی دلخواه متعلق به گروهی از حالت‌های نهایی است که توسط بازهٔ $\delta\beta_f$ حول مقدار β_f مشخص می‌شوند.

در اینجا به احتمال یافتن سیستم در هر یک از حالت‌های $|\alpha\rangle$ می‌پردازیم؛ E و β هیچ‌کدام مشخص نیستند. بنابراین، باید از عبارت (۱۳-۶۶) فصل ۱۳ نسبت به β انتگرال بگیریم تا چگالی

احتمال به دست بیاید [انتگرال گیری بر روی انرژی را قبلاً در (۱۳-۶۶) انجام دادیم]. از این رو، ثابت زیر را معرفی می‌کنیم

$$\Gamma = \frac{\gamma\pi}{\hbar} \int d\beta |\langle \beta, E = E_i | W | \varphi_i \rangle|^2 \rho(\beta, E = E_i) \quad (9)$$

به این ترتیب، احتمال مورد نظر برابر با Γt است. با توجه به فرضیات بخش ۱۳-۴-۲ الف، این مقدار معرف احتمالی است که سیستم در زمان t حالت $|\varphi_i\rangle$ را ترک کند. اگر $\mathcal{P}_{ii}(t)$ را احتمال اینکه سیستم هنوز در زمان t در این حالت باشد، بنامیم داریم

$$\mathcal{P}_{ii}(t) = 1 - \Gamma t \quad (10)$$

شرایط معتبر بودن (۱۰) را برای ادامه بحث بخشهای زیر یادآور شویم:

۱. عبارت (۱۰) از نظریه اختلال مرتبه اول نتیجه می‌شود که تنها زمانی معتبر است که فقط مقدار کمی با مقدار اولیه $\mathcal{P}_{ii}(0) = 1$ اختلاف داشته باشد. در این صورت باید داشته باشیم

$$t \ll \frac{1}{\Gamma} \quad (11)$$

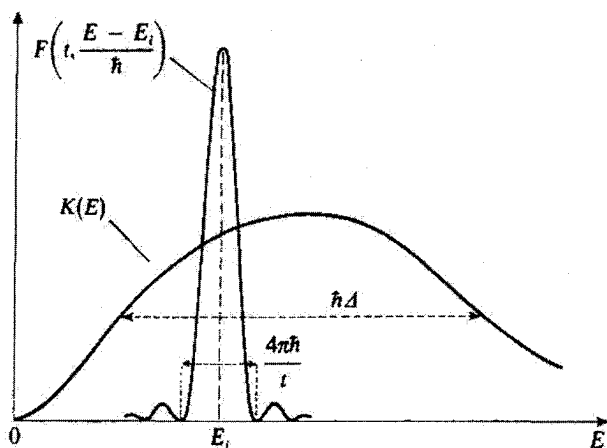
۲. به علاوه، (۱۰) فقط برای زمانهای به قدر کافی طولانی t معتبر است.

برای اینکه شرط دوم را دقیقتر بیان کنیم، و مخصوصاً ببینیم که آیا با (۱۱) سازگار است یا خیر، به رابطه (۱۳-۶۱) از فصل ۱۳ برمی‌گردیم (β و E دیگر مقید نیستند که فقط در داخل فاصله‌های δE_f و $\delta \beta_f$ تغییر کنند). به جای اینکه عملیات را نظیر فصل ۱۳ انجام دهیم، از چگالی احتمال آمده در (۱۳-۶۱)، ابتدا بر روی β و سپس بر روی E انتگرال می‌گیریم. به این ترتیب، انتگرال زیر حاصل می‌شود

$$\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dE F \left(t, \frac{E - E_i}{\hbar} \right) K(E) \quad (12)$$

که در آن $K(E)$ ، که از اولین انتگرال گیری بر روی β به دست می‌آید با رابطه زیر داده می‌شود

$$K(E) = \int d\beta |\langle \beta, E | W | \varphi_i \rangle|^2 \rho(\beta, E) \quad (13)$$



شکل ۱ تغییرات توابع $K(E)$ و $F(t, E - E_i/\hbar)$ نسبت به E . "پهنای" دو منحنی به ترتیب از مرتبه $\hbar\Delta$ و $4\pi\hbar/t$ است. برای مقادیر به حد کافی بزرگی t نسبت به $F(t, E - E_i/\hbar)$ مانند یک "تابع دلتا" رفتار می‌کند.

تابع پراش $F(t, E - E_i/\hbar)$ است که با (۱۳-۳۷) از فصل ۱۳ تعریف می‌شود، و مرکز آن در $E = E_i$ و پهنای آن $4\pi\hbar/t$ است.

فرض کنید $\hbar\Delta$ ، "پهنای" $K(E)$ باشد: $\hbar\Delta$ معرف مرتبه بزرگی تغییرات لازم برای E است تا $K(E)$ به طور قابل ملاحظه‌ای تغییر کند (شکل ۱ را نگاه کنید). به محض اینکه t آن قدر بزرگ باشد که داشته باشیم

$$t \gg \frac{1}{\Delta} \quad (14)$$

با $F(t, E - E_i/\hbar)$ نسبت به $K(E)$ ، مانند یک "تابع دلتا" رفتار می‌کند. در این صورت، با استفاده از رابطه (۱۳-۶۲) از فصل ۱۳، می‌توانیم (۱۲) را به صورت زیر بنویسیم

$$\frac{\gamma\pi}{\hbar} t \int dE \delta(E - E_i) K(E) = \frac{\gamma\pi t}{\hbar} K(E = E_i) = \Gamma t \quad (15)$$

زیرا با مقایسه (۹) و (۱۳)، می‌توان به سادگی دید که

$$\frac{\gamma\pi}{\hbar} K(E = E_i) = \Gamma \quad (16)$$

بار دیگری می‌بریم که کاهش خطی ظاهرشده در رابطه (۱۰)، تنها زمانی معتبر است که t آن قدر بزرگ باشد که در (۱۴) صدق کند.
بدیهی است که شرایط (۱۱) و (۱۴) تنها وقتی با هم سازگارند که داشته باشیم

$$\Delta \gg \Gamma \quad (17)$$

به این ترتیب، برای شرط آمده در پانویست صفحه ۱۱۹، یک شکل کمی ارائه کرده‌ایم. در بقیه این مکمل، فرض خواهیم کرد که نامساوی (۱۷) برقرار است.

د) معادله انتگرال دیفرانسیلی هم‌ارز با معادله شرودینگر به سهولت می‌توان روابط (۱۳-۱۷) از فصل ۱۳ را به موردی که در اینجا بررسی می‌شود تطبیق داد. حالت سیستم در زمان t را می‌توان در پایه $\{|\varphi_i\rangle, |\alpha\rangle\}$ بسط داد

$$|\psi(t)\rangle = b_i(t)e^{-iE_i t/\hbar}|\varphi_i\rangle + \int d\alpha b(\alpha, t)e^{-iE t/\hbar}|\alpha\rangle \quad (18)$$

وقتی بردار حالت (۱۸) را در معادله شرودینگر قرار دهیم، با استفاده از فرضیات مذکور در بخشهای ۱۳-۲، ۴-۲، ۱۳-۴، ۲-ب، و سپس با محاسبه‌ای مشابه محاسبه بخش ۱۳-۲، فصل ۱۳، معادلات حرکت زیر را به دست می‌آوریم

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d}{dt} b_i(t) = \int d\alpha e^{i(E_i - E)\alpha t/\hbar} \langle \varphi_i | W | \alpha \rangle b(\alpha, t) & (19) \end{cases}$$

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d}{dt} b(\alpha, t) = e^{i(E - E_i)\alpha t/\hbar} \langle \alpha | W | \varphi_i \rangle b_i(t) & (20) \end{cases}$$

مسئله عبارت است از استفاده از این معادلات دقیق برای پیش‌بینی رفتار سیستم پس از یک زمان طولانی، تحت شرایط اولیه زیر

$$\begin{cases} b_i(0) = 1 & (21\text{-الف}) \\ b(\alpha, 0) = 0 & (21\text{-ب}) \end{cases}$$

فرضهای ساده‌کننده‌ای که برای W در نظر گرفتیم حاکی از آن‌اند که $d/dt b_i(t)$ فقط به $b(\alpha, t)$ ، و $d/dt b(\alpha, t)$ فقط به $b_i(t)$ بستگی دارد. در نتیجه، می‌توانیم با منظور کردن

شرط اولیه (۲۱-ب)، معادله (۲۰) را انتگرال‌گیری کنیم. با قرار دادن مقداری که به این طریق برای $b(\alpha, t)$ به دست می‌آوریم در معادله (۱۹)، معادله زیر که تحول $b_i(t)$ را توصیف می‌کند، به دست می‌آید

$$\frac{d}{dt} b_i(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int d\alpha \int_0^t dt' e^{i(E_i - E)(t-t')/\hbar} |\langle \alpha | W | \varphi_i \rangle|^2 b_i(t') \quad (22)$$

با استفاده از رابطه (۴) و انتگرال‌گیری بر روی β ، و نیز با استفاده از (۱۳)، به دست می‌آوریم

$$\frac{d}{dt} b_i(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dE \int_0^t dt' K(E) e^{i(E_i - E)(t-t')/\hbar} b_i(t') \quad (23)$$

به این ترتیب، توانسته‌ایم معادله‌ای به دست آوریم که فقط شامل $b_i(t)$ است. اما باید توجه شود که این معادله، دیگر یک معادله دیفرانسیل نیست، بلکه یک معادله انتگرال-دیفرانسیلی است: $d/dt b_i(t)$ به تمام "تاریخچه سیستم" بین زمانهای 0 و t بستگی دارد.

معادله (۲۳) دقیقاً هم‌ارز با معادله شرودینگر است. نمی‌دانیم چگونه آن را به طور دقیق حل کنیم. در بخشهای بعدی، دو روش تقریبی برای حل این معادله شرح خواهیم داد. یکی از آنها (بخش ۱۳-۴-۳) با نظریه مرتبه اول فصل ۱۳ معادل است؛ روش دیگر (بخش ۱۳-۴-۴) ما را قادر می‌سازد تا رفتار درازمدت سیستم را به طور رضایتبخش‌تری مطالعه کنیم.

۳. تقریب زمان-کوتاه. رابطه با نظریه اختلال مرتبه اول

اگر t خیلی بزرگ نباشد، یعنی، اگر $b_i(t)$ خیلی با $b_i(0) = 1$ متفاوت نباشد، می‌توانیم در طرف راست (۲۳)، $b_i(t')$ را با $b_i(0) = 1$ جایگزین کنیم. در این صورت، طرف راست به یک انتگرال دوگانه بر روی E و t' تبدیل می‌شود، و انتگرال‌گیری آنها هیچ مشکلی ایجاد نمی‌کند

$$-\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dE \int_0^t dt' K(E) e^{i(E_i - E)(t-t')/\hbar} \quad (24)$$

این محاسبه را به طور صریح انجام خواهیم داد، زیرا می‌توانیم از روی آن دو ثابت [که یکی از آنها Γ است که توسط (۹) تعریف می‌شود] معرفی کنیم که در روش کاملتری که در بخش ۱۳-۴-۴ توصیف خواهیم کرد، نقش مهمی ایفا می‌کنند.

ابتدا در رابطه (۲۴) بر روی t' انتگرال‌گیری می‌کنیم. بر طبق رابطه (۴۷) از پیوست ۲، حد

این انتگرال به‌ازای $t \rightarrow \infty$ عبارت است از تبدیل فوریه تابع پله‌ای هویساید. به‌طور دقیقتر

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t e^{i(E_i - E)\tau/\hbar} d\tau = \hbar \left[\pi \delta(E_i - E) + i \mathcal{P} \left(\frac{1}{E_i - E} \right) \right] \quad (25)$$

(قرار داده‌ایم: $t - t' = \tau$).

در واقع، برای اینکه در محاسبه (۲۴) از (۲۵) استفاده کنیم، لازم نیست که t را به سمت بینهایت میل دهیم. کافی است که \hbar/t خیلی کوچکتر از "پهنای" $\hbar\Delta$ ی $K(E)$ باشد، یعنی t خیلی بزرگتر از $1/\Delta$ باشد. بار دیگر شرط اعتبار (۱۴) را پیدا می‌کنیم. اگر این شرط برقرار باشد، در این صورت می‌توان از (۲۵) استفاده کرد و (۲۴) را به‌صورت زیر نوشت

$$-\frac{\pi}{\hbar} K(E = E_i) - \frac{i}{\hbar} \mathcal{P} \int_0^\infty \frac{K(E)}{E_i - E} dE \quad (26)$$

جمله اول (۲۶)، بنابر (۱۶)، همان $-\Gamma/2$ است. قرار خواهیم داد

$$\delta E = \mathcal{P} \int_0^\infty \frac{K(E)}{E_i - E} dE \quad (27)$$

بنابراین، انتگرال دوگانه (۲۴) برابر است با

$$-\frac{\Gamma}{2} - i \frac{\delta E}{\hbar} \quad (28)$$

وقتی در (۲۳) به جای $b_i(t')$ مقدار $b_i(0) = 1$ را قرار دهیم، این معادله [به‌منحصر اینکه (۱۴) برقرار باشد] به‌صورت زیر در می‌آید

$$\frac{d}{dt} b_i(t) = -\frac{\Gamma}{2} - i \frac{\delta E}{\hbar} \quad (29)$$

حل (۲۹)، با استفاده از شرط اولیه (۲۱-الف)، بسیار ساده است

$$b_i(t) = 1 - \left(\frac{\Gamma}{2} + i \frac{\delta E}{\hbar} \right) t \quad (30)$$

واضح است که این جواب تنها زمانی معتبر است که $|b_i(t)|$ با ۱ تفاوت جزئی داشته باشد، یعنی وقتی که

$$t \ll \frac{1}{\Gamma}, \frac{\hbar}{\delta E} \quad (31)$$

این، شرط اعتبار دیگر، (۱۱)، برای نظریهٔ اختلال مرتبهٔ اول است.

با استفاده از (۳۰)، می‌توانیم به آسانی احتمال $\mathcal{P}_{ii}(t) = |b_i(t)|^2$ برای اینکه سیستم باز هم در زمان t در حالت $|\varphi_i\rangle$ باشد، را محاسبه کنیم. اگر از جملاتی که Γ^2 و δE^2 را در بردارند صرف نظر کنیم، به دست می‌آوریم

$$\mathcal{P}_{ii}(t) = 1 - \Gamma t \quad (32)$$

به این ترتیب، تمامی نتایج را که در فصل ۱۳ به دست آوردیم می‌توانیم از معادلهٔ (۲۳) با قرار دادن $b_i(0)$ به جای $b_i(t')$ به دست آوریم. این معادله همچنین این امکان را برای ما فراهم کرده است که پارامتر δE ، که مفهوم فیزیکی آن بعداً بحث خواهد شد، را معرفی کنیم [توجه کنید که δE در بررسی فصل ۱۳ ظاهر نمی‌شود زیرا در آنجا فقط محاسبهٔ احتمال $|b_i(t)|^2$ مورد توجه ما بود، نه دامنهٔ احتمال $b_i(t)$].

۴. یک روش تقریبی دیگر برای حل معادلهٔ شرودینگر

یک تقریب بهتر این است که در رابطهٔ (۲۳) به جای جایگزینی $b_i(t')$ توسط $b_i(0)$ ، آن را با $b_i(t)$ جایگزین کنیم. برای مشاهدهٔ این مطلب، ابتدا انتگرال نسبت به E را که در طرف راست معادلهٔ دقیق (۲۳) ظاهر می‌شود، انجام می‌دهیم. به این ترتیب، تابعی از E_i و $t - t'$ به دست می‌آوریم

$$g(E_i, t - t') = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dE K(E) e^{i(E_i - E)(t - t')/\hbar} \quad (33)$$

که تنها وقتی مخالف صفر است که $t - t'$ بسیار کوچک باشد. در رابطهٔ (۳۳)، از حاصلضرب $K(E)$ ، که تغییرات کندی نسبت به E دارد (شکل ۱)، و یک تابع نمایی که تناوب آن نسبت به متغیر E برابر با $2\pi\hbar/(t - t')$ است، نسبت به E انتگرال می‌گیریم. اگر مقادیر t و t' را طوری انتخاب کنیم که این تناوب از پهنای $K(E)$ ، یعنی، $\hbar\Delta$ خیلی کوچکتر باشد، وقتی E تغییر می‌کند حاصلضرب این دو تابع دستخوش نوسانات متعددی می‌شود و انتگرال آن بر روی E قابل چشمپوشی است. در نتیجه، قدرمطلق $g(E_i, t - t')$ به ازای $0 \simeq t - t' \simeq \hbar/\Delta$ و همین‌که $1/\Delta \gg t - t'$ شود، قابل چشمپوشی می‌شود. این ویژگی بدین معنی است که، به ازای تمام t ها، تنها مقادیری از $b_i(t')$ که به طور معنی‌داری در طرف راست (۲۳) ظاهر می‌شوند آنهایی هستند که t' برای آنها خیلی نزدیک به t است ($t - t' \lesssim \hbar/\Delta$). در واقع، وقتی انتگرال‌گیری بر روی E

را انجام دهیم، طرف راست به صورت زیر در می آید

$$\int_0^t g(E_i, t-t') b_i(t') dt' \quad (34)$$

و مشاهده می کنیم که جمله $g(E_i, t-t')$ به محض اینکه $1/\Delta \gg (t-t')$ شود، عملاً مشارکت $b_i(t')$ را حذف می کند.

از این رو، مشتق $d/dt b_i(t)$ فقط خاطره بسیار کوتاهی از مقادیر پیشین $b_i(t)$ بین 0 و t دارد. در واقع، این مشتق فقط به مقادیر b_i در لحظات بلافاصله قبل از t بستگی دارد، و این مطلب برای تمام t ها صادق است. این ویژگی این امکان را فراهم می سازد که معادله انتگرال دیفرانسیلی (۲۳) را به یک معادله دیفرانسیل تبدیل کنیم. اگر $b_i(t)$ در یک بازه زمانی از مرتبه $1/\Delta$ ، خیلی کم تغییر کند، با قرار دادن $b_i(t)$ به جای $b_i(t')$ در رابطه (۳۴) فقط مرتکب خطای کوچکی می شویم. در این صورت داریم

$$b_i(t) \int_0^t g(E_i, t-t') dt' = - \left(\frac{\Gamma}{\gamma} + i \frac{\delta E}{\hbar} \right) b_i(t) \quad (35)$$

[برای نوشتن طرف راست رابطه (۳۵)، از این واقعیت استفاده کرده ایم که انتگرال $g(E_i, t-t')$ بر روی t' بنا به (۳۳)، همان انتگرال دوگانه (۲۴) است که در بخش ۱۳-۴-۳ محاسبه کردیم]. اکنون، بر طبق نتایج بخش ۱۳-۴-۳ (و همان طوری که بعداً خواهیم دید)، مشخصه مقیاس زمانی تحول $b_i(t)$ از مرتبه $1/\Gamma$ یا $\hbar/\delta E$ است. به این ترتیب، شرط اعتبار برای (۳۵) عبارت است از

$$\Gamma, \frac{\delta E}{\hbar} \ll \Delta \quad (36)$$

که قبلاً فرض کردیم برقرار است [(۱۷)].

بنابراین، با یک تقریب خوب و برای تمام t ها، معادله (۲۳) را می توان به صورت زیر نوشت

$$\frac{d}{dt} b_i(t) = - \left(\frac{\Gamma}{\gamma} + i \frac{\delta E}{\hbar} \right) b_i(t) \quad (37)$$

که جواب آن، با استفاده از رابطه (۲۱-الف) عبارت است از

$$b_i(t) = e^{-\Gamma t/\gamma} e^{-i\delta E t/\hbar} \quad (38)$$

واباشی یک حالت گسسته که به طور تشدیدی به ... ۱۸۳

به سادگی می‌توان دید که بسط محدود رابطه (۳۸) تا مرتبه اول نسبت به Γ و δE ، رابطه (۳۰) را می‌دهد.

یادداشت:

هیچ حد بالایی بر t اعمال نکرده‌ایم. از طرف دیگر، همان طوری که در بخش ۱۳-۴-۳ دیدیم، انتگرال $\int_0^t g(E_i, t-t') dt'$ که در (۳۵) ظاهر می‌شود تنها وقتی برابر با $-(\Gamma/2 + i\delta E/\hbar)$ است که $t \gg 1/\Delta$ باشد. برای زمانهای بسیار کوتاه، نظریه ارائه شده در اینجا همان محدودیتهای نظریه اختلال را دارد؛ ولی مزیت بزرگی که دارد این است که برای زمانهای طولانی معتبر است. ■

حال اگر عبارت (۳۸) برای $b_i(t)$ را در معادله (۲۰) قرار دهیم، معادله بسیار ساده‌ای به دست می‌آوریم که از آن می‌توان دامنه احتمال $b(\alpha, t)$ وابسته به حالت $|\alpha\rangle$ را تعیین کرد

$$b(\alpha, t) = \frac{1}{i\hbar} \langle \alpha | W | \varphi_i \rangle \int_0^t e^{-\Gamma t'/2} e^{i(E-E_i-\delta E)t'/\hbar} dt' \quad (39)$$

یعنی

$$b(\alpha, t) = \frac{\langle \alpha | W | \varphi_i \rangle}{\hbar} \frac{1 - e^{-t/2} e^{i(E-E_i-\delta E)t/\hbar}}{\frac{1}{\hbar}(E-E_i-\delta E) + i\frac{\Gamma}{2}} \quad (40)$$

معادلات (۳۸) و (۴۰) به ترتیب، واباشی حالت اولیه و "پر شدن" حالت‌های نهایی $|\alpha\rangle$ را توصیف می‌کنند. حال، محتوای فیزیکی این دو معادله را به تفصیل مطالعه می‌کنیم.

۵. بحث

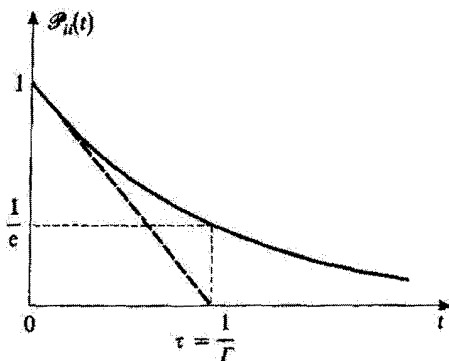
الف) طول عمر حالت گسسته

بنابر (۳۸)، داریم

$$\mathcal{P}_{ii}(t) = |b_i(t)|^2 = e^{-\Gamma t} \quad (41)$$

بنابراین، $\mathcal{P}_{ii}(t)$ به طور برگشت‌ناپذیر از ۱ $\mathcal{P}_{ii}(0) = 1$ کاهش می‌یابد و در $t \rightarrow \infty$ به سمت صفر میل می‌کند (شکل ۲). در این صورت اصطلاحاً گفته می‌شود که حالت گسسته اولیه با عمر متناهی τ است؛ τ ثابت زمانی تابع نمایی شکل ۲ است

$$\tau = \frac{1}{\Gamma} \quad (42)$$



شکل ۲ تغییرات احتمال یافتن سیستم در لحظه t در حالت گسسته (φ_i) نسبت به زمان. یک کاهش نمایی به صورت $e^{-t/\tau}$ به دست می‌آوریم، که قاعده طلایی فرمی برای آن مماس در مبدأ را می‌دهد (این مماس با خط چین نشان داده شده است).

این رفتار برگشت‌ناپذیر، با نوسانات سیستم (فرمول رابی) بین دو حالت گسسته، وقتی سیستم تحت تأثیر یک اختلال تشدیدی که این دو حالت را به هم جفت می‌کند قرار دارد، کاملاً در تضاد است.

(ب) انتقال حالت گسسته، بر اثر جفت‌شدگی با پیوستار

اگر از $b_i(t)$ به $c_i(t)$ برویم [فرمول (۱۳-۱۴) از فصل ۱۳]، از رابطه (۳۸) به دست می‌آوریم

$$c_i(t) = e^{-t/\tau} e^{-i(E_i + \delta E)t/\hbar} \quad (43)$$

یادآور می‌شویم که در غیاب جفت‌شدگی W ، خواهیم داشت

$$c_i(t) = e^{-iE_i t/\hbar} \quad (44)$$

بنابراین، جفت‌شدگی با پیوستار، به علاوه بر کاهش نمایی، $e^{-t/\tau}$ عامل یک انتقال در انرژی حالت گسسته نیز هست که از E_i به $E_i + \delta E$ می‌رود. این، تغییر کمیت δE است که در بخش ۱۳-۴ معرفی کردیم.

حال، رابطه (۲۷) برای δE را دقیقتر تجزیه و تحلیل می‌کنیم. با قرار دادن تعریف (۱۳) از $K(E)$ در (۲۷)، به دست می‌آوریم

$$\delta E = \mathcal{P} \int_0^{\infty} \frac{dE}{E_i - E} \int d\beta \rho(\beta, E) |(\beta, E|W|\varphi_i)|^2 \quad (45)$$

یا، با استفاده از رابطه (۴) و قرار دادن $\langle \alpha |$ به جای $\langle \beta, E |$ داریم

$$\delta E = \mathcal{P} \int d\alpha \frac{|\langle \alpha | W | \varphi_i \rangle|^2}{E_i - E} \quad (46)$$

تأثیر یک حالت خاص $|\alpha\rangle$ از پیوستار که برای آن $E \neq E_i$ است، در این انتگرال برابر است با

$$\frac{|\langle \alpha | W | \varphi_i \rangle|^2}{E_i - E} \quad (47)$$

عبارت (۴۷) یک عبارت آشنا در نظریه اختلال ماناست [فرمول (۱۱-۳۰) از فصل ۱۱]. رابطه (۴۷) معرف انتقال انرژی حالت $|\varphi_i\rangle$ بر اثر جفت‌شدگی با حالت $|\alpha\rangle$ ، تا مرتبه دوم نسبت به W است. δE صرفاً عبارت است از مجموع انتقالهای ناشی از حالت‌های مختلف $|\alpha\rangle$ پیوستار. ممکن است تصور کنیم که برای حالت‌های $|\alpha\rangle$ که در آنها $E = E_i$ است، مشکلی بروز کند. در واقع، حضور قسمت اصلی \mathcal{P} در (۴۶) حاکی از آن است که تأثیر حالت‌های $|\alpha\rangle$ که بلافاصله در بالای $|\varphi_i\rangle$ قرار دارند، تأثیر حالت‌هایی را که بلافاصله در پایین آن هستند، جبران می‌کند. به طور خلاصه:

۱. جفت‌شدگی $|\varphi_i\rangle$ با حالت‌های $|\alpha\rangle$ یا همان انرژی، عامل عمر متناهی $|\varphi_i\rangle$ است [تابع $\delta(E_i - E)$ از فرمول (۲۵) در عبارت Γ وارد می‌شود].
۲. جفت‌شدگی $|\varphi_i\rangle$ با حالت‌های $|\alpha\rangle$ با انرژی‌های متفاوت، عامل انتقال انرژی حالت $|\varphi_i\rangle$ است. این انتقال را می‌توان با نظریه اختلال مانا محاسبه کرد (این مطلب از ابتدا روشن نبود). یادداشت:

در مورد خاص گسیل خودبه‌خودی یک فوتون توسط یک اتم، δE معرف انتقال تراز اتم مورد مطالعه بر اثر جفت‌شدگی با پیوستار حالت‌های نهایی (یک اتم در یک حالت گسسته دیگر، در حضور یک فوتون) است. اختلاف بین انتقال‌های δE مربوط به حالت‌های $2s_{1/2}$ و $2p_{1/2}$ اتم هیدروژن، "انتقال لمب" است [مکمل ۱۰ از فصل ۵، بخش ۵-۱۰-۳-د و فصل ۱۲، بخش ۱۲-۳-۳-ب یادداشت ۴]. ■

ج) توزیع انرژی حالت‌های نهایی

وقتی حالت گسسته واپاشیده شد، یعنی، وقتی $t \gg 1/T$ ، حالت نهایی سیستم به پیوستار حالت‌های نهایی $|\alpha\rangle$ تعلق دارد. مطالعه توزیع انرژی حالت‌های نهایی ممکن جالب توجه است. به عنوان مثال، در گسیل خودبه‌خودی یک فوتون توسط یک اتم، این توزیع انرژی، همان توزیع انرژی

فوتونی است که به هنگام برگشتن اتم از تراز برانگیخته به یک تراز پایتتر گسیل می‌شود (پهنای طبیعی خطوط طیفی).

وقتی $t \gg 1/\Gamma$ باشد. تابع نمایی که در صورت (۴۰) ظاهر می‌شود عملاً صفر است. در این صورت داریم

$$|b(\alpha, t)|^2 \underset{t \gg 1/\Gamma}{\sim} |\langle \alpha | W | \varphi_i \rangle|^2 \frac{1}{(E - E_i - \delta E)^2 + \hbar^2 \Gamma^2 / 4} \quad (48)$$

$|b(\alpha, t)|^2$ در واقع معرف یک چگالی احتمال است. احتمال یافتن سیستم، بعد از واپاشی، در یک گروه از حالت‌های نهایی که با بازه‌های dE_f و $d\beta_f$ حول E_f و β_f مشخص می‌شوند، را می‌توان مستقیماً از (۴۸) محاسبه کرد

$$d\mathcal{P}(\beta_f, E_f, t) = |\langle \beta_f, E_f | W | \varphi_i \rangle|^2 \rho(\beta_f, E_f) \frac{1}{(E_f - E_i - \delta E)^2 + \hbar^2 \Gamma^2 / 4} d\beta_f dE_f \quad (49)$$

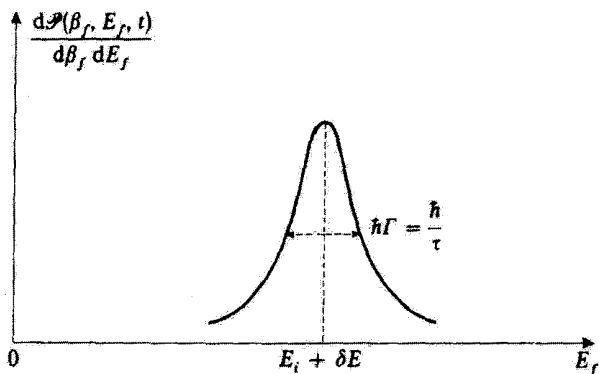
حال، بستگی چگالی احتمال به E_f را بررسی می‌کنیم

$$\frac{d\mathcal{P}(\beta_f, E_f, t)}{d\beta_f dE_f}$$

چون $|\langle \beta_f, E_f | W | \varphi_i \rangle|^2 \rho(\beta_f, E_f)$ وقتی E_f در بازه‌ای از مرتبه $\hbar\Gamma$ تغییر می‌کند، عملاً ثابت می‌ماند، تغییرات چگالی احتمال نسبت به E_f اساساً با تابع زیر تعیین می‌شود

$$\frac{1}{(E_f - E_i - \delta E)^2 + \hbar^2 \Gamma^2 / 4} \quad (50)$$

و در نتیجه، منحنی نمایش آن همانند منحنی شکل ۳ است. توزیع انرژی حالت‌های نهایی به‌ارای $E_f = E_i + \delta E$ دارای یک بیشینه است، و این هنگامی است که انرژی حالت نهایی با انرژی حالت اولیه $|\varphi_i\rangle$ برابر باشد که برای انتقال δE تصحیح شده است. شکل توزیع، شکل یک منحنی لورنتز با پهنای $\hbar\Gamma$ است، که در آن $\hbar\Gamma$ "پهنای طبیعی" حالت $|\varphi_i\rangle$ نامیده می‌شود. بنابراین، یک پاشیدگی در انرژی حالت‌های نهایی ظاهر می‌شود. هر چه $\hbar\Gamma$ بزرگتر باشد (یعنی، هر چه عمر $\tau = 1/\Gamma$ حالت گسسته کوتاهتر باشد)، پاشیدگی بزرگتر است. به عبارت دقیقتر



شکل ۳ توزیع انرژی حالت‌های نهایی سیستم بعد از واباشی حالت گسسته. یک توزیع لورنتز متمرکز در $E_i + \delta E$ به دست می‌آوریم (انرژی حالت گسسته با انتقال δE ناشی از پیوند با بیوستار، تصحیح می‌شود). هر چه عمر T حالت گسسته کوتاهتر باشد، توزیع پهنتر است (رابطه عدم قطعیت زمان-انرژی).

$$\Delta E_f = \hbar \Gamma = \frac{\hbar}{\tau} \quad (51)$$

بار دیگر به تشابه بین رابطه (۵۱) و رابطه عدم قطعیت زمان-انرژی توجه کنید. در حضور جفت‌شدگی W ، حالت $|\varphi_i\rangle$ را فقط می‌توان در خلال یک زمان منتهای، از مرتبه عمر T آن، مشاهده کرد. وقتی می‌خواهیم انرژی آن را با اندازه‌گیری انرژی حالت نهایی سیستم تعیین کنیم، عدم قطعیت ΔE نمی‌تواند خیلی کوچکتر از \hbar/T باشد.

مرجع

مقاله اصلی:

Weisskopf and Wigner (2.33).

مکمل ۵

تمرینات

۱. یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی به جرم m ، بسامد زاویه‌ای ω و بار q را در نظر بگیرید. فرض کنید $\langle \varphi_n |$ و $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ ویژه‌حالتها و ویژه‌مقدارهای هامیلتونی H_0 این نوسانگر باشند.

به ازای $t < 0$ ، نوسانگر در حالت پایه $|\varphi_0\rangle$ است. در زمان $t = 0$ ، نوسانگر را تحت یک "تپ" میدان الکتریکی به مدت τ قرار می‌دهیم. احتمال متناظر را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$W(t) = \begin{cases} -q\mathcal{E}X & 0 \leq t \leq \tau \\ 0 & t < 0 \text{ و } t > \tau \end{cases}$$

\mathcal{E} دامنه میدان و X مشاهده‌پذیر مکان است. فرض کنید \mathcal{P}_{0n} احتمال یافتن نوسانگر در حالت $|\varphi_n\rangle$ پس از تپ باشد.

الف) \mathcal{P}_{01} را با استفاده از نظریه اختلال وابسته به زمان مرتبه اول محاسبه کنید. اگر ω ثابت باشد، تغییرات \mathcal{P}_{01} نسبت به τ چگونه است؟

ب) نشان دهید که برای به دست آوردن \mathcal{P}_{02} باید محاسبه نظریه اختلال وابسته به زمان را حداقل تا مرتبه دوم ادامه داد. \mathcal{P}_{02} را تا این مرتبه اختلال محاسبه کنید.

ج) عبارات دقیقی برای \mathcal{P}_{01} و \mathcal{P}_{02} بنویسید که در آن عملگر انتقال به کار رفته در مکمل ۶ از فصل ۵، به طور صریح ظاهر شده باشد. با بسط محدود این عبارات برحسب توانهای \mathcal{E} ، نتایج سوالات قبلی را پیدا کنید.

۲. دو اسپین $1/2$ ، S_1 و S_2 را که توسط برهم‌کنشی به شکل $a(t)S_{1z} \cdot S_{2z}$ جفت می‌شوند، در نظر بگیرید؛ $a(t)$ تابعی از زمان است که وقتی $|t|$ به سمت بینهایت میل می‌کند، به صفر نزدیک می‌شود، و تنها در داخل بازه‌ای که پهنای آن، حول $t = 0$ ، از مرتبه τ است مقادیر غیر قابل چشمپوشی (از مرتبه a_0) می‌پذیرد.

الف) در $t = -\infty$ ، سیستم در حالت $|+, -\rangle$ (یک ویژه‌حالت متعلق به S_{1z} و S_{2z} با ویژه‌مقدارهای $+\hbar/2$ و $-\hbar/2$) است. حالت سیستم را در $t = +\infty$ بدون تقریب، محاسبه کنید. نشان دهید که احتمال $(+ \rightarrow - \rightarrow -)$ ی یافتن سیستم، در $t = +\infty$ ، در حالت $(+, +)$ فقط به انتگرال $\int_{-\infty}^{+\infty} a(t)dt$ بستگی دارد.

ب) مطلوب است محاسبه $\mathcal{P}(+ - \rightarrow - +)$ با استفاده از نظریه اختلال وابسته به زمان مرتبه اول. با مقایسه این نتایج و نتایج سؤال قبل، در شرایط اعتبار یک چنین تقریبی بحث کنید.
 ج) حال فرض کنید که این دو اسپین همچنین با میدان مغناطیسی ایستای B_0 که موازی Oz است نیز برهم‌کنش داشته باشند. هامیلتونی زیمان متناظر را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$H_0 = -B_0 (\gamma_1 S_{1z} + \gamma_2 S_{2z})$$

که در آن γ_1 و γ_2 نسبت‌های ژیرومغناطیسی دو اسپین هستند که فرض می‌کنیم متفاوت‌اند. فرض کنید که $a(t) = a_0 e^{-t/\tau}$ باشد. $\mathcal{P}(+ - \rightarrow - +)$ را با استفاده از نظریه اختلال وابسته به زمان مرتبه اول، محاسبه کنید. با ثابت فرض کردن a_0 و τ ، در تغییرات $\mathcal{P}(+ - \rightarrow - +)$ نسبت به B_0 بحث کنید.

۳. گذارهای دوفوتونی بین ترازهای ناهمفاصله

یک تراز اتمی با تکانه زاویه‌ای $J = 1$ را در نظر بگیرید که تحت تأثیر دو میدان الکتریکی و مغناطیسی ایستاست که هر دو موازی Oz هستند. می‌توان نشان داد که در این صورت، سه تراز انرژی ناهمفاصله به دست می‌آید. ویژه‌حالت‌های $|\varphi_M\rangle$ متعلق به $(M = -1, 0, +1)$ ، با انرژیهای E_M با آنها متناظرند. قرار می‌دهیم $E_1 - E_0 = \hbar\omega_0$ ، $E_0 - E_{-1} = \hbar\omega'_0$ ($\omega_0 \neq \omega'_0$)، $E_1 - E_0 = \hbar\omega_0$. این اتم تحت تأثیر یک میدان بسامد رادیویی که با بسامد زاویه‌ای ω در صفحه xOy می‌چرخد نیز قرار دارد. اختلال $W(t)$ ی متناظر را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$W(t) = \frac{\omega_1}{\sqrt{2}} (J_+ e^{-i\omega t} + J_- e^{i\omega t})$$

که در آن ω_1 ثابتی است متناسب با دامنه میدان چرخان.
 الف) قرار می‌دهیم (با همان نمادگذاری فصل ۱۳)

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{M=-1}^{+1} b_M(t) e^{-iE_M t/\hbar} |\varphi_M\rangle$$

دستگاه معادلات دیفرانسیلی را بنویسید که $b_M(t)$ در آنها صدق کند.

ب) فرض کنید که در زمان $t = 0$ ، سیستم در حالت $|\varphi_{-1}\rangle$ باشد. نشان دهید که اگر بخواهیم $b_1(t)$ را با نظریه اختلال وابسته به زمان محاسبه کنیم، باید محاسبه را تا مرتبه دوم ادامه دهیم. $b_1(t)$ را تا این مرتبه اختلال حساب کنید.

ج) به ازای t ثابت، تغییرات احتمال $|b_1(t)|^2 = \mathcal{P}_{-1,+1}(t)$ ی یافتن سیستم در حالت $|\varphi_1\rangle$ در زمان t ، نسبت به ω چگونه است؟ نشان دهید که یک تشدید، نه تنها به ازای $\omega = \omega_0$ و $\omega = \omega'_0$ ، بلکه به ازای $\omega = (\omega_0 + \omega'_0)/2$ نیز ظاهر می شود. یک تعبیر ذره ای برای این تشدید ارائه دهید.

۴. بار دیگر تمرین ۵ از مکمل ۸ از فصل ۱۱ را در نظر بگیرید و با به کار بردن نمادگذاری آن، فرض کنید که میدان \mathbf{B} با بسامد زاویه ای ω نوسان می کند و می توان آن را به صورت $\mathbf{B}_0(t) = \mathbf{B}_0 \cos \omega t$ نوشت. فرض کنید که $b = 2a$ ، و ω با هیچ کدام از بسامدهای زاویه ای بور سیستم برابر نیست (برانگیختگی غیر تشدید).
تانسور پذیرفتاری χ ، با مؤلفه های $\chi_{ij}(\omega)$ را به صورت زیر تعریف می کنیم

$$\langle M_i \rangle(t) = \sum_j \text{Re}[\chi_{ij}(\omega) B_{0j} e^{i\omega t}]$$

که در آن $i, j = x, y, z$. با استفاده از یک روش، مشابه با روشی که در بخش ۱۳-۱-۲ از مکمل ۱، فصل ۱۳ به کار بردیم، مؤلفه های $\chi_{ij}(\omega)$ را محاسبه کنید. با قرار دادن $\omega = 0$ ، نتایج تمرین ۵ از مکمل ۸، فصل ۱۱ را بیابید.

۵. اثر اولتر-تاونز

سیستم سه تازی: $|\varphi_1\rangle$ ، $|\varphi_2\rangle$ و $|\varphi_3\rangle$ ، با انرژیهای E_1 ، E_2 و E_3 را در نظر بگیرید. فرض کنید $E_3 > E_2 > E_1$ و $E_3 - E_2 \ll E_2 - E_1$ باشد.

این سیستم با یک میدان مغناطیسی که با بسامد زاویه ای ω در حال نوسان است، برهم کنش می کند. فرض کنید که پاریته حالت های $|\varphi_2\rangle$ و $|\varphi_3\rangle$ یکسان و مخالف پاریته $|\varphi_1\rangle$ است، به طوری که هامیلتونی برهم کنش $W(t)$ با میدان مغناطیسی نوسانی بتواند $|\varphi_2\rangle$ و $|\varphi_3\rangle$ را به $|\varphi_1\rangle$ متصل کند. فرض کنید که، در پایه سه حالت $|\varphi_1\rangle$ ، $|\varphi_2\rangle$ ، $|\varphi_3\rangle$ که به همین ترتیب آرایش یافته اند، $W(t)$ با ماتریس زیر نمایش داده شود

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \omega_1 \sin \omega t \\ 0 & \omega_1 \sin \omega t & 0 \end{bmatrix}$$

که در آن ω_1 ثابتی متناسب با دامنه میدان نوسانی است.

الف) قرار دهید (با همان نمادگذاری فصل ۱۳)

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{i=1}^2 b_i(t) e^{-iE_i t/\hbar} |\varphi_i\rangle$$

دستگاه معادلات دیفرانسیلی را بنویسید که $b_i(t)$ در آنها صدق کند.

ب) فرض کنید ω بسیار نزدیک به $\omega_{21} = E_2 - E_1/\hbar$ باشد. با تقریبهایی مشابه تقریبهای به کار رفته در مکمل ۳ از فصل ۱۳، از دستگاه معادلات قبلی، با در نظر گرفتن شرایط اولیه

$$b_1(0) = b_2(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad b_3(0) = 0$$

انتگرال بگیرید (در طرف راست معادلات دیفرانسیل، از جملاتی که ضرایب آنها، سریعاً تغییر می‌کنند $e^{\pm i(\omega + \omega_{21})t}$ ، صرف نظر، و فقط جملاتی را نگه دارید که ضرایب آنها ثابت باشند یا مانند $e^{\pm i(\omega - \omega_{21})t}$ بسیار کند تغییر کنند).

ج) مؤلفه D_z گشتاور دوقطبی الکتریکی سیستم در امتداد Oz ، در پایه سه حالت $|\varphi_1\rangle$ ، $|\varphi_2\rangle$ ، $|\varphi_3\rangle$ که به همین ترتیب آرایش یافته‌اند، با ماتریس زیر تمایش داده می‌شود

$$\begin{bmatrix} 0 & d & 0 \\ d & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

که در آن d یک ثابت حقیقی است (D_z یک عملگر فرد است و می‌تواند فقط حالت‌هایی با پارامترهای متفاوت را به هم مربوط کند).

با استفاده از بردار $|\psi(t)\rangle$ که آن را در b محاسبه کردیم، $(D_z)(t) = \langle \psi(t) | D_z | \psi(t) \rangle$ را محاسبه کنید.

نشان دهید که تحول زمانی $(D_z)(t)$ با برهم‌نهی از جملات سینوسی داده می‌شود. بسامدهای ν_k و شدتهای نسبی π_k این جملات را تعیین کنید.

اینها بسامدهایی هستند که می‌توانند توسط یک اتم که در یک میدان الکتریکی نوسانی موازی با Oz قرار دارد، جذب شوند. تغییرات این طیف جذبی را، برای ω ی ثابت و مساوی با ω_{21} ، وقتی ω_1 از صفر افزایش می‌یابد، توصیف کنید. نشان دهید که حضور میدان مغناطیسی که با

بسامد $\omega_{۲۲}/2\pi$ نوسان می‌کند، خط جذبی دوقطبی الکتریکی را در بسامد $\omega_{۲۱}/2\pi$ می‌شکافد، و جدایی دو مؤلفهٔ دوتایی، با دامنهٔ میدان مغناطیسی نوسانی متناسب است (دوتایی اولتر-تاوونز). اگر $\omega - \omega_{۲۲}$ را، وقتی ω_1 ثابت است، تغییر دهیم چه اتفاقی می‌افتد؟

۶. پراکندگی کشسان توسط یک ذرهٔ مقید. ضریب شکل

ذرهٔ (a) در حالت مقید $|\varphi_0\rangle$ که توسط تابع موج $\varphi_0(\mathbf{r}_a)$ ، جایگزیده حول نقطهٔ O، توصیف می‌شود، را در نظر بگیرید. یک باریکه از ذرات (b) به جرم m، تکانهٔ $\hbar\mathbf{k}_i$ ، انرژی $E_i = \hbar^2\mathbf{k}_i^2/2m$ و تابع موج $1/(2\pi)^{3/2} e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_b}$ را به این ذرهٔ (a) می‌تابانیم. هر یک از ذرات (b) ی باریکه با ذرهٔ (a) برهم‌کنش می‌کند. انرژی پتانسیل متناظر، W، فقط به مکان نسبی $(\mathbf{r}_b - \mathbf{r}_a)$ ی دو ذره بستگی دارد.

الف) عنصر ماتریسی متعلق به $W(\mathbf{R}_b - \mathbf{R}_a)$ را بین دو حالتی که در آنها ذرهٔ (a) در همان حالت $|\varphi_0\rangle$ است و ذرهٔ (b) از حالت $|\mathbf{k}_i\rangle$ به حالت $|\mathbf{k}_f\rangle$ می‌رود، یعنی عنصر ماتریسی زیر را محاسبه کنید

$$\langle a : \varphi_0 ; b : \mathbf{k}_f | W(\mathbf{R}_b - \mathbf{R}_a) | a : \varphi_0 ; b : \mathbf{k}_i \rangle$$

عبارت مربوط به این عنصر ماتریسی باید شامل تبدیل فوریهٔ $\overline{W}(\mathbf{k})$ ی پتانسیل $W(\mathbf{r}_b - \mathbf{r}_a)$ ، یعنی

$$W(\mathbf{r}_b - \mathbf{r}_a) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \overline{W}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_b - \mathbf{r}_a)} d^3k$$

باشد.

ب) فرایندهای پراکندگی را در نظر بگیرید که در آنها ذرهٔ (b)، تحت تأثیر برهم‌کنش W، در یک جهت معین پراکنده می‌شود و ذرهٔ (a) بعد از فرایند پراکندگی در همان حالت کوانتومی $|\varphi_0\rangle$ باقی می‌ماند (پراکندگی کشسان).

با استفاده از یک روش مشابه با روشی که در فصل ۱۳ به‌کار بردیم [یادداشت ۲ از بخش ۱۳-۳-۳-ب را ببینید] سطح مقطع پراکندگی کشسان ذرهٔ (b) توسط ذرهٔ (a) در حالت $|\varphi_0\rangle$ را، در تقریب بورن، محاسبه کنید.

نشان دهید که این سطح مقطع را می‌توان از ضرب سطح مقطع پراکندگی توسط پتانسیل $W(\mathbf{r})$ (در تقریب بورن) در ضریبی که حالت $|\varphi_0\rangle$ را مشخص می‌کند، و اصطلاحاً "ضریب شکل" نامیده می‌شود، به‌دست آورد.

نشان دهید که اگر تبدیل فوریهٔ $\overline{W}(\mathbf{k})$ ی $W(\mathbf{r})$ معلوم باشد، با مطالعهٔ تغییرات سطح مقطع

نسبت به زاویه پراکندگی، می‌توان به‌طور تجربی چگالی احتمال $|\varphi_0(\mathbf{r}_0)|^2$ یا وابسته به حالت $|\varphi_0\rangle$ را تعیین کرد.

۷. یک مدل ساده از اثر فوتوالکتریک

در یک مسئله یک‌بعدی، ذره‌ای به جرم m را که در پتانسیلی به شکل $V(x) = -\alpha\delta(x)$ قرار دارد در نظر بگیرید؛ α یک ثابت حقیقی مثبت است.

یادآور می‌شویم (تمرینات ۲ و ۳ مکمل K، فصل ۱، جلد اول، کتاب فارسی) که در چنین پتانسیلی، یک حالت مقید منفرد با انرژی منفی $E_0 = -m\alpha^2/2\hbar^2$ ، وابسته به تابع موج بهنجار $\varphi_0(x) = \sqrt{\frac{m\alpha}{\hbar^2}} e^{-m\alpha/\hbar^2|x|}$ وجود دارد. از طرف دیگر، به‌ازای هر مقدار مثبت انرژی $E = \hbar^2 k^2/2m$ ، دو تابع موج مانا وجود دارند که، به ترتیب با یک ذره فرودی از چپ یا از راست متناظرند. به‌عنوان مثال، اولین ویژه‌تابع عبارت است از

$$\chi_k(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[e^{ikx} - \frac{1}{1 + \frac{i\hbar^2 k}{m\alpha}} e^{-ikx} \right] & x < 0 \quad \text{به‌ازای} \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{i\hbar^2 k}{1 + \frac{i\hbar^2 k}{m\alpha}} e^{ikx} & x > 0 \quad \text{به‌ازای} \end{cases}$$

الف) نشان دهید که $\chi_k(x)$ در رابطهٔ تعامدی زیر (به مفهوم تعمیم‌یافتهٔ آن) صدق می‌کند

$$\langle \chi_k | \chi_{k'} \rangle = \delta(k - k')$$

می‌توانیم از رابطهٔ زیر [فرمول (۴۷) از پیوست ۲] استفاده کنیم

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} e^{iqx} dx &= \int_0^{\infty} e^{-iqx} dx = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\epsilon + iq} \\ &= \pi\delta(q) - i\mathcal{P}\left(\frac{1}{q}\right) \end{aligned}$$

مطلوب است محاسبهٔ چگالی حالتها، $\rho(E)$ ، برای انرژی مثبت E .

ب) عنصر ماتریسی $\langle \chi_k | X | \varphi_0 \rangle$ از مشاهده‌پذیر مکان X را بین حالت مقید $|\varphi_0\rangle$ و حالت با انرژی مثبت $|\chi_k\rangle$ که تابع موج آن را در بالا دادیم محاسبه کنید.

ج) ذره، که آن را باردار (q) فرض می‌کنیم، با یک میدان الکتریکی نوسانی با بسامد زاویه‌ای ω ، برهم‌کنش می‌کند. اختلال متناظر عبارت است از

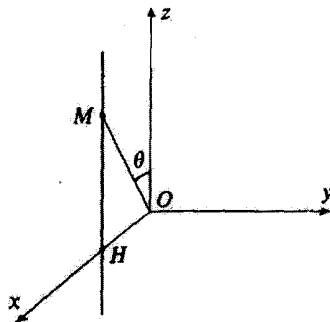
$$W(t) = -q\mathcal{E}X \sin \omega t$$

که در آن \mathcal{E} یک ثابت است.

ذره ابتدا در حالت مقید (φ_0) قرار دارد. فرض کنید که $\hbar\omega > -E_0$ باشد. با استفاده از نتایج بخش ۱۳-۳ از فصل ۱۳ [مخصوصاً، فرمول (۶۷-۱۳) را ببینید]، احتمال گذار w در واحد زمان به یک حالت دلخواه با انرژی مثبت را محاسبه کنید (اثر فوتوالکتریک یا اثر فوتو یونش). تغییرات w بر حسب ω و \mathcal{E} چگونه است؟

۸. انحراف یک تراز اتمی بر اثر برخورد با اتمهای گاز نادر

اتم ساکن A در مبدأ دستگاه مختصات $Oxyz$ را در نظر بگیرید (شکل زیر را ببینید). این اتم A در تراز $J = 1$ قرار دارد که سه کت راست‌هنگار $|M = -1, 0, +1\rangle$ ، که ویژه‌حالت‌های J_z با ویژه‌مقدارهای $M\hbar$ هستند، با آن متناظرند.



اتم دیگر B ، در تراز $J = 1$ با تکانه زاویه‌ای صفر، در صفحه xOz دارای یک حرکت مستقیم‌الخط یکنواخت است: این اتم با سرعت v در امتداد یک خط مستقیم موازی با Oz و به فاصله b از این محور حرکت می‌کند (b ، "پارامتر برخورد" است). مبدأ زمان را لحظه‌ای اختیار می‌کنیم که B به نقطه H از محور Ox ($OH = b$) می‌رسد. بنابراین، در لحظه t ، اتم B در نقطه M است و در آن $HM = vt$. زاویه بین OM و Oz را با θ نمایش می‌دهیم.

مدل قبلی، که درجه‌های آزادی خارجی دو اتم را به‌طور کلاسیک در نظر می‌گیرد، محاسبه ساده‌ای اثر برخورد با اتم B (که به‌عنوان مثال یک اتم گاز نادر در حالت پایه است) روی درجات آزادی داخلی اتم A (که به‌طور کوانتومی بررسی می‌شود) را امکان‌پذیر می‌سازد. می‌توان نشان

داد که، به خاطر نیروهای واندروالس بین دو اتم (مکمل ۳ از فصل ۱۱)، اتم A تحت تأثیر اختلال W قرار می‌گیرد که بر درجات آزادی داخلی آن اثر می‌کند و با رابطه زیر داده می‌شود.

$$W = \frac{C}{r^6} J_u^2$$

که در آن C یک ضریب ثابت، r فاصله بین دو اتم، و J_u مؤلفهٔ تکانهٔ زاویه‌ای L ی اتم A روی محور OM است که دو اتم را به هم وصل می‌کند.

الف) W را برحسب $C, v, b, t, J_x, J_y, J_z, J_{\pm} = J_x \pm iJ_y$ بنویسید. پارامتر بدون بُعد $\tau = vt/b$ را اختیار کنید.

ب) فرض کنید که میدان مغناطیسی خارجی وجود ندارد، به طوری که سه حالت $|0\rangle, |+\rangle, |-\rangle$ اتم A دارای یک انرژی هستند.

قبل از برخورد، یعنی در $t = -\infty$ ، اتم A در حالت $|1\rangle$ قرار دارد. با استفاده از نظریهٔ اختلال وابسته به زمان مرتبهٔ اول، احتمال $\mathcal{P}_{-1,+1}$ ی یافتن اتم A ، بعد از برخورد (یعنی در $t = +\infty$)، در حالت $|+1\rangle$ را محاسبه کنید. تغییرات $\mathcal{P}_{-1,+1}$ را نسبت به b و v مورد بحث قرار دهید. همچنین، $\mathcal{P}_{-1,0}$ را محاسبه کنید.

ج) حال فرض کنید که میدان ایستای \mathbf{B}_0 موازی با Oz وجود دارد، به طوری که سه حالت $|M\rangle$ دارای یک انرژی اضافی $M\hbar\omega_0$ هستند (اثر زیمان)، که در آن ω_0 بسامد زاویه‌ای لارمور در میدان \mathbf{B}_0 است.

۱. با میدانهای مغناطیسی معمولی (گاوس $10^2 \sim B_0$)، رادیان/ثانیه $10^9 \simeq \omega_0$ ؛ b از مرتبهٔ 5Å ، و v از مرتبهٔ $5 \times 10^2 \text{m}\cdot\text{sec}^{-1}$ است. نشان دهید که تحت این شرایط، نتایج سؤال b معتبر می‌ماند.

۲. بدون وارد شدن به محاسبات مفصل، توضیح دهید که برای مقادیر بسیار بزرگتر B_0 چه اتفاقی می‌افتد. با شروع از چه مقدار ω_0 (به شرطی که b و v دارای همان مقادیر داده شده در α باشند) دیگر نتایج b معتبر نخواهد بود؟

د) بدون وارد شدن به محاسبات مفصل نشان دهید که چگونه می‌توان احتمالهای انحراف $\mathcal{P}_{-1,+1}$ و $\mathcal{P}_{-1,0}$ را برای اتم A واقع در گازی از اتمهای B را محاسبه کرد؛ گاز در دمای T در تعادل ترمودینامیکی است، و تعداد n اتمهای واحد حجم آن آن قدر کوچک است که می‌توان فقط برخوردهای دوتایی را در نظر گرفت.

تبصره:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\tau}{(1+\tau^2)^2} = \frac{5\pi}{16}$$

۹. احتمال گذار در واحد زمان تحت تأثیر اختلال کتره‌ای. مدل واهلش ساده یک سیستم فیزیکی، تحت تأثیر اختلال $W(t)$ ، در زمان $t = 0$ در ویژه‌حالت $|\varphi_i\rangle$ هامیلتونی H_0 خود است. فرض کنید $\mathcal{P}_{if}(t)$ احتمال یافتن سیستم در زمان t ، در ویژه‌حالت دیگر متعلق به H_0 ، $|\varphi_f\rangle$ ، باشد. احتمال گذار در واحد زمان، $w_{if}(t)$ ، را به صورت $w_{if}(t) = d/dt \mathcal{P}_{if}(t)$ تعریف می‌کنیم.

الف) نشان دهید که تا مرتبه اول در نظریه اختلال، داریم

$$w_{if}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t e^{i\omega_{fi}\tau} W_{fi}(t) W_{fi}^*(t - \tau) d\tau + \text{c.c.} \quad (1)$$

که در آن $\hbar\omega_{fi} = E_f - E_i$ (همان نمادگذاری فصل ۱۳).

ب) تعداد بسیار زیاد \mathcal{N} از سیستم‌های یکسان (k) را، که با همدیگر برهم‌کنش متقابل ندارند در نظر بگیرید ($k = 1, 2, \dots, \mathcal{N}$). هر یک از این سیستمها محیط میکروسکوپیکی متفاوتی دارد، و در نتیجه، اختلال $W^{(k)}(t)$ متفاوتی را "می‌بیند". البته، شناخت هر یک از اختلالهای $W^{(k)}(t)$ به طور جداگانه و به صورت قطع و یقین ممکن نیست؛ فقط می‌توانیم میانگینهای آماری همانند

$$\overline{W_{fi}(t)} = \lim_{\mathcal{N} \rightarrow \infty} \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{k=1}^{\mathcal{N}} W_{fi}^{(k)}(t)$$

$$\overline{W_{fi}(t) W_{fi}^*(t - \tau)} = \lim_{\mathcal{N} \rightarrow \infty} \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{k=1}^{\mathcal{N}} W_{fi}^{(k)}(t) W_{fi}^{(k)*}(t - \tau) \quad (2)$$

را مشخص کنیم. در این صورت، اصطلاحاً می‌گوییم که "اختلال کتره‌ای" است. اگر میانگینهای فوق به زمان t بستگی نداشته باشند این اختلال کتره‌ای را مانا می‌نامیم. سپس هامیلتونی مختل‌نشده H_0 را از نو تعریف می‌کنیم به طوری که تمام $\overline{W_{fi}}$ ها را صفر کند، و قرار می‌دهیم

$$g_{fi}(\tau) = \overline{W_{fi}(t) W_{fi}^*(t - \tau)} \quad (3)$$

$g_{fi}(\tau)$ را "تابع همبستگی" اختلال (برای زوج حالت $|\varphi_i\rangle, |\varphi_f\rangle$) می‌نامیم. $g_{fi}(\tau)$ به ازای $\tau \gg \tau_c$ عموماً به سمت صفر می‌رود، τ_c یک زمان مشخصه است که زمان همبستگی اختلال نامیده می‌شود. اختلال، دارای "حافظه" ای است که فقط در بازه زمانی از مرتبه τ_c ، به گذشته برمی‌گردد.

۱. این سیستم همگی در زمان $t = 0$ در حالت (φ_i) و در معرض یک اختلال کتره‌ای مانا قرار دارند، که تابع همبستگی آن $g_{f_i}(\tau)$ و زمان همبستگی آن τ_c است. (در محاسبات می‌توان \mathcal{N} را نامتناهی در نظر گرفت).

نسبت $\pi_{f_i}(t)$ سیستمها را که در واحد زمان به حالت (φ_i) می‌روند محاسبه کنید. نشان دهید که پس از یک مقدار معین t_1 از t ، که آن را مشخص می‌کنید، $\pi_{f_i}(t)$ دیگر به t بستگی ندارد.

۲. به ازای τ_c ثابت، تغییرات π_{if} نسبت به ω_{f_i} چگونه است؟ موردی را در نظر بگیرید که در آن رابطه $v_{f_i}^2 e^{-\tau/\tau_c} = |g_{f_i}(\tau)|^2$ با v_{f_i} ثابت، برقرار باشد.

۳. نظریهٔ اخیر فقط به ازای $t_2 \ll t$ دقیقاً معتبر است [چون فرمول (۱) از یک نظریهٔ اختلال نتیجه می‌شود]. مرتبهٔ بزرگی t_2 چقدر است؟ با در نظر گرفتن $t_1 \gg t_2$ ، شرطی را برای معرفی یک احتمال گذار در واحد زمان که مستقل از t است، بیابید [از شکل $g_{f_i}(\tau)$ در سؤال قبلی استفاده کنید]. آیا می‌توان نظریهٔ اخیر را به فراتر از $t = t_2$ نیز تعمیم داد؟

(ج) کاربرد به یک سیستم ساده

\mathcal{N} سیستم مورد نظر عبارت‌اند از \mathcal{N} ذرهٔ با اسپینهای $1/2$ و با نسبت ژیرومغناطیسی γ ، که در میدان ایستای \mathbf{B}_0 قرار دارند (قرار دهید، $\omega_0 = -\gamma B_0$). این ذرات، در یک سلول کروی به شعاع R محبوس شده‌اند. هر یک از آنها دائماً با دیواره‌ها برخورد می‌کنند و بین آنها در رفت و آمدند. زمان متوسط بین دو برخورد یک ذره با دیوار را "زمان پرواز"، τ_v می‌نامیم. در خلال این مدت، ذره فقط میدان \mathbf{B}_0 را "می‌بیند". هنگام برخورد با دیواره، هر ذره در خلال زمان متوسط τ_a ($\tau_a \ll \tau_v$)، جذب سطح دیواره می‌شود و در آنجا باقی می‌ماند؛ در این مدت علاوه بر میدان \mathbf{B}_0 ، میدان مغناطیسی میکروسکوپیکی ثابت \mathbf{b} را، که ناشی از ناخالصیهای پارامغناطیسی موجود در دیوار است، نیز "می‌بیند". جهت \mathbf{b} از یک برخورد به برخورد دیگر به طور کتره‌ای تغییر می‌کند؛ دامنهٔ متوسط \mathbf{b} را با \bar{b} نشان می‌دهیم.

۱. زمان همبستگی اختلال، از دید اسپینها، چقدر است؟ شکل زیر را، که برای تابع همبستگی مؤلفه‌های میدان میکروسکوپیکی \mathbf{b} انتخاب می‌کنیم، از لحاظ فیزیکی توجه کنید

$$\overline{b_x(t)b_x(t-\tau)} = \frac{1}{3} b_0^2 \frac{\tau_a}{\tau_v} e^{-\tau/\tau_a} \quad (4)$$

و عبارات مشابه مربوط به مؤلفه‌های در امتداد Oy و Oz با تمام جملات حاصلضربی $\overline{b_x(t)b_y(t-\tau)}$ برابر صفرند.

۲. فرض کنید که \mathcal{M}_2 مؤلفهٔ مغناطش میکروسکوپیکی \mathcal{N} ذره در امتداد محور Oz باشد،

که توسط میدان B_0 تعریف می‌شود. نشان دهید که تحت تأثیر برخوردهای با دیواره، M_z با زمان ثابت T_1 ، "واهلش می‌یابد"

$$\frac{dM_z}{dt} = -\frac{M_z}{T_1}$$

۳. نشان دهید که مطالعه تغییرات T_1 نسبت به B_0 ، تعیین تجربی زمان متوسط جذب τ_a را ممکن می‌سازد.

۴. چندین سلول با شعاعهای مختلف R ، که از یک ماده ساخته شده‌اند، در اختیار داریم. با اندازه‌گیری T_1 ، چگونه می‌توانیم، دامنه متوسط b_0 میدان میکروسکوپیکی در محل دیواره را به‌طور تجربی تعیین کنیم.

۱۵. جذب تابش توسط یک سیستم چندذره‌ای که یک حالت مقید تشکیل می‌دهند. اثر دوپلر. انرژی پس‌زنی. اثر موسباور.
در مکمل ۱ از فصل ۱۳ جذب تابش توسط یک ذره باردار که توسط یک مرکز ثابت O جذب می‌شود، را بررسی کردیم (مدل اتم هیدروژن که در آن هسته بینهایت سنگین است). در این تمرین، وضعیت واقعتری را بررسی می‌کنیم که در آن تابش فرودی توسط یک سیستم چندذره‌ای به جرمهای متناهی که با یکدیگر برهم‌کنش دارند و یک حالت مقید تشکیل می‌دهند، جذب می‌شود. بنابراین، می‌خواهیم اثر درجات آزادی مرکز جرم سیستم را بر پدیده جذب، مطالعه کنیم.

۱. جذب تابش توسط یک اتم هیدروژن آزاد
اثر دوپلر. انرژی پس‌زنی

فرض کنید R_1 و P_1 ، R_2 و P_2 مشاهده‌پذیرهای مکان و تکانه دو ذره (۱) و (۲)؛ به جرمهای m_1 و m_2 و بارهای ناهمنام q_1 و q_2 (یک اتم هیدروژن) باشند؛ همچنین، فرض کنید R و P ، R_G و P_G مشاهده‌پذیرهای مکان و تکانه ذره نسبی و مرکز جرم باشند (فصل ۷، بخش ۷-۲). جرم کل برابر $M = m_1 + m_2$ و جرم کاهش‌یافته برابر $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ است. هامیلتونی H_0 سیستم را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$H_0 = H_e + H_i \quad (1)$$

که در آن

$$H_e = \frac{1}{\sqrt{M}} P_G^2 \quad (2)$$

عبارت است از انرژی جنبشی انتقالی اتم، که فرض می‌کنیم آزاد است (درجات آزادی "خارجی")، H_i و H_e (که فقط به \mathbf{R} و \mathbf{P} بستگی دارد) انرژی داخلی اتم را توصیف می‌کند (درجات آزادی "داخلی"). ویژه‌حالت‌های H_e ، با ویژه‌مقدارهای $\hbar^2 \mathbf{K}^2 / 2M$ را با $|\mathbf{K}\rangle$ نمایش می‌دهیم. فقط به دو ویژه‌حالت H_i ، $|\chi_a\rangle$ و $|\chi_b\rangle$ ، با انرژیهای E_a و E_b ($E_b > E_a$) می‌پردازیم. قرار می‌دهیم

$$E_b - E_a = \hbar\omega. \quad (3)$$

(الف) به اتم چه مقدار انرژی باید بدهیم تا آن را از حالت $|\mathbf{K}; \chi_a\rangle$ (اتم، در حالت $|\chi_a\rangle$) با تکانه کل $\hbar\mathbf{K}$ به حالت $|\mathbf{K}'; \chi_b\rangle$ ببریم؟

(ب) این اتم با یک موج الکترومغناطیسی تخت با بردار موجی \mathbf{k} و بسامد زاویه‌ای $\omega = ck$ ، که در امتداد بردار \mathbf{e} عمود بر \mathbf{k} ، قطبی شده است، برهم‌کنش می‌کند. پتانسیل برداری $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ متناظر مربوط برابر است با

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{A} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} + c.c. \quad (4)$$

که در آن \mathcal{A} یک ثابت است. جمله اصلی هامیلتونی برهم‌کنش بین این موج تخت و سیستم دو ذره‌ای را می‌توان به صورت زیر نوشت (مکمل ۱ از فصل ۱۳ بخش ۱۳-۱ ب)

$$W(t) = - \sum_{i=1}^2 \frac{q_i}{m_i} \mathbf{P}_i \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}_i, t) \quad (5)$$

$W(t)$ را برحسب $\mathbf{P}, \mathbf{R}, \mathbf{P}_G, \mathbf{R}_G, M, m, q$ و q (با قرار دادن $q_1 = -q_2 = q$) نشان دهید که، در تقریب دوقطبی الکتریکی که عبارت است از صرف نظر کردن از $\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}$ (و نه از $\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_G$) در مقایسه با ۱، داریم

$$W(t) = W e^{-i\omega t} + W e^{i\omega t} \quad (6)$$

که در آن

$$W = - \frac{q\mathcal{A}}{m} \mathbf{e} \cdot \mathbf{P} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_G} \quad (7)$$

(ج) نشان دهید که عنصر ماتریسی W بین حالت $|\mathbf{K}; \chi_a\rangle$ و حالت $|\mathbf{K}; \chi_b\rangle$ تنها وقتی

مخالف صفر است که رابطه معینی بین \mathbf{K}' , k , \mathbf{K} وجود داشته باشد (این رابطه را باید مشخص کنید). این رابطه را برحسب پایستگی تکانه کل در خلال جذب یک فوتون فرودی توسط اتم، تعبیر کنید.

د) از اینجا نشان دهید که اگر اتم واقع در حالت $|\mathbf{K}; \chi_a\rangle$ را در موج تخت (۴) قرار دهیم، هنگامی تشدید رخ می‌دهد که اختلاف انرژی $\hbar\omega$ فوتونهای وابسته به موج فرودی، با انرژی $\hbar\omega_0$ گذار اتمی $|\chi_b\rangle \rightarrow |\chi_a\rangle$ مساوی کمیت δ باشد که آن را برحسب \hbar_0 , ω , \mathbf{K} , k , M , c بیان خواهید کرد. (چون δ یک جمله تصحیحی است، می‌توانیم در عبارت δ ، ω را با ω_0 جایگزین کنیم). نشان دهید که δ مجموع دو جمله است، یکی δ_1 ، که به \mathbf{K} و به زاویه بین \mathbf{K} و k بستگی دارد (اثر دوپلر) و دیگری δ_2 ، که مستقل از k است. یک تعبیر فیزیکی برای δ_1 و δ_2 ارائه دهید (با نشان دادن اینکه وقتی اتم ساکن یک فوتون تشدید می‌کند δ_2 انرژی جنبشی پس‌زنی اتم است).

نشان دهید که وقتی $\hbar\omega_0$ از مرتبه 10^4 eV باشد (قلمرو فیزیک اتمی) δ_2 در مقابل δ_1 قابل چشمپوشی است. برای M ، جرمی از مرتبه جرم پروتون (10^9 eV $\simeq Mc^2$)، و برای $|\mathbf{K}|$ ، مقداری متناظر با سرعت گرمایی در $T = 300^\circ\text{K}$ انتخاب کنید. اگر $\hbar\omega_0$ از مرتبه 10^5 eV می‌بود (قلمرو فیزیک هسته‌ای) آیا باز هم این مطلب درست بود؟

۲. جذب بدون پس‌زنی تابش، توسط هسته‌ای که در یک بلور حول محل تعادلش ارتعاش می‌کند
اثر موسباور

سیستمی که اکنون بررسی می‌کنیم، هسته‌ای است به جرم M که با بسامد زاویه‌ای Ω حول محل تعادلش در یک شبکه بلوری ارتعاش می‌کند (مدل اینشتین مکمل ۱ از فصل ۵ بخش ۵-۱-۲). مجدداً مکان و تکانه مرکز جرم این هسته را با \mathbf{R}_G و \mathbf{P}_G نمایش می‌دهیم. انرژی ارتعاشی هسته با هامیلتونی زیر توصیف می‌شود

$$H_e = \frac{1}{2M} \mathbf{P}_G^2 + \frac{1}{2} M \Omega^2 (X_G^2 + Y_G^2 + Z_G^2) \quad (8)$$

که هامیلتونی یک نوسانگر هماهنگ همسانگرد سه‌بعدی است. ویژه‌حالت H_e با ویژه‌مقدار خارجی، هسته دارای درجات آزادی داخلی نیز هست که مشاهده‌پذیرهای وابسته به آنها همگی با \mathbf{P}_G و \mathbf{R}_G جابه‌جا می‌شوند. فرض کنید H_2 ، هامیلتونی باشد که انرژی داخلی هسته را توصیف

می‌کند. همانند بالا، توجه خود را به دو ویژه حالت H_i ، $|\chi_a\rangle$ و $|\chi_b\rangle$ ، با انرژیهای E_a و E_b معطوف می‌سازیم و قرار می‌دهیم $\hbar\omega_0 = E_b - E_a$. چون $\hbar\omega_0$ در محدوده پرتو γ قرار می‌گیرد، داریم

$$\omega_0 \gg \Omega \quad (9)$$

ه) چه مقدار انرژی باید به هسته داد تا بتواند از حالت $|\psi_{0,0,0}; \chi_a\rangle$ (هسته در حالت ارتعاشی با اعداد کوانتومی $n_x = 0, n_y = 0, n_z = 0$) و حالت داخلی $|\chi_a\rangle$ تعریف می‌شود) به حالت $|\psi_{n,0,0}; \chi_b\rangle$ برود؟

و) این هسته در یک موج الکترومغناطیسی از نوعی که با رابطه (۴) تعریف می‌شود و بردار موج k ی آن موازی Ox است، قرار دارد. می‌توان نشان داد که، در تقریب دوقطبی الکتریکی، هامیلتونی برهم‌کنش هسته با این موج تخت (عامل جذب پرتو γ) را مانند رابطه (۶) به صورت زیر نوشت

$$W = \mathcal{A}_0 S_i(k) e^{ikX_G} \quad (10)$$

که در آن $S_i(k)$ عملگری است که روی درجات آزادی داخلی اثر می‌کند و در نتیجه با R_G و P_G جابه‌جا می‌شود. قرار دهید $s(k) = \langle \chi_b | S_i(k) | \chi_a \rangle$.

هسته ابتدا در حالت $|\psi_{0,0,0}; \chi_a\rangle$ است. نشان دهید که تحت تأثیر موج تخت فرودی، هرگاه $\hbar\omega$ بر یکی از انرژیهای e محاسبه کردیم منطبق شود، یک تشدید با شدتی متنظر با $|\langle \psi_{n,0,0} | e^{ikX_G} | \psi_{0,0,0} \rangle|^2 |s(k)|^2$ ظاهر می‌شود که در آن مقدار k باید مشخص شود. به علاوه، نشان دهید که شرط (۹) به ما این امکان را می‌دهد تا در عبارت مربوط به شدت تشدید، k را با $k_0 = \omega_0/c$ جایگزین کنیم.

ز) قرار می‌دهیم

$$\pi_n(k_0) = |\langle \varphi_n | e^{ik_n X_G} | \varphi_0 \rangle|^2 \quad (11)$$

که در آن، $|\varphi_n\rangle$ ، ویژه حالت‌های یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی با مکان X_G ، جرم M و بسامد زاویه‌ای Ω هستند.

۱) $\pi_n(k_0)$ را برحسب \hbar, M, Ω, k_0, n محاسبه کنید (تمرین ۷ از مکمل ۱۲ فصل ۵ را نیز ببینید). قرار دهید $\xi = \hbar^2 k_0^2 / 2M / \hbar\Omega$. راهنمایی: یک رابطه بازگشتی بین $\langle \varphi_n | e^{ik_n X_G} | \varphi_0 \rangle$ و $\langle \varphi_{n-1} | e^{ik_{n-1} X_G} | \varphi_0 \rangle$ برقرار سازید، و تمام $\pi_n(k_0)$ ها را برحسب $\pi_0(k_0)$ ، که باید مستقیماً از

تابع موج حالت پایه نوسانگر هماهنگ محاسبه شود، بیان کنید. نشان دهید که $\pi_n(k_0)$ ها توسط یک توزیع بواسون داده می‌شوند.

$$۲. \sum_{n=0}^{\infty} \pi_n(k_0) = ۱ \text{ ثابت کنید که}$$

$$۳. \sum_{n=0}^{\infty} n \hbar \Omega \pi_n(k_0) = \hbar^2 \omega_0^2 / 2Mc^2 \text{ نشان دهید که}$$

۴. فرض کنید $\hbar \Omega \gg \hbar^2 \omega_0^2 / 2Mc^2$ ، یعنی، انرژی ارتعاشی هسته خیلی از انرژی پس‌زنی بزرگتر است (پیوندهای بلوری بسیار سخت). نشان دهید که طیف جذبی هسته اساساً از یک خط منفرد با بسامد زاویه‌ای ω_0 تشکیل شده است. این خط، خط جذبی بدون پس‌زنی نامیده می‌شود. این اسم را توجیه کنید. چرا اثر دوپلر ناپدید می‌شود؟

۵. حال فرض کنید که $\hbar \Omega \ll \hbar^2 \omega_0^2 / 2Mc^2$ (پیوندهای بلوری بسیار ضعیف). نشان دهید که طیف جذبی هسته متشکل است از تعداد بسیار زیادی خط هم‌فاصله که مرکز تراکم آن (که از توزین طول هر خط توسط شدت نسبی آن به‌دست می‌آید) هر مکان خط جذبی هسته آزادی که ابتدا ساکن است منطبق است. مرتبه بزرگی پهنای این طیف (پاشندگی خطوط حول مرکز تراکم) چقدر است؟ نشان دهید که نتایج قسمت اول، در حد $\Omega \rightarrow 0$ به‌دست می‌آید.

تمرین ۳:

Brossel's lecturestn in (15.2).

مرجع:

تمرین ۵:

Townes and Schawlow (12.10), chap. 10, §9.

مرجع:

تمرین ۶:

Wilson (16.34).

مرجع:

تمرین ۹:

Abraham (14.1), chap. VIII; Slichter (14.2), chap. 5.

مرجع:

تمرین ۱۰:

De Benedetti (16.23); Valentin (16.1), annexe XV.

مرجع:

۱۴

سیستمهای ذرات یکسان

- ۱-۱-۱۴ ذرات یکسان: تعریف
 ۲-۱-۱۴ ذرات یکسان در مکانیک کلاسیک
 ۳-۱-۱۴ ذرات یکسان در مکانیک کوانتومی: مشکلات
 کاربرد اصول موضوع عمومی
 الف) بحث کیفی یک مثال ساده اولیه
 ب) سرمنشأ مشکلات: واگنی تعویض

- ۱-۲-۱۴ سیستمهای دودره‌ای
 الف) تعریف عملگر جایگشت P_{21}
 ب) خواص P_{21}
 ج) کنه‌های متقارن و پادمقارن. متقارنگر و پادمقارنگر
 د) تبدیل مشاهده‌پذیرها توسط جایگشت
 ۲-۲-۱۴ سیستمهای شامل تعداد دلخواهی ذره
 الف) تعریف عملگرهای جایگشت
 ب) خواص
 ج) کنه‌های کاملاً متقارن یا پادمقارن. متقارنگر و پادمقارنگر
 د) تبدیل مشاهده‌پذیرها توسط جایگشت

- ۱-۳-۱۴ بیان اصل موضوع
 ۲-۳-۱۴ رفع واگنی تعویض
 ۳-۳-۱۴ ساختن کنه‌های فیزیکی
 الف) قاعده ساختن
 ب) کاربرد در سیستمهای متشکل از دو ذره یکسان
 ج) تعمیم به تعداد دلخواهی ذره
 د) ساختن یک پایه در فضای حالت فیزیکی
 ۴-۳-۱۴ کاربرد اصول موضوع دیگر
 الف) اصول موضوع اندازه‌گیری
 ب) اصول موضوع تحول زمانی

- ۱-۴-۱۴ تفاوت‌های بین بوزونها و فرمیونها. اصل طرد پاولی
 الف) حالت پایه یک سیستم از ذرات یکسان مستقل
 ب) آمار کوانتومی
 ۲-۴-۱۴ نتایج تمیزناپذیری ذرات در محاسبه پیش‌بینیهای فیزیکی
 الف) تداخل‌های بین فرایندهای مستقیم و تبادل
 ب) وضعیتیایی که در آنها می‌توان از اصل موضوع متقارن‌سازی صرف‌نظر کرد

در فصل ۳ اصول موضوع مکانیک کوانتومی غیرنسبیتی را بیان کردیم و در فصل ۹ توجه خود را به اصول مربوط به درجات آزادی اسپین معطوف داشتیم. در اینجا، خواهیم دید (۱۴-۱) که، در واقع، این اصول موضوع، هنگامی که سیستمهای متشکل از تعداد زیادی ذره یکسان را بررسی می‌کنیم کافی نیستند، زیرا، در این مورد، کاربرد آنها به ابهاماتی در پیش‌بینیهای فیزیکی منتهی می‌شود. جهت رفع این ابهامات، لازم است که اصل موضوع جدیدی را، در ارتباط با توصیف مکانیک کوانتومی سیستمهای ذرات یکسان، معرفی کنیم. این اصل موضوع را در بخش ۱۴-۳ بیان و مفاهیم فیزیکی آن را در بخش ۱۴-۴ بررسی می‌کنیم. اما، قبل از پرداختن به این مطلب ابتدا (در بخش ۱۴-۲) عملگرهای جایگشت را که استدلال و محاسبات را به طور قابل ملاحظه‌ای ساده می‌کنند، تعریف و مطالعه خواهیم کرد.

۱۴-۱ بیان مسئله

۱۴-۱-۱ ذرات یکسان: تعریف

دو ذره را در صورتی یکسان می‌گوییم که تمام خواص ذاتی آنها (جرم، اسپین، بار و غیره ...) کاملاً یکی باشد: هیچ آزمایشی نمی‌تواند یکی را از دیگری تمیز دهد. از این رو، تمام الکترونها در عالم، و همچنین، تمام پروتونها و تمام اتمهای هیدروژن یکسان‌اند. اما الکترون و پوزیترون یکسان نیستند، زیرا، با وجود اینکه دارای جرم و اسپین یکسان هستند، بار الکتریکی آنها متفاوت است. از این تعریف می‌توانیم یک نتیجه مهم بگیریم: وقتی یک سیستم فیزیکی شامل دو ذره یکسان است، با تعویض نقش این دو ذره، خواص یا تحول آن تغییر نخواهد کرد.

یادداشت:

توجه کنید که این تعریف مستقل از شرایط آزمایش است: حتی اگر در یک آزمایش معین، بار ذرات را اندازه‌گیری نکنیم، یک الکترون و یک پوزیترون هرگز نمی‌توانند به‌عنوان دو ذره یکسان تلقی شوند.

۱۴-۱-۲ ذرات یکسان در مکانیک کلاسیک

در مکانیک کلاسیک، وجود ذرات یکسان در یک سیستم اشکال خاصی ایجاد نخواهد کرد. این مورد خاص نیز همانند مورد عمومی بررسی می‌شود. هر ذره در امتداد یک گذرگاه کاملاً معین حرکت می‌کند، به طوری که می‌توان آن را از ذرات دیگر تمیز داد و در ضمن تحول سیستم، آن را "تعیین" کرد.

برای بررسی دقیقتر این نکته، سیستمی از دو ذره یکسان را در نظر می‌گیریم. در زمان اولیه t_0

حالت فیزیکی سیستم با مشخص شدن مکان و سرعت هر یک از دو ذره تعریف می‌شود؛ این داده‌های اولیه را با $\{r_0, v_0\}$ و $\{r'_0, v'_0\}$ نمایش می‌دهیم. برای توصیف این حالت فیزیکی و محاسبه تحول آن، دو ذره را شماره‌گذاری می‌کنیم: $r_1(t), v_1(t)$ مبین مکان و سرعت ذره (۱) در زمان t ، و $r_2(t), v_2(t)$ نشان‌دهنده مکان و سرعت ذره (۲) هستند. این شماره‌گذاری هیچ‌گونه مبنای فیزیکی ندارد، همچنان‌که اگر با دو ذره متفاوت سروکار داشتیم نیز چنین بود. نتیجه می‌گیریم که حالت فیزیکی اولیه‌ای که تعریف کردیم می‌تواند، از دیدگاه نظری با دو "حالت ریاضی" متفاوت تعریف شود. در واقع می‌توان نوشت

$$\begin{aligned} r_1(t_0) &= r_0 & r_2(t_0) &= r'_0 \\ v_1(t_0) &= v_0 & v_2(t_0) &= v'_0 \end{aligned} \quad (1-14)$$

و یا

$$\begin{aligned} r_1(t_0) &= r'_0 & r_2(t_0) &= r_0 \\ v_1(t_0) &= v'_0 & v_2(t_0) &= v_0 \end{aligned} \quad (2-14)$$

حال، تحول سیستم را بررسی می‌کنیم. فرض کنید جواب معادلات حرکت که با شرایط اولیه (۱-۱۴) تعریف می‌شوند را بتوانیم به صورت زیر بنویسیم

$$r_1(t) = r(t) \quad r_2(t) = r'(t) \quad (3-14)$$

که در آن $r(t)$ و $r'(t)$ دو تابع برداری هستند. این واقعیت که دو ذره یکسان‌اند حاکی از این است که اگر نقش آنها تعویض شود، سیستم تغییر نمی‌کند. در نتیجه، تابع لاگرانژی $\mathcal{L}(r_1, v_1; r_2, v_2)$ و هامیلتونی کلاسیک $\mathcal{H}(r_1, p_1; r_2, p_2)$ نسبت به تعویض شاخصهای ۱ و ۲ ناوردا هستند. در نتیجه، جواب معادلات حرکت متناظر با حالت اولیه (۲-۱۴) عبارت است از

$$r_1(t) = r'(t) \quad r_2(t) = r(t) \quad (4-14)$$

که در آن توابع $r(t)$ و $r'(t)$ همان توابع (۳-۱۴) می‌باشند.

بنابراین، دو توصیف ریاضی ممکن از حالت فیزیکی مورد نظر، کاملاً هم‌ارزند، زیرا به پیش‌بینیهای فیزیکی یکسانی منتهی می‌شوند: ذره‌ای که در لحظه اولیه t_0 از $\{r_0, v_0\}$ شروع به حرکت کرده است، در زمان t در مکان $r(t)$ و دارای سرعت $v(t) = dr'/dt$ است، و ذره‌ای

$$\{r_0, v_0\} \longleftrightarrow \{r(t), v(t)\}$$

$$\{r'_0, v'_0\} \longleftrightarrow \{r'(t), v'(t)\}$$

حالت اولیه

حالت در لحظه t

شکل ۱۴-۱ مکان و سرعت هر یک از ذرات در لحظه اولیه t_0 و لحظه t .

که از $\{r_0, v_0\}$ حرکت کرده است در $r(t)$ است و سرعت آن برابر $v(t) = dr'/dt$ است شکل (۱۴-۱). تحت این شرایط، کافی است که در لحظه اولیه یکی از دو "حالت ریاضی" ممکن را انتخاب کنیم و دیگری را نادیده بگیریم. بنابراین، سیستم را طوری در نظر می‌گیریم که گویی دو ذره، در واقع، دارای طبیعت‌های مختلفی بوده‌اند. به این ترتیب، شماره‌های (۱) و (۲)، که ذرات را به‌طور اختیاری در لحظه t_0 با آنها برچسب زدیم، به‌صورت خواصی ذاتی عمل می‌کنند که دو ذره را از هم متمایز سازند. چون می‌توان هر ذره را در امتداد گذرگاهش قدم به قدم تعقیب کرد، (پیکانهای شکل ۱۴-۱)، در هر لحظه می‌توانیم مکان ذرات شماره‌گذاری شده (۱) و (۲) را تعیین کنیم.

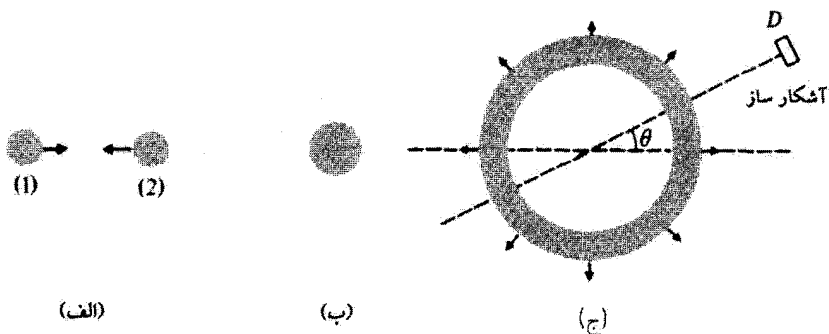
۱۴-۱-۳ ذرات یکسان در مکانیک کوانتومی: مشکلات کاربرد اصول موضوع

عمومی

الف) بحث کیفی یک مثال ساده اولیه

چون در این حالت ذرات مسیر معینی ندارند، معلوم می‌شود که وضعیت در مکانیک کوانتومی از بنیان متفاوت است. حتی اگر، t_0 ، بسته‌های موج وابسته به دو ذره یکسان کاملاً در فضا مجزا باشند، تحول بعدی آنها ممکن است این بسته‌ها را در هم آمیزد. در این صورت ما مسیر ذرات را گم خواهیم کرد؛ وقتی یک ذره را در ناحیه‌ای از فضا که احتمال حضور هر دوی آنها غیر صفر است آشکار می‌کنیم، هیچ راهی وجود ندارد که بدانیم آیا ذره آشکار شده ذره (۱) است یا ذره (۲). جز در مواردی خاص - مثلاً، وقتی دو بسته موج هرگز بر روی هم نمی‌افتند - وقتی مکان دو ذره را اندازه می‌گیریم، شماره‌گذاری آنها مبهم می‌شود، زیرا، همان‌طور که خواهیم دید، چند "مسیر" متمایز وجود دارند که می‌توانند سیستم را از حالت اولیه به حالتی که در اندازه‌گیری پیدا کرده‌ایم، ببرند.

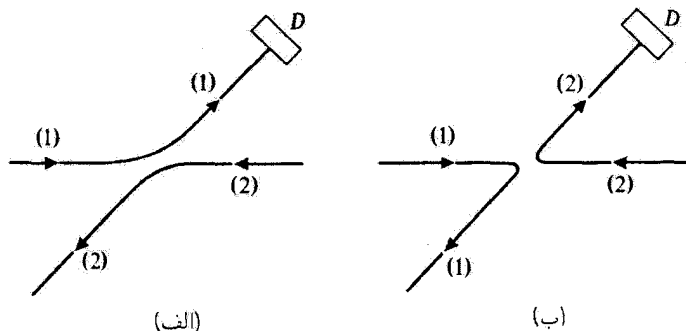
به‌منظور بررسی دقیقتر این نکته، یک مثال حقیقی را در نظر بگیرید: یک برخورد بین دو ذره یکسان در دستگاه مرکز جرم آنها (شکل ۱۴-۲). قبل از برخورد، دو بسته موج کاملاً جدا از هم



شکل ۲-۱۴ برخورد بین دو ذره یکسان در سیستم مرکز جرم: نمایش طرح وار چگالی احتمال دو ذره. قبل از برخورد (شکل الف)، دو بسته موج کاملاً از هم مجزا هستند و می‌توان آنها را شماره‌گذاری کرد. در حین برخورد (شکل ب)، دو بسته موج بر روی هم می‌افتند. پس از برخورد (شکل ج)، چگالی احتمال در ناحیه‌ای که به شکل پوسته‌ی کروی در آمده است و شعاع آن با زمان افزایش می‌یابد، غیر صفر است. به علت یکسان بودن دو ذره، وقتی ذره‌ای را در D آشکار می‌کنیم، غیرممکن است بدانیم این ذره با کدام یک از بسته‌موجهای (۱) یا (۲) در قبل از برخورد، وابسته بوده است.

در اختیار داریم که به طرف یکدیگر می‌روند (شکل ۲-۱۴ الف): برای سهولت، ذره طرف چپ را با (۱) و ذره طرف راست را با (۲) نشان می‌دهیم. ضمن برخورد (شکل ۲-۱۴ ب)، دو بسته موج بر روی هم می‌افتند. بعد از برخورد، ناحیه‌ای از فضا که در آن چگالی احتمال دو ذره غیر صفر است^۱ به یک پوسته‌ی کروی می‌ماند که شعاع آن با گذشت زمان افزایش می‌یابد (شکل ۲-۱۴ ج). فرض کنید آشکارساز واقع در جهتی که با سرعت اولیه‌ی بسته موج (۱) زاویه θ می‌سازد، یک ذره آشکار کند. در این حال مسلم است که (چون در برخورد، تکانه پایسته است) ذره‌ی دیگر در جهت مخالف دور می‌شود. اما، غیرممکن است که بدانیم ذره‌ی آشکار شده در D ذره‌ای است که در آغاز آن را با (۱) شماره‌گذاری کردیم یا با (۲): بنابراین، دو "مسیر" متفاوت وجود دارند که می‌توانند سیستم را از حالت اولیه‌ای که در شکل (۲-۱۴ ج) نشان داده‌ایم، به حالت نهایی که در اندازه‌گیری پیدا کرده‌ایم، برسانند. این دو مسیر، در شکلهای ۲-۱۴ الف و ۳-۱۴ ب به‌طور طرح‌وار نمایش داده شده‌اند. در واقع، به هیچ‌وجه نمی‌توان تعیین کرد که کدام مسیر پیموده شده است. در این صورت هنگام استفاده از اصول موضوع فصل ۳، در مکانیک کوانتومی یک مشکل

۱. تابع موج دودره‌ای، به ۶ متغیر (مؤلفه‌های مختصات \mathbf{r} و \mathbf{r}' دو ذره) بستگی دارد و به سهولت نمی‌توان آن را در ۳ بعد نمایش داد. بنابراین، شکل ۲-۱۴ خیلی طرح‌وار است: نواحی خاکستری، جاهایی هستند که باید \mathbf{r} و \mathbf{r}' به آنها متعلق باشند تا تابع موج مقدار قابل توجهی داشته باشد.



شکل ۱۴-۳ نمایش طرح وار دو نوع "مسیر" که سیستم، هنگام رفتن از حالت اولیه به حالتی که در اندازه‌گیری یافته‌ایم، می‌تواند طی کند. چون دو ذره یکسان‌اند نمی‌توان مسیری را که واقعاً طی شده است، تعیین کرد.

اساسی پدیدار می‌شود. برای محاسبه احتمال نتیجه یک اندازه‌گیری مفروض، لازم است که بردارهای حالت نهایی وابسته به این نتیجه را بدانیم. در اینجا، دو دسته بردار نهایی وجود دارند که به ترتیب با شکل‌های ۳ الف و ۳ ب متناظرند. این دوکت از یکدیگر متمایزند (و علاوه بر این، متعامدند). با این همه، چون تصویر یک اندازه‌گیری کامل که بتواند تمایزی بین آنها قائل شود، غیرممکن است، این کتها به یک حالت فیزیکی منفرد وابسته‌اند. حال تحت این شرایط، آیا باید احتمال را با استفاده از مسیر ۳ الف، یا ۳ ب و یا هر دو حساب کنیم؟ در مورد اخیر آیا باید مجموع احتمالات وابسته به هر مسیر را در نظر بگیریم، یا مجموع دامنه‌های احتمال آنها را (و در این مورد، با چه علامتی)؟ همان‌طور که بعداً ثابت خواهیم کرد، این امکانات متفاوت، به پیش‌بینیهای مختلفی منجر می‌شوند. جواب سؤالات بالا را پس از بیان اصل موضوع مقارن‌سازی در بخش ۱۴-۴، خواهیم داد. قبل از ادامه مطلب، مثال دیگری را مطالعه خواهیم کرد که در فهم مشکلات مربوط به تمیزناپذیری دو ذره به ما کمک خواهد کرد.

ب) سرمنشأ مشکلات: واگنی تعویض

در مثال قبل، دو بسته موج را در نظر گرفتیم که، در آغاز بر روی هم نمی‌افتادند، به طوری که می‌توانستیم به طور اختیاری هر کدام از آنها را با یک شماره، (۱) یا (۲)، برچسب بزنیم. اما، وقتی به تعیین حالت ریاضی (یاکت) وابسته به یک نتیجه مفروض از یک اندازه‌گیری مکان می‌پرداختیم، ابهاماتی ظاهر می‌شد. در واقع، همین مشکل در انتخاب کت ریاضی به کاررفته در توصیف حالت فیزیکی اولیه، نیز بروز می‌کند. این نوع مشکل، مربوط به موضوع "واگنی تعویض" است، که در این بخش آن را معرفی خواهیم کرد. برای ساده کردن استدلال، ابتدا مثال متفاوتی را در نظر می‌گیریم،

تا خود را به فضایی با ابعاد متناهی محدود سازیم. سپس مفهوم واگنی تعویض را تعمیم و نشان می‌دهیم که این مفهوم را می‌توان به تمام سیستمهای مکانیک کوانتومی شامل ذرات یکسان نیز بسط داد.

۱. واگنی تعویض برای سیستمی از دو ذره با اسپین $1/2$

حال سیستمی مرکب از دو ذره یکسان با اسپینهای $1/2$ را در نظر می‌گیریم و مطالعه خود را به درجات آزادی اسپینی آن محدود می‌کنیم. نظیر بخش ۱۴-۱-۲ بین حالت فیزیکی سیستم و توصیف ریاضی آن (کتی در فضای حالت) تمایز قائل می‌شویم.

طبیعی است که اگر یک اندازه‌گیری کاملی از هر یک از دو اسپین به عمل آوریم، می‌توانیم حالت فیزیکی سیستم کل را به‌طور کامل بشناسیم. در اینجا، فرض می‌کنیم که مؤلفه یکی از آنها در امتداد Oz برابر $\hbar/2$ + و مؤلفه دیگری، $\hbar/2$ - است. (این مورد برای دو اسپینی با مشخصات $\{r_0, v_0\}$ و $\{r'_0, v'_0\}$ در بخش ۱۴-۱-۲ معادل است).

برای توصیف ریاضی سیستم، ذرات را شماره‌گذاری می‌کنیم: S_1 و S_2 معرف دو مشاهده‌پذیر اسپین، و $\{|\varepsilon_1, \varepsilon_2\rangle\}$ ، (که در آن ε_1 و ε_2 می‌توانند برابر + یا - باشند) پایهٔ راست‌هنجار در فضای حالتی است که از ویژه‌کتهای مشترک S_{1z} (با ویژه‌مقدار $\hbar/2 \varepsilon_1$) و S_{2z} (با ویژه‌مقدار $\hbar/2 \varepsilon_2$) تشکیل می‌شود.

درست نظیر مکانیک کلاسیک، دو "حالت ریاضی" متفاوت می‌توانند به یک حالت فیزیکی وابسته باشند. یکی از دو کت متعامد

$$|\varepsilon_1 = +, \varepsilon_2 = -\rangle \quad (۱۴-۵ \text{ الف})$$

$$|\varepsilon_1 = -, \varepsilon_2 = +\rangle \quad (۱۴-۵ \text{ ب})$$

می‌تواند، پیشاپیش حالت فیزیکی مورد نظر را در اینجا توصیف کند.

این دو کت، یک زیرفضای دوبعدی پدید می‌آورند که بردارهای هنجار شدهٔ آن به‌صورت زیر است

$$\alpha|+, -\rangle + \beta|-, +\rangle \quad (۱۴-۶)$$

یا

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (۱۴-۷)$$

بنابراین اصل برهم‌نهی، تمام کتهای ریاضی (۶-۱۴) می‌توانند یک حالت فیزیکی نظیر (۵-۱۴ الف) یا (۵-۱۴ ب) را نشان دهند (یکی از اسپینها به سمت بالا و دیگری به سمت پایین). در این حال می‌گوییم که یک "واگنی تعویض" وجود دارد.

واگنی تعویض، مشکلاتی اساسی ایجاد می‌کند، زیرا اعمال اصول موضوع فصل ۳ به کتهای مختلف (۶-۱۴)، می‌تواند به پیش‌بینیهای فیزیکی منجر شود که به کت انتخابی بستگی دارند. به‌عنوان مثال، احتمال اینکه مؤلفه‌های دو اسپین در امتداد Oz هر دو مساوی $+\hbar/2$ باشند را تعیین کنید. به این نتیجه اندازه‌گیری فقط یک کت از فضای حالت وابسته است. بنابر فرمول (۱۴-۲۰) از فصل ۴، این کت را می‌توانیم به‌صورت زیر بنویسیم

$$\frac{1}{\sqrt{4}}[|\varepsilon_1 = +\rangle + |\varepsilon_1 = -\rangle] \otimes \frac{1}{\sqrt{4}}[|\varepsilon_2 = +\rangle + |\varepsilon_2 = -\rangle]$$

$$= \frac{1}{4}[|+, +\rangle + |-, +\rangle + |+, -\rangle + |-, -\rangle] \quad (۸-۱۴)$$

در نتیجه، احتمال مطلوب برای بردار (۶-۱۴)، برابر است با

$$\left| \frac{1}{4}(\alpha + \beta) \right|^2 \quad (۹-۱۴)$$

این احتمال، مسلماً به ضرایب α و β بستگی دارد. بنابراین، نمی‌توان حالت فیزیکی مورد نظر را توسط دسته‌کتهای (۶-۱۴) یا هر یک از آنها که به‌طور اختیاری انتخاب شوند توصیف کرد. پس واگنی تعویض را باید از میان برداریم. یعنی باید بدون ابهام مشخص کنیم که کدام یک از کتهای (۶-۱۴) را باید به‌کار برد.

یادداشت:

در این مثال، واگنی تعویض فقط در حالت اولیه ظاهر می‌شود، زیرا برای مؤلفه‌های دو اسپین در حالت نهایی یک مقدار انتخاب کرده‌ایم. در مورد کلی (به‌عنوان مثال، اگر نتیجه اندازه‌گیری با دو ویژه‌مقدار متفاوت از S_z متناظر باشد)، واگنی تعویض، هم در حالت اولیه و هم در حالت نهایی ظاهر خواهد شد.

۲. تعمیم

مشکلات مربوط به واگنی تعویض در مطالعه تمام سیستمهایی که شامل تعداد اختیاری N از ذرات یکسان ($N > 1$) هستند، بروز می‌کند.

به عنوان مثال، یک سیستم سه ذره‌ای را در نظر بگیرید. به هر کدام از سه ذره، که به طور جداگانه در نظر گرفته می‌شوند، یک فضای حالت و مشاهده‌پذیری که در این فضا عمل می‌کنند وابسته است. از این رو، باید ذرات را شماره‌گذاری کنیم: $\mathcal{E}(1)$ ، $\mathcal{E}(2)$ ، و $\mathcal{E}(3)$ معرف سه فضای حالت یک‌ذره‌ای هستند، و مشاهده‌پذیرهای متناظر، با همین شاخصها برحسب می‌خورند. فضای حالت سیستم سه ذره‌ای عبارت است از حاصلضرب تانسوری

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}(1) \otimes \mathcal{E}(2) \otimes \mathcal{E}(3) \quad (10-14)$$

حال، مشاهده‌پذیر $B(1)$ را، که در آغاز در $\mathcal{E}(1)$ تعریف می‌شود، در نظر بگیرید. فرض می‌کنیم $B(1)$ خود به تنهایی یک مک-م-ج در $\mathcal{E}(1)$ تشکیل دهد [یا اینکه $B(1)$ ، در واقع، مبین چندین مشاهده‌پذیر است که یک مک-م-ج تشکیل می‌دهند]. این واقعیت که سه ذره یکسان‌اند حاکی از آن است که مشاهده‌پذیرهای $B(2)$ و $B(3)$ وجود دارند که به ترتیب در $\mathcal{E}(2)$ و $\mathcal{E}(3)$ تشکیل مک-م-ج‌هایی می‌دهند. $B(1)$ ، $B(2)$ و $B(3)$ دارای طیف یکسان، $\{b_n; n = 1, 2, \dots\}$ هستند. با استفاده از پایه‌هایی که این سه مشاهده‌پذیر را در $\mathcal{E}(1)$ و $\mathcal{E}(2)$ و $\mathcal{E}(3)$ تعریف می‌کنند، می‌توانیم با اختیار حاصلضرب تانسوری، یک پایه راست‌هنجار \mathcal{E} بسازیم، که، آن را به صورت زیر نمایش می‌دهیم

$$\{|1 : b_i; 2 : b_j; 3 : b_k\}; i, j, k = 1, 2, \dots\} \quad (11-14)$$

کنه‌های $\{|1 : b_i; 2 : b_j; 3 : b_k\}$ ویژه‌بردارهای مشترک از گسترش $B(1)$ ، $B(2)$ و $B(3)$ در \mathcal{E} هستند که ویژه‌مقدارهای آنها به ترتیب عبارت‌اند از b_i ، b_j و b_k .

چون سه ذره یکسان‌اند، نمی‌توانیم $B(1)$ یا $B(2)$ یا $B(3)$ را اندازه‌گیری کنیم، زیرا شماره‌گذاری هیچ مفهوم فیزیکی ندارد. اما، می‌توان کمیت فیزیکی B را برای هر کدام از سه ذره اندازه‌گیری کرد. فرض کنید چنین اندازه‌گیری‌ای منجر به سه ویژه‌مقدار متفاوت b_n ، b_p و b_q شده باشد. در این صورت واگنی تعویض ظاهر می‌شود، زیرا حالت سیستم بعد از این اندازه‌گیری را می‌توانیم پیش‌پیش، توسط هر یک از کنه‌های زیرفضای \mathcal{E} که از شش بردار پایه زیر پدید می‌آید نمایش دهیم

$$\begin{aligned} & |1 : b_n; 2 : b_p; 3 : b_q\rangle, |1 : b_q; 2 : b_n; 3 : b_p\rangle, |1 : b_p; 2 : b_q; 3 : b_n\rangle, \\ & |1 : b_n; 2 : b_q; 3 : b_p\rangle, |1 : b_p; 2 : b_n; 3 : b_q\rangle, |1 : b_q; 2 : b_p; 3 : b_n\rangle \end{aligned} \quad (12-14)$$

بنابراین یک اندازه‌گیری کامل بر روی هر یک از ذرات، امکان تعیین یک کت منحصر به فرد از فضای حالت سیستم را فراهم نمی‌کند.

یادداشت:

البته، ابهام ناشی از واگنی تعویض، اگر دو تا از ویژه‌مقدارهای پیداشده در اندازه‌گیری مساوی باشند از اهمیت کمتری برخوردار است. این ابهام، در مورد خاصی که در آن سه نتیجه یکسان باشند، برطرف می‌شود.

۲-۱۴ عملگرهای جایگشت

قبل از بیان یک اصل موضوع دیگر که به کمک آن می‌توانیم ابهام ناشی از واگنی تعویض را برطرف کنیم، برخی عملگرها را، که x در فضای حالت کل سیستم مورد نظر تعریف می‌شوند، مطالعه می‌کنیم؛ این عملگرها در واقع جای ذرات مختلف سیستم را تعویض می‌کنند. استفاده از این عملگرهای جایگشت، استدلال و محاسبات بخشهای ۳-۱۴ و ۴-۱۴ را ساده خواهند کرد.

۱-۲-۱۴ سیستمهای دوزره‌ای

الف) تعریف عملگر جایگشت P_{21}

یک سیستم متشکل از دو ذره یا اسپینی یکسان s را در نظر بگیرید. در اینجا، لزومی ندارد که این دو ذره یکسان باشند؛ بلکه کافی است که فضاهای حالت تک‌تک آنها پکریخت باشد. بنابراین، برای اجتناب از مشکلاتی که هنگام یکسان بودن ذرات پدید می‌آیند، فرض می‌کنیم که دو ذره یکسان نیستند: شماره‌های (۱) و (۲) که با آنها ذرات را برچسب می‌زنیم، نوع آنها را مشخص می‌کند: به‌عنوان مثال، (۱) معرف پروتون و (۲) معرف الکترون خواهد بود.

پایه $\{|u_i\rangle\}$ را در فضای حالت $\mathcal{E}(1)$ متعلق به ذره (۱)، انتخاب می‌کنیم. چون دو ذره دارای اسپینی یکسان هستند، $\mathcal{E}(2)$ هم‌ریخت $\mathcal{E}(1)$ است، و می‌تواند با همان پایه پدید آید با اختیار حاصلضرب تانسوری، پایه زیر را در فضای حالت \mathcal{E} سیستم تشکیل می‌دهیم

$$\{|1 : u_i; 2 : u_j\rangle\} \quad (13-14)$$

چون ترتیب بردارها در حاصلضرب تانسوری اهمیتی ندارد، داریم

$$|2 : u_j; 1 : u_i\rangle \equiv |1 : u_i; 2 : u_j\rangle \quad (14-14)$$

اما، توجه کنید که

$$|1 : u_j; 2 : u_i\rangle \neq |1 : u_i; 2 : u_j\rangle \quad \text{اگر } i \neq j \quad (15-14)$$

در این صورت، عملگر جایگشت P_{21} به صورت یک عملگر خطی تعریف می شود که عمل آن بر روی بردارهای پایه با رابطه زیر داده می شود

$$P_{21}|\lambda : u_i; \nu : u_j\rangle = |\nu : u_i; \lambda : u_j\rangle = |\lambda : u_j; \nu : u_i\rangle \quad (16-14)$$

عمل این عملگر بر هر کتی از \mathcal{E} به راحتی از بسط این کت بر پایه (۱۳-۱۴) به دست می آید. یادداشت:

اگر پایه متشکل از ویژه حالت های مشترک مشاهده پذیر مکان \mathbf{R} و مؤلفه S_z اسپین را انتخاب کنیم، رابطه (۱۶-۱۴) را می توانیم به صورت زیر بنویسیم

$$P_{21}|\lambda : \mathbf{r}, \varepsilon; \nu : \mathbf{r}', \varepsilon'\rangle = |\nu : \mathbf{r}', \varepsilon'; \lambda : \mathbf{r}, \varepsilon\rangle \quad (17-14)$$

هر کت $|\psi\rangle$ از فضای حالت \mathcal{E} را می توان با مجموعه ای از $(2s + 1)^2$ تابع از شش متغیر نمایش داد

$$|\psi\rangle = \sum_{\varepsilon, \varepsilon'} \int d^3r d^3r' \psi_{\varepsilon, \varepsilon'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') |\lambda : \mathbf{r}, \varepsilon; \nu : \mathbf{r}', \varepsilon'\rangle \quad (18-14)$$

که در آن

$$\psi_{\varepsilon, \varepsilon'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \lambda : \mathbf{r}, \varepsilon; \nu : \mathbf{r}', \varepsilon' | \psi \rangle \quad (19-14)$$

پس داریم

$$P_{21}|\psi\rangle = \sum_{\varepsilon, \varepsilon'} \int d^3r d^3r' \psi_{\varepsilon, \varepsilon'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') |\lambda : \mathbf{r}', \varepsilon; \nu : \mathbf{r}, \varepsilon\rangle \quad (20-14)$$

با تغییر دادن اسامی متغیرهای ظاهری

$$\begin{aligned} \varepsilon &\longleftrightarrow \varepsilon' \\ \mathbf{r} &\longleftrightarrow \mathbf{r}' \end{aligned} \quad (21-14)$$

فرمول (۲۰-۱۴) را به فرمول زیر تبدیل می کنیم

$$P_{21}|\psi\rangle = \sum_{\varepsilon, \varepsilon'} \int d^3r d^3r' \psi_{\varepsilon, \varepsilon'}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) |\lambda : \mathbf{r}, \varepsilon; \nu : \mathbf{r}', \varepsilon'\rangle \quad (22-14)$$

۱. به راحتی می توان نشان داد که عملگر P_{21} که به این ترتیب تعریف می شود، به پایه $\{|u_i\rangle\}$ انتخابی بستگی ندارد.

در نتیجه، توابع

$$\psi_{\varepsilon, \varepsilon'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \lambda : \mathbf{r}, \varepsilon; \chi : \mathbf{r}', \varepsilon' | P_{\tau_1} | \psi \rangle \quad (23-14)$$

که معرف کت $|\psi'\rangle = P_{\tau_1} |\psi\rangle$ هستند را می‌توانیم از توابع (۱۹-۱۴) که معرف کت $|\psi\rangle$ هستند، با معکوس کردن $(\mathbf{r}, \varepsilon)$ و $(\mathbf{r}', \varepsilon')$ به دست آوریم

$$\psi'(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \psi_{\varepsilon', \varepsilon}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \quad (24-14)$$

ب) خواص P_{τ_1}

از تعریف (۱۶-۱۴) به طور مستقیم مشاهده می‌کنیم

$$(P_{\tau_1})^2 = 1 \quad (25-14)$$

عملگر P_{τ_1} معکوس خودش است.

به راحتی می‌توان نشان داد که P_{τ_1} هرمیتی است

$$P_{\tau_1}^\dagger = P_{\tau_1} \quad (26-14)$$

عناصر ماتریسی P_{τ_1} در پایه $\{|\lambda : u_i; \chi : u_j\rangle\}$ عبارت‌اند از

$$\begin{aligned} \langle \lambda : u_i; \chi : u_j | P_{\tau_1} | \lambda : u_i; \chi : u_j \rangle &= \langle \lambda : u_i; \chi : u_j | \lambda : u_j; \chi : u_i \rangle \\ &= \delta_{i'j} \delta_{ji} \end{aligned} \quad (27-14)$$

و عناصر ماتریسی $P_{\tau_1}^\dagger$ بنا به تعریف عبارت‌اند از

$$\begin{aligned} \langle \lambda : u_i; \chi : u_j | P_{\tau_1}^\dagger | \lambda : u_i; \chi : u_j \rangle &= (\langle \lambda : u_i; \chi : u_j | P_{\tau_1} | \lambda : u_i; \chi : u_j \rangle)^* \\ &= (\langle \lambda : u_i; \chi : u_j | \lambda : u_j; \chi : u_i \rangle)^* \\ &= \delta_{ij'} \delta_{ji'} \end{aligned} \quad (28-14)$$

بنابراین، هر یک از عناصر ماتریسی $P_{\tau_1}^\dagger$ یا عنصر ماتریسی نظیر از P_{τ_1} برابر است. این گفته، به رابطه (۲۶-۱۴) منجر می‌شود.

از روابط (۲۵-۱۴) و (۲۶-۱۴) نتیجه می‌گیریم که P_{τ_1} یکایی نیز هست

$$P_{\tau_1}^\dagger P_{\tau_1} = P_{\tau_1} P_{\tau_1}^\dagger = 1 \quad (29-14)$$

ج) کتهای متقارن و پادمتقارن. متقارن و پادمتقارن

بنابر (۱۴-۲۶)، ویژه‌مقدارهای P_{r1} باید حقیقی باشند. چون، بنابر (۱۴-۲۵)، مربعهای آنها برابر با ۱ اند، این ویژه‌مقدارها +۱ و -۱ خواهند بود. ویژه‌بردارهای P_{r1} وابسته به ویژه‌مقدار +۱ را متقارن، و ویژه‌بردارهای متناظر با ویژه‌مقدار -۱ را پادمتقارن می‌نامیم

$$P_{r1}|\psi_S\rangle = |\psi_S\rangle \implies |\psi_S\rangle \quad \text{مقارن} \quad (۱۴-۳۰)$$

$$P_{r1}|\psi_A\rangle = -|\psi_A\rangle \implies |\psi_A\rangle \quad \text{پادمتقارن}$$

حال دو عملگر زیر را در نظر بگیرید

$$S = \frac{1}{2}(1 + P_{r1}) \quad (۱۴-۳۱ \text{ الف})$$

$$A = \frac{1}{2}(1 - P_{r1}) \quad (۱۴-۳۱ \text{ ب})$$

این عملگرها، تصویرکننده هستند، زیرا طبق (۱۴-۲۵) داریم

$$S^2 = S \quad (۱۴-۳۲ \text{ الف})$$

$$A^2 = A \quad (۱۴-۳۲ \text{ ب})$$

و، علاوه بر این، از (۱۴-۲۶) می‌توان نشان داد که

$$S^\dagger = S \quad (۱۴-۳۳ \text{ الف})$$

$$A^\dagger = A \quad (۱۴-۳۳ \text{ ب})$$

S و A تصویرکننده بر زیرفضاهای متعامد نیز هستند، زیرا بنابر (۱۴-۲۵) داریم

$$SA = AS = 0 \quad (۱۴-۳۴)$$

این زیرفضاها مکمل یکدیگرند، زیرا بر طبق تعاریف (۱۴-۳۱) داریم

$$S + A = 1 \quad (۱۴-۳۵)$$

اگر $|\psi\rangle$ یک کت اختیاری از فضای حالت \mathcal{E} باشد، همان طور که از (۱۴-۲۵) به راحتی دیده می شود، $S|\psi\rangle$ یک کت متقارن و $A|\psi\rangle$ یک کت پادمقارن است، یعنی

$$\begin{aligned} P_{\tau_1} S|\psi\rangle &= S|\psi\rangle \\ P_{\tau_1} A|\psi\rangle &= -A|\psi\rangle \end{aligned} \quad (۱۴-۳۶)$$

به این دلیل، عملگرهای S و A را، به ترتیب متقارن گر و پادمقارن گر می گویند.

یادداشت:

همین کت متقارن، از اعمال S بر $P_{\tau_1}|\psi\rangle$ یا بر خود $|\psi\rangle$ به دست می آید

$$SP_{\tau_1}|\psi\rangle = S|\psi\rangle \quad (۱۴-۳۷)$$

همچنین، برای پادمقارن گر داریم

$$AP_{\tau_1}|\psi\rangle = -A|\psi\rangle \quad (۱۴-۳۸)$$

(د) تبدیل مشاهده پذیرها توسط جایگشت

مشاهده پذیر $B(1)$ را در نظر بگیرید، که ابتدا در $\mathcal{E}(1)$ تعریف می شود و سپس به $\mathcal{E}(2)$ بسط داده می شود. همیشه این امکان وجود دارد که پایه $\{|u_i\rangle\}$ در $\mathcal{E}(1)$ را از ویژه بردارهای $B(1)$ بسازیم (ویژه مقدارهای متناظر را با b_i نمایش می دهیم). حال، عمل عملگر $P_{\tau_1}^\dagger B(1) P_{\tau_1}$ را بر روی یک کت پایه اختیاری از \mathcal{E} محاسبه می کنیم

$$\begin{aligned} P_{\tau_1} B(1) P_{\tau_1}^\dagger |\lambda : u_i; \nu : u_j\rangle &= P_{\tau_1} B(1) |\lambda : u_j; \nu : u_i\rangle \\ &= b_j P_{\tau_1} |\lambda : u_j; \nu : u_i\rangle \\ &= b_j |\lambda : u_i; \nu : u_j\rangle \end{aligned} \quad (۱۴-۳۹)$$

اگر مستقیماً مشاهده پذیر $B(2)$ را بر کت پایه انتخابی اثر می دادیم، همین نتیجه را به دست می آوردیم. در نتیجه

$$P_{\tau_1} B(1) P_{\tau_1}^\dagger = B(2) \quad (۱۴-۴۰)$$

استدلال مشابه، نشان می‌دهد که

$$P_{r_1} B(2) P_{r_1}^\dagger = B(1) \quad (41-14)$$

در \mathcal{E} ، نیز مشاهده‌پذیرهایی مانند $B(1) + C(2)$ یا $B(1)C(2)$ وجود دارند که همزمان هر دو شاخص را دارند. به‌وضوح داریم

$$P_{r_1} [B(1) + C(2)] P_{r_1}^\dagger = B(2) + C(1) \quad (42-14)$$

همین‌طور، با استفاده از (۲۹-۱۴) به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} P_{r_1} B(1) C(2) P_{r_1}^\dagger &= P_{r_1} B(1) P_{r_1}^\dagger P_{r_1} C(2) P_{r_1}^\dagger \\ &= B(2) C(1) \end{aligned} \quad (43-14)$$

این نتایج را می‌توانیم به تمام مشاهده‌پذیرهای در \mathcal{E} که می‌توانند برحسب مشاهده‌پذیرهایی از نوع $B(1)$ و $C(2)$ بیان شوند، تعمیم دهیم. این مشاهده‌پذیرها را با $\mathcal{O}(1, 2)$ نمایش می‌دهیم

$$P_{r_1} \mathcal{O}(1, 2) P_{r_1}^\dagger = \mathcal{O}(2, 1) \quad (44-14)$$

$\mathcal{O}(2, 1)$ مشاهده‌پذیری است که از $\mathcal{O}(1, 2)$ با تعویض ۱ و ۲ در همه جا، به‌دست می‌آید. مشاهده‌پذیر $\mathcal{O}_S(1, 2)$ را در صورتی متقارن می‌گویند که

$$\mathcal{O}_S(2, 1) = \mathcal{O}_S(1, 2) \quad (45-14)$$

بر طبق (۴۴-۱۴)، تمام مشاهده‌پذیرهای متقارن در رابطه زیر صدق می‌کنند

$$P_{r_1} \mathcal{O}_S(1, 2) = \mathcal{O}_S(1, 2) P_{r_1} \quad (46-14)$$

یعنی

$$[\mathcal{O}_S(1, 2), P_{r_1}] = 0 \quad (47-14)$$

پس، مشاهده‌پذیرهای متقارن با عملگر جایگشت جابه‌جا می‌شوند.

۱۴-۲-۲ سیستمهای شامل تعداد دلخواهی ذره

در فضای حالت سیستمی متشکل از N ذره با اسپینهای مساوی (که موقتاً فرض می‌کنیم طبیعتهای متفاوتی داشته باشند)، می‌توان تعداد $N!$ عملگر جایگشت را تعریف کرد (که یکی از آنها عملگر همانی است). اگر N بزرگتر از ۲ باشد، خواص این عملگرها پیچیده‌تر از خواص P_{21} است. برای داشتن یک دید کلی از تغییرات حاصل وقتی N از ۲ بزرگتر است، موردی را که در آن $N = 3$ است، به اختصار مطالعه می‌کنیم.

الف) تعریف عملگرهای جایگشت

بنابراین، سیستمی را متشکل از سه ذره در نظر بگیرید که لزوماً یکسان نیستند ولی اسپینهای آنها یکسان است. نظیر بخش (۱۴-۲-۱-الف) با اختیار حاصلضرب تانسوری، پایه‌ای از فضای حالت سیستم می‌سازیم

$$\{|\lambda : u_i; \mu : u_j; \nu : u_k\rangle\} \quad (48-14)$$

در این مورد، شش عملگر جایگشت وجود دارد که آنها را به صورت زیر نشان می‌دهیم

$$P_{122}, P_{212}, P_{221}, P_{123}, P_{213}, P_{231} \quad (49-14)$$

بنا به تعریف، عملگر P_{npp} (که در آن n, p, m یک جایگشت اختیاری از اعداد ۱، ۲، ۳ است) و عملگر خطی است و عمل آن بر روی بردارهای پایه از فرمول زیر تبعیت کند

$$P_{npp}|\lambda : u_i; \mu : u_j; \nu : u_k\rangle = |n : u_i; p : u_j; q : u_k\rangle \quad (50-14)$$

به‌عنوان مثال

$$\begin{aligned} P_{221}|\lambda : u_i; \mu : u_j; \nu : u_k\rangle &= |\mu : u_i; \nu : u_j; \lambda : u_k\rangle \\ &= |\lambda : u_k; \mu : u_i; \nu : u_j\rangle \end{aligned} \quad (51-14)$$

بنابراین، P_{122} متناظر با عملگر همانی است. عمل P_{npp} روی هر کت اختیاری از فضای حالت می‌تواند به سهولت از بسط این کت روی پایه (۴۸-۱۴) به دست آید. به طریق مشابه، $N!$ عملگر جایگشت وابسته به یک سیستم N ذره با اسپینهای یکسان را می‌توانیم تعریف کنیم.

(ب) خواص

۱. مجموعه عملگرهای جایگشت، یک گروه تشکیل می دهد

با استفاده از عملگرهای (۱۴-۴۹) می توان نشان داد که:

۱. P_{123} یک عملگر همانی است.

۲. حاصلضرب دو عملگر جایگشت نیز یک عملگر جایگشت است. به عنوان مثال، می توانیم نشان دهیم که

$$P_{212}P_{122} = P_{211} \quad (52-14)$$

برای این منظور، طرف چپ را بر روی یک کت پایه دلخواه اثر می دهیم

$$\begin{aligned} P_{212}P_{122}|\lambda : u_i; 2 : u_j; 3 : u_k\rangle &= P_{212}|\lambda : u_i; 3 : u_j; 2 : u_k\rangle \\ &= P_{212}|\lambda : u_i; 2 : u_k; 3 : u_j\rangle \\ &= |3 : u_i; 1 : u_k; 2 : u_j\rangle \\ &= |\lambda : u_k; 2 : u_j; 3 : u_i\rangle \end{aligned} \quad (53-14)$$

اثر P_{211} عملاً به همان نتیجه منتهی می شود

$$\begin{aligned} P_{211}|\lambda : u_i; 2 : u_j; 3 : u_k\rangle &= |3 : u_i; 2 : u_j; 1 : u_k\rangle \\ &= |\lambda : u_k; 2 : u_j; 3 : u_i\rangle \end{aligned} \quad (54-14)$$

۳. هر عملگر جایگشت دارای یک وارون است، که خود آن نیز یک عملگر جایگشت است. با استدلالی

نظیر ۲، می توان به سادگی نشان داد که

$$\begin{aligned} P_{123}^{-1} &= P_{123}; & P_{212}^{-1} &= P_{212}; & P_{211}^{-1} &= P_{212} \\ P_{122}^{-1} &= P_{122}; & P_{212}^{-1} &= P_{212}; & P_{211}^{-1} &= P_{211} \end{aligned} \quad (55-14)$$

توجه کنید که عملگرهای جایگشت با یکدیگر جابه جایی نمی شوند. به عنوان مثال

$$P_{122}P_{212} = P_{212} \quad (56-14)$$

که در مقایسه با (۱۴-۵۲)، نشان می دهد که جابه جاگر P_{122} و P_{212} صفر نیست.

۲. ترانزیشنها، پاریته یک عملگر جایگشت

ترانزیشن، جایگشتی است که فقط نقش دو ذره را، بدون تأثیر بر سایر ذرات عوض می کند. از

عملگرهای (۱۴-۴۹)، سه عملگر آخر، عملگرهای ترانهش^۱ هستند. عملگرهای ترانهش هرمیتی‌اند و هر کدام از آنها وارون خود هستند، به گونه‌ای که یکانی نیز هستند [اثبات این خواص نظیر اثباتهای (۱۴-۲۶)، (۱۴-۲۵) و (۱۴-۲۹) است].

هر عملگر جایگشت را می‌توان به حاصلضربی از عملگرهای ترانهش تجزیه کرد. به عنوان مثال، دومین عملگر (۱۴-۴۹) را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$P_{112} = P_{122}P_{212} = P_{211}P_{122} = P_{212}P_{211} = P_{122}P_{212}(P_{122})^2 = \dots \quad (57-14)$$

این تجزیه منحصر به فرد نیست، اما، برای یک جایگشت مفروض، می‌توان نشان داد که پاریتۀ تعداد ترانهشهایی که عملگر را می‌توان به آنها تجزیه کرد، همیشه یکی است: این را پاریتۀ جایگشت مورد نظر می‌گویند. بنابراین، سه عملگر اول (۱۴-۴۹) زوج، و سه عملگر آخر فردند. به ازای هر N اختیاری، تعداد جایگشتهای فرد و زوج همواره یکی است.

۳. عملگرهای جایگشت یکانی هستند

عملگرهای جایگشت، که حاصلضرب عملگرهای ترانهش (که همه آنها یکانی‌اند) هستند، نیز یکانی هستند. اما، چون عملگرهای ترانهش عموماً با یکدیگر جابه‌جا نمی‌شوند لزوماً عملگرهای جایگشت، هرمیتی نیستند.

سرانجام، توجه کنید که الحاقی یک عملگر جایگشت مفروض، دارای همان پاریتۀ عملگر است، زیرا این عملگر الحاقی با حاصلضرب همان عملگرهای ترانهش است که به ترتیب عکس گرفته شوند.

ج) کتهای کاملاً متقارن یا پادمستقارن. متقارن‌گر و پادمستقارن‌گر

چون عملگرهای جایگشت، به ازای $N > 2$ جابه‌جا نمی‌شوند، نمی‌توان پایه‌ای مشکل از ویژه‌بردارهای مشترک این عملگرها ساخت. با وجود این، خواهیم دید که کتهایی وجود دارند که به طور همزمان، ویژه‌بردارهای تمام عملگرهای جایگشت هستند.

P_α را معرف یک عملگر جایگشت اختیاری در نظر می‌گیریم که وابسته به یک سیستم N ذره‌ای با اسپینهای مساوی است: α نشان‌دهندهٔ یک جایگشت دلخواه از اولین N عدد صحیح است. کت $|\psi_s\rangle$ که برای آن به ازای هر جایگشت P_α داشته باشیم

$$P_\alpha |\psi_s\rangle = |\psi_s\rangle \quad (58-14)$$

۱. البته، به ازای $N = 2$ ، تنها جایگشت ممکن همان ترانهش است.

کاملاً متقارن نامیده می‌شود. همچنین، کت کاملاً پادمتقارن $|\psi_A\rangle$ ، بنا به تعریف^۱، در رابطه زیر صدق می‌کند

$$P_\alpha |\psi_A\rangle = \varepsilon_\alpha |\psi_A\rangle \quad (59-14)$$

که در آن

$$\begin{aligned} \varepsilon_\alpha = +1 & \quad \text{اگر } P_\alpha \text{ یک جایگشت زوج باشد} \\ \varepsilon_\alpha = -1 & \quad \text{اگر } P_\alpha \text{ یک جایگشت فرد باشد} \end{aligned} \quad (60-14)$$

مجموعه کتهای کاملاً متقارن، یک زیرفضای برداری \mathcal{E}_S از فضای حالت \mathcal{E} ، و مجموعه کتهای کاملاً پادمتقارن، یک زیرفضای \mathcal{E}_A تشکیل می‌دهند. حال، دو عملگر زیر را در نظر بگیرید

$$S = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} P_\alpha \quad (61-14)$$

و

$$A = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \varepsilon_\alpha P_\alpha \quad (62-14)$$

که در آنها جمع‌بندیها بر روی $N!$ جایگشت اولین N عدد صحیح صورت می‌گیرد، و ε_α با رابطه (۶۰-۱۴) تعریف می‌شود. نشان خواهیم داد که S و A به ترتیب عبارت از تصویرکننده‌های بر روی \mathcal{E}_S و \mathcal{E}_A هستند. به این دلیل، آنها را متقارنگر و پادمتقارنگر می‌نامیم.

S و A عملگرهای هرمیتی‌اند

$$S^\dagger = S \quad (63-14)$$

$$A^\dagger = A \quad (64-14)$$

۱. بنا بر ویژگی بیان‌شده در قسمت (۱۴-۲-۲-ب)، این تعریف را می‌توان منحصرأ بر پایه عملگرهای ترانهشی نیز بنا نهاد. هر عملگر ترانهش، بگ کت کاملاً متقارن را ناوردأ باقی می‌گذارد و یک کت کاملاً پادمتقارن را به ضد آن تبدیل می‌کند.

همان طور که در بالا دیدیم (بخش ۱۴-۲-۲-۳)، الحاقی P_α^\dagger یک عملگر جایگشت مفروض، عملگر جایگشت دیگری با همان یاریته است (که، علاوه بر آن، بر P_α^{-1} منطبق می شود). بنابراین، به دست آوردن الحاقی طرفهای راست تعاریف S و A ، فقط کافی است که ترتیب جمله‌های موجود در جمع بندیها را عوض کنیم (زیرا مجموعه P_α^{-1} باز هم یک گروه جایگشت است).

همچنین، اگر P_α یک عملگر جایگشت اختیاری باشد، داریم

$$P_\alpha S = SP_\alpha = S \quad (۱۴-۶۵ \text{ الف})$$

$$P_\alpha A = AP_\alpha = \varepsilon_\alpha A \quad (۱۴-۶۵ \text{ ب})$$

این امر ناشی از این واقعیت است که $P_\alpha P_\alpha = P_\beta$ نیز یک عملگر جایگشت است

$$P_\alpha P_\alpha = P_\beta \quad (۱۴-۶۶)$$

به طوری که

$$\varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha = \varepsilon_\alpha \quad (۱۴-۶۷)$$

اگر به ازای P_α ثابت، تمام جایگشتهای گروه را به طور متوالی برای P_α انتخاب کنیم، مشاهده می کنیم که P_β ها هر کدام با یکی، و فقط با یکی، از این جایگشتهای یکسان هستند (البته، به ترتیبی متفاوت)، در نتیجه

$$P_\alpha S = \frac{1}{N!} \sum_\alpha P_\alpha P_\alpha = \frac{1}{N!} \sum_\beta P_\beta = S \quad (۱۴-۶۸ \text{ الف})$$

$$P_\alpha A = \frac{1}{N!} \sum_\alpha \varepsilon_\alpha P_\alpha P_\alpha = \frac{1}{N!} \varepsilon_\alpha \sum_\beta P_\beta = \varepsilon_\alpha A \quad (۱۴-۶۸ \text{ ب})$$

همچنین، می توانیم روابط مشابهی را که در آنها S و A از راست در P_α ضرب می شوند، ثابت کنیم.

از فرمول (۱۴-۶۵)، مشاهده می کنیم که

$$S^\dagger = S$$

$$A^\dagger = A \quad (۱۴-۶۹)$$

و، به علاوه

$$AS = SA = 0 \quad (۱۴-۷۰)$$

زیرا، در این مورد داریم

$$S^\dagger = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} P_{\alpha} S = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} S = S$$

$$A^\dagger = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} P_{\alpha} A = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha}^\dagger A = A \quad (71-14)$$

چون هر مجموع شامل $N!$ جمله است؛ علاوه بر این داریم

$$AS = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} P_{\alpha} S = \frac{1}{N!} S \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} = 0 \quad (72-14)$$

زیرا نیمی از ε_{α} ها برابر $+1$ و نیم دیگر برابر -1 هستند (۱۴-۲-۲-ب).

بنابراین، S و A تصویرکننده هستند. این عملگرها، به ترتیب، بر \mathcal{E}_S و \mathcal{E}_A تصویر می‌کنند زیرا، بر طبق (۱۴-۶۵)، عمل آنها بر روی هر کت $|\psi\rangle$ از فضای حالت، ایجاد یک کت کاملاً متقارن یا کاملاً پادمتقارن می‌کند

$$P_{\alpha_0} S|\psi\rangle = S|\psi\rangle \quad (14-73 \text{ الف})$$

$$P_{\alpha_0} A|\psi\rangle = \varepsilon_{\alpha_0} A|\psi\rangle \quad (14-73 \text{ ب})$$

یادداشتها:

۱. کت کاملاً متقارنی که از عمل S بر روی $P_{\alpha}|\psi\rangle$ ساخته می‌شود، که در آن P_{α} یک جایگشت اختیاری است، مانند کتی است که از $|\psi\rangle$ به دست می‌آید، زیرا عبارات (۱۴-۶۵) نشان می‌دهند که

$$SP_{\alpha}|\psi\rangle = S|\psi\rangle \quad (74-14)$$

همانند کتهای کاملاً پادمتقارن نظیر، این کتها، حداکثر در علامتها با هم متفاوت‌اند

$$AP_{\alpha}|\psi\rangle = \varepsilon_{\alpha} A|\psi\rangle \quad (75-14)$$

۲. برای $N > 2$ ، متقارن‌گر و پادمتقارن‌گر، تصویرکننده‌های بر زیرفضاهای مکمل نیستند. به عنوان مثال، هنگامی که $N = 3$ است، به سادگی می‌توان، [با استفاده از این واقعیت که سه

جایگشت اول (۱۴-۴۹) زوج و بقیه فردند] رابطه زیر را به دست آورد

$$S + A = \frac{1}{3}(P_{123} + P_{231} + P_{312}) \neq 1 \quad (۷۶-۱۴)$$

به عبارت دیگر، فضای حالت، برابر با جمع مستقیم زیر فضای \mathcal{E}_S کتهای کاملاً متقارن، و زیر فضای \mathcal{E}_A کتهای کاملاً پادمتقارن نیست.

(د) تبدیل مشاهده پذیرها توسط جایگشت

در بخش (۱۴-۲-۲-ب) نشان دادیم که هر عملگر جایگشت از یک سیستم N ذره ای را می توان به حاصل ضربی از عملگرهای تراننش مشابه با عملگر P_{21} ، که در بخش ۱۴-۲-۱ مطالعه کردیم، تجزیه کرد. برای این عملگرهای تراننش، می توانیم بحثهای بخش (۱۴-۲-۱-د) را برای تعیین رفتار مشاهده پذیرهای مختلف سیستم، هنگامی که آنها را از طرف چپ در یک عملگر جایگشت اختیاری P_α و از طرف راست در P_α^\dagger ضرب می کنیم، به کار ببریم.

به ویژه، مشاهده پذیرهای $\mathcal{O}_S(1, 2, \dots, N)$ ، که بر اثر تعویض شاخصهای $(1, 2, \dots, N)$ کاملاً متقارن هستند، با تمام عملگرهای تراننش و از این رو، با تمام عملگرهای جایگشت، جابه جا می شوند

$$[\mathcal{O}_S(1, 2, \dots, N), P_\alpha] = 0 \quad (۷۷-۱۴)$$

۱۴-۳ اصل موضوع متقارن سازی

۱۴-۳-۱ بیان اصل موضوع

وقتی یک سیستم، شامل چندین ذره یکسان است، فقط کتهای معینی از فضای حالت آن می توانند حالتی فیزیکی آن را توصیف کنند: کتهای فیزیکی، بسته به طبیعت ذرات یکسان، نسبت به جایگشتهای این ذرات، یا کاملاً متقارن اند یا کاملاً پادمتقارن. ذراتی که برای آنها کتهای فیزیکی متقارن هستند بوزون، و ذراتی که برای آنها کتهای فیزیکی پادمتقارن هستند، فرمیون نامیده می شوند.

بنابراین، اصل موضوع متقارن سازی، فضای حالت را برای یک سیستم از ذرات یکسان محدود می کند. این فضا، برخلاف مورد ذرات با طبیعتی مختلف دیگر برابر با حاصل ضرب تانسوری

هی تک تک فضاهای حالت ذرات تشکیل دهنده سیستم نیست، بلکه بسته به اینکه ذرات از نوع بوزونها یا فرمیونها باشند، فقط یک زیرفضا از \mathcal{E}_S یا \mathcal{E}_A است.

از دیدگاه این اصل موضوع، ذرات موجود در طبیعت به دو دسته تقسیم می‌شوند. تمام ذراتی که تا به حال می‌شناسیم از قاعده تجربی^۱ زیر تبعیت می‌کنند: ذرات با اسپین نیمه صحیح (الکترون، پوزیترون، پروتون، نوترون، میون، و غیره) از دسته فرمیونها، و ذرات با اسپین صحیح (فوتون، مزون، و غیره ...) جزء بوزونها هستند.

یادداشت:

وقتی درستی این قاعده برای ذراتی که آنها را "بنیادی" می‌نامیم تأیید شد، برای سایر ذراتی که متشکل از این ذرات هستند، نیز صادق است. یک سیستم از تعداد زیادی ذرات مرکب یکسان را در نظر بگیرید. جایگشت دو ذره از آنها، معادل با جایگشت همزمان تمام ذرات تشکیل دهنده ذره اول با ذرات نظیر در ذره دوم (که لزوماً با ذرات پیش گفته یکسان هستند) خواهد بود. اگر ذرات مرکب تحت بررسی، فقط از بوزونها تشکیل شده باشند، یا اینکه هر کدام از آنها شامل تعداد زوجی فرمیون باشد (یا، هیچ علامتی تغییر نمی‌کند یا تعداد علامتهایی که تغییر می‌کند زوج است)، این جایگشت باید کت توصیف‌کننده حالت سیستم را تغییری ندهد. از طرف دیگر، ذرات مرکبی که شامل تعداد فردی فرمیون هستند، خود، فرمیون‌اند (تعداد فردی تغییر علامت در جایگشت وجود دارد). در این صورت، اسپین این ذرات مرکب، در مورد اول لزوماً عددی صحیح و در حالت دوم عددی نیمه صحیح است. (فصل ۱۰، بخش ۱۰-۳-۳ ج). پس این ذرات از قاعده فوق‌الذکر پیروی می‌کنند. به عنوان مثال، می‌دانیم که هسته آنها از نوترون و پروتون، که فرمیون هستند (اسپین ۱/۲)، تشکیل شده است. بنابراین، هسته‌هایی که عدد جرمی A آنها (تعداد نوکلئونها) زوج باشد از نوع بوزونها، و آنهایی که عدد جرمی‌شان فرد باشد، از نوع فرمیونها هستند. به این ترتیب، هسته ایزوتوپ هلیوم ${}^4\text{He}$ یک فرمیون و ایزوتوپ ${}^3\text{He}$ ، یک بوزون است. ■

۱۴-۳-۲ رفع واگنی تعویض

ابتدا اینکه چگونه این اصل موضوع جدید، واگنی تعویض و مشکلات ناشی از آن را برطرف می‌کند بررسی می‌کنیم.

بحث قسمت ۱۴-۱ را می‌توانیم به صورت زیر خلاصه کنیم. فرض کنید (u) کتی باشد که می‌تواند یک حالت فیزیکی کاملاً معینی از یک سیستم متشکل از N ذره یکسان را، به طوری

۱. "قضیه اسپینی آماری"، که در نظریه کوانتومی میدانها اثبات می‌شود، حاکی از آن است که این قاعده را می‌توان به عنوان نتیجه‌ای از فرضیه‌های کلی تلقی کرد. با وجود این، ممکن است همه این فرضیه‌ها درست نباشند، و کشف یک بوزون با اسپین نیمه صحیح یا یک فرمیون با اسپین صحیح هنوز محتمل است. همچنین غیرممکن نیست که، برای بعضی ذرات، کتهای فیزیکی بتوانند خواص تقارنی پیچیده‌تری از آنچه که در اینجا مطالعه کردیم، داشته باشند.

ریاضی توصیف کند. اگر P_α یک عملگر جایگشت دلخواه باشد، $P_\alpha|u\rangle$ می‌تواند علاوه بر $|u\rangle$ ، این حالت فیزیکی را نیز توصیف کند. این مطلب، در مورد هرکت متعلق به زیرفضای \mathcal{E}_u که توسط $|u\rangle$ و تمام جایگشت‌های $P_\alpha|u\rangle$ آن پدید آمده باشد، نیز صادق است. بسته به کت $|u\rangle$ انتخابی، بعد \mathcal{E}_u می‌تواند بین ۱ و $N!$ تغییر کند. اگر این بعد بزرگتر از ۱ باشد، چندین کت ریاضی به یک حالت فیزیکی متناظرند: به این ترتیب، یک واگنی تعویض وجود دارد.

اصل موضوع جدیدی که معرفی کردیم، رده‌کنهای ریاضی‌ای که می‌توانند یک حالت فیزیکی را توصیف کنند، به‌طور قابل ملاحظه‌ای محدود می‌سازد: این کتها باید برای بوزونها لزوماً متعلق به \mathcal{E}_S ، و برای فرمیونها متعلق به \mathcal{E}_A باشند. اگر بتوانیم نشان دهیم که \mathcal{E}_u شامل یک کت منفرد از \mathcal{E}_S یا یک کت منفرد از \mathcal{E}_A است، می‌توانیم بگوییم که مشکلات مربوط به واگنی تعویض حذف شده است.

برای این منظور، از روابط $S = SP_\alpha$ یا $A = \varepsilon_\alpha AP_\alpha$ ، که در قسمت (۱۴-۶۵) اثبات کردیم، استفاده می‌کنیم. داریم

$$S|u\rangle = SP_\alpha|u\rangle \quad (۱۴-۷۸ \text{ الف})$$

$$A|u\rangle = \varepsilon_\alpha AP_\alpha|u\rangle \quad (۱۴-۷۸ \text{ ب})$$

این روابط حاکی از آن‌اند که تصویرهای کتهای مختلف بر \mathcal{E}_S و \mathcal{E}_A که \mathcal{E}_u را پدید می‌آورند، و در نتیجه، تصویرهای تمام کتهای \mathcal{E}_u ، هم‌خط‌اند. به این ترتیب، اصل موضوع متقارن‌سازی، بدون هیچ ابهامی کت ε_u را که باید به حالت فیزیکی مورد نظر وابسته باشد (با تقریب یک ضریب ثابت) نشان می‌دهد: $|u\rangle$ برای بوزونها و $A|u\rangle$ برای فرمیونها. این کت را کت فیزیکی گویند.

یادداشت:

این امکان وجود دارد که تمام کتهای \mathcal{E}_u دارای یک تصویر صفربر روی \mathcal{E}_A (یا \mathcal{E}_S) باشند. در این مورد، اصل موضوع متقارن‌سازی، حالت فیزیکی متناظر را مستثنی می‌کند. بعداً (بخشهای ۱۴-۳-ج و ۱۴-۳-ب) در بحث فرمیونها، مثالهایی را از این وضعیت ملاحظه خواهیم کرد. ■

۱۴-۳-۳ ساختن کتهای فیزیکی

الف) قاعده ساختن

بحث قسمت قبل، مستقیماً به قاعده زیر برای ساختن یک کت منحصر به فرد (کت فیزیکی) متناظر با یک حالت فیزیکی مفروض از یک سیستم متشکل از N ذره یکسان، منجر می‌شود:

۱. ذرات را به طور اختیاری شماره گذاری کنید و کت $|u\rangle$ متناظر با حالت فیزیکی مورد نظر و شماره های داده شده به ذرات را بسازید.

۲. بسته به اینکه ذرات یکسان بوزون یا فرمیون باشند، S یا A را بر $|u\rangle$ اعمال کنید.

۳. کتی را که به این ترتیب به دست آورده اید، بهنجار کنید. با توصیف چند مثال ساده این قاعده را نشان خواهیم داد.

ب) کاربرد در سیستمهای متشکل از دو ذره یکسان

سیستمی متشکل از دو ذره یکسان را در نظر بگیرید. فرض کنید بدانیم که یکی از آنها در حالت منفردی است که توسط کت بهنجارشده $|\varphi\rangle$ مشخص می شود، و دیگری، در حالت منفردی است که کت بهنجارشده $|\chi\rangle$ آن را مشخص می سازد.

ابتدا موردی را در نظر می گیریم که در آن دو کت $|\varphi\rangle$ و $|\chi\rangle$ متمایز باشند. قاعده قبلی را به طریق زیر اعمال می کنیم:

۱. به عنوان مثال، ذره ای را که در حالت $|\varphi\rangle$ قرار دارد با شماره ۱، و ذره ای را که در حالت

$|\chi\rangle$ قرار دارد با شماره ۲ مشخص می کنیم. به این ترتیب داریم

$$|u\rangle = |1; \varphi; 2; \chi\rangle \quad (14-79)$$

۲. اگر ذرات بوزون باشند، $|u\rangle$ را متقارن می کنیم

$$S|u\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|1; \varphi; 2; \chi\rangle + |1; \chi; 2; \varphi\rangle] \quad (14-80 \text{ الف})$$

اگر ذرات فرمیون باشند، $|u\rangle$ را پادمقارن می کنیم

$$A|u\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|1; \varphi; 2; \chi\rangle - |1; \chi; 2; \varphi\rangle] \quad (14-80 \text{ ب})$$

۳. در حالت کلی کتهای (۱۴-۸۰ الف) و (۱۴-۸۰ ب) بهنجارشده نیستند. اگر فرض کنیم

که $|\varphi\rangle$ و $|\chi\rangle$ متعامد باشند، محاسبه ثابت بهنجارش بسیار ساده است. برای بهنجار کردن $S|u\rangle$

یا $A|u\rangle$ ، کافی است به جای ضریب $1/\sqrt{2}$ که در فرمولهای (۱۴-۸۰) ظاهر می شود ضریب

$1/\sqrt{2}$ جایگزین کنیم. از این رو، کت فیزیکی بهنجارشده، در این مورد، را می توان به صورت زیر

نوشت

$$|\varphi; \chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|1; \varphi; 2; \chi\rangle + \varepsilon|1; \chi; 2; \varphi\rangle] \quad (14-81)$$

که برای بوزونها $\varepsilon = +1$ و برای فرمیونها $\varepsilon = -1$ است. حال، فرض خواهیم کرد که دو حالت منفرد $|\varphi\rangle$ و $|\chi\rangle$ یکسان باشند

$$|\varphi\rangle = |\chi\rangle \quad (۸۲-۱۴)$$

در این صورت (۷۹-۱۴) می‌شود

$$|u\rangle = |1 : \varphi; 2 : \chi\rangle \quad (۸۳-۱۴)$$

$|u\rangle$ از قبل متقارن شده است. اگر دو ذره بوزون باشند، در این صورت (۸۳-۱۴) کت فیزیکی وابسته به حالتی است که در آن دو بوزون در یک حالت منفرد $|\varphi\rangle$ قرار دارند. از طرف دیگر، اگر دو ذره فرمیون باشند، می‌بینیم که

$$A|u\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|1 : \varphi; 2 : \varphi\rangle - |1 : \varphi; 2 : \varphi\rangle] = 0 \quad (۸۴-۱۴)$$

در نتیجه، هیچ کتی از \mathcal{E}_A وجود ندارد که بتواند حالت فیزیکی را که در آن دو فرمیون در یک حالت منفرد $|\varphi\rangle$ باشند، توصیف کند. بنابراین، یک چنین حالت فیزیکی توسط اصل موضوع متقارن‌سازی طرد می‌شود. به این ترتیب، برای یک مورد خاص، یک نتیجه اساسی که به "اصل طرد پاولی" موسوم است، برقرار کردیم: دو فرمیون یکسان نمی‌توانند در یک حالت منفرد باشند. این نتیجه پیامدهای فیزیکی بسیار مهمی دارد که آنها را در بخش ۱۴-۴-۱ مورد بحث قرار خواهیم داد.

ج) تعمیم به تعداد دلخواهی ذره

این ایده‌ها را می‌توان به تعداد دلخواه N ذره تعمیم داد. برای اینکه ببینیم چگونه این عمل انجام می‌شود، ابتدا مورد $N = 3$ را بررسی می‌کنیم.

یک حالت فیزیکی از سیستم را در نظر بگیرید که با مشخص کردن سه حالت بهنجار شده منفرد $|\varphi\rangle$ ، $|\chi\rangle$ و $|\omega\rangle$ تعریف شده باشد. حالت $|u\rangle$ که در قاعده بخش ۱۴-۳-۳-الف وارد می‌شود، را می‌توان به صورت زیر انتخاب کرد

$$|u\rangle = |1 : \varphi; 2 : \chi; 3 : \omega\rangle \quad (۸۵-۱۴)$$

موارد بوزونها و فرمیونها را جداگانه مورد بحث قرار خواهیم داد.

۱. مورد بوزونها

با اعمال S بر $|u\rangle$ نتیجه می شود

$$\begin{aligned}
 S|u\rangle &= \frac{1}{3!} \sum_{\alpha} P_{\alpha}|u\rangle \\
 &= \frac{1}{6} [|1: \varphi; 2: \chi; 3: \omega\rangle + |1: \omega; 2: \varphi; 3: \chi\rangle + |1: \chi; 2: \omega; 3: \varphi\rangle \\
 &\quad + |1: \varphi; 2: \omega; 3: \chi\rangle + |1: \chi; 2: \varphi; 3: \omega\rangle + |1: \omega; 2: \chi; 3: \varphi\rangle]
 \end{aligned} \tag{۸۶-۱۴}$$

بنابراین، کافی است کت (۸۶-۱۴) را بهنجار کنیم.

ابتدا فرض می کنیم که سه کت $|\varphi\rangle$ ، $|\chi\rangle$ و $|\omega\rangle$ متعامد باشند. در این صورت شش کتی که در طرف راست (۸۶-۱۴) ظاهر می شوند نیز متعامدند. برای بهنجار کردن (۸۶-۱۴)، کافی است ضریب $1/6$ را با $1/\sqrt{6}$ جایگزین کنیم.

اگر دو حالت $|\varphi\rangle$ و $|\chi\rangle$ ، در عین حالی که بر $|\omega\rangle$ متعامد باقی می مانند، بر هم منطبق شوند، فقط سه کت متمایز در طرف راست (۸۶-۱۴) ظاهر می شوند. در این صورت به راحتی می توان نشان داد که کت فیزیکی بهنجار شده را می توان به صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned}
 |\varphi; \varphi; \omega\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} [|1: \varphi; 2: \varphi; 3: \omega\rangle \\
 &\quad + |1: \varphi; 2: \omega; 3: \varphi\rangle + |1: \omega; 2: \varphi; 3: \varphi\rangle]
 \end{aligned} \tag{۸۷-۱۴}$$

سرانجام، اگر سه حالت $|\varphi\rangle$ ، $|\chi\rangle$ ، $|\omega\rangle$ یکسان باشند، کت

$$|u\rangle = |1: \varphi; 2: \varphi; 3: \varphi\rangle \tag{۸۸-۱۴}$$

مقارن و بهنجار شده است.

۲. مورد فرمیونها

با اعمال A بر $|u\rangle$ نتیجه می شود

$$A|u\rangle = \frac{1}{3!} \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} P_{\alpha} |1: \varphi; 2: \chi; 3: \omega\rangle \tag{۸۹-۱۴}$$

علامتهای جملات مختلف مجموع (۱۴-۸۹) توسط همان قاعده‌ای که برای تعیین علامتهای جملات یک درمینیان 3×3 به کار می‌رود، تعیین می‌شوند. به همین دلیل بهتر است که $A|u\rangle$ را به صورت یک درمینیان اسلاتر بنویسیم

$$A|u\rangle = \frac{1}{3!} \begin{vmatrix} |1:\varphi\rangle & |1:\chi\rangle & |1:\omega\rangle \\ |2:\varphi\rangle & |2:\chi\rangle & |2:\omega\rangle \\ |3:\varphi\rangle & |3:\chi\rangle & |3:\omega\rangle \end{vmatrix} \quad (90-14)$$

$A|u\rangle$ صفر است اگر دو حالت از حالتهای منفرد $|\varphi\rangle$ ، $|\chi\rangle$ یا $|\omega\rangle$ بر هم منطبق باشند، زیرا در این صورت درمینیان (۱۴-۹۰) دارای دو ستون یکسان است. اصل طرد پاؤلی را، که قبلاً در بخش ۱۴-۳-۳ ذکر کردیم، به دست می‌آوریم: یک حالت مکانیک کوانتومی نمی‌تواند به طور همزمان توسط چند فرمیون یکسان اشغال شود.

بالاخره، توجه کنید که اگر سه حالت $|\varphi\rangle$ ، $|\chi\rangle$ ، $|\omega\rangle$ متعامد باشند، شش کتی که در طرف راست (۱۴-۸۹) ظاهر می‌شوند، متعامدند. در این صورت آنچه باید انجام دهیم تا $A|u\rangle$ را بهنجار کنیم، این است که ضریب $1/3!$ در (۱۴-۸۹) یا (۱۴-۹۰) را با $1/\sqrt{3!}$ جایگزین کنیم.

حال، اگر سیستم مورد نظر شامل بیش از سه ذره یکسان باشد، وضعیت، در واقع، مشابه با وضعیتی که الان توصیف کردیم، باقی می‌ماند. می‌توان نشان داد که، برای N بوزون یکسان، همواره می‌توانیم حالت فیزیکی $S|u\rangle$ را از حالتهای منفرد دلخواه $|\varphi\rangle$ ، $|\chi\rangle$ ، ... بسازیم. از طرف دیگر، کت فیزیکی $A|u\rangle$ ، برای فرمیونها، را می‌توان به صورت یک درمینیان اسلاتر $N \times N$ نوشت؛ این مطلب، موردی را که در آن دو حالت منفرد بر هم منطبق باشند طرد می‌کند (در این صورت کت $A|u\rangle$ صفر است). این نتیجه‌گیری نشان می‌دهد که چگونه پیامدهای اصل موضوع جدید، می‌تواند برای سیستمهای فرمیونی و بوزونی متفاوت باشد؛ بعداً در بخش ۱۴-۴ این مطلب را به تفصیل بررسی خواهیم کرد.

د) ساختن یک پایه در فضای حالت فیزیکی

یک سیستم متشکل از N ذره یکسان را در نظر بگیرید. با شروع از یک پایه، $\{|u_i\rangle\}$ ، در فضای حالت یک ذره منفرد، می‌توان پایه

$$\{|1:u_i; 2:u_j; \dots; N:u_p\rangle\}$$

را در فضای حاصلضرب تانسوری \mathcal{E} ، ساخت. اما، چون فضای حالت فیزیکی سیستم \mathcal{E} نیست، بلکه یکی از زیرفضاهای \mathcal{E}_S یا \mathcal{E}_A است، مسئله‌ای که پیش می‌آید این است که چگونه یک پایه در این فضای حالت فیزیکی تعیین کنیم.

با اعمال S (یا A) به کتهای مختلف پایه

$$\{|\lambda : u_i; \mu : u_j; \dots; N : u_p\rangle\}$$

می‌توان یک مجموعه از بردارهایی که \mathcal{E}_S (یا \mathcal{E}_A) را به وجود می‌آورند به دست آورد. فرض کنید که $|\varphi\rangle$ ، به عنوان مثال یک کت دلخواه \mathcal{E}_S باشد (موردی که در آن $|\varphi\rangle$ متعلق به \mathcal{E}_A باشد را می‌توان به همین طریق بررسی کرد). $|\varphi\rangle$ که به \mathcal{E} تعلق دارد، را می‌توان به صورت زیر بسط داد

$$|\varphi\rangle = \sum_{i,j,\dots,p} a_{i,j,\dots,p} |\lambda : u_i; \mu : u_j; \dots; N : u_p\rangle \quad (91-14)$$

چون $|\varphi\rangle$ بنا به فرض به \mathcal{E}_S تعلق دارد، داریم $S|\varphi\rangle = |\varphi\rangle$ ، و کافی است عملگر S را به دو طرف (91-14) اعمال کنیم تا نشان دهیم که $|\varphi\rangle$ می‌تواند به صورت یک ترکیب خطی از کتهای مختلف $|\lambda : u_i; \mu : u_j; \dots; N : u_p\rangle$ بیان شود.

اما، باید توجه کرد که کتهای مختلف $|\lambda : u_i; \mu : u_j; \dots; N : u_p\rangle$ مستقل نیستند. حال، نقشهایی را که ذرات مختلف در یکی از کتهای $|\lambda : u_i; \mu : u_j; \dots; N : u_p\rangle$ ای پایه اولیه ایفا می‌کنند (قبل از متقارن‌سازی) جابه‌جا می‌کنیم. اعمال S یا A بر روی این کت جدید، بنابر (74-14) و (75-14)، به همان کت از \mathcal{E}_S یا \mathcal{E}_A (احتمالاً با یک تغییر علامت) منجر می‌شود.

از این رو، به معرفی مفهوم یک عدد اشغال رهنمون می‌شویم: بنا به تعریف، برای کت $|\lambda : u_i; \mu : u_j; \dots; N : u_p\rangle$ ، عدد اشغال n_k حالت منفرد $|u_k\rangle$ برابر است با تعداد دفعاتی که حالت $|n_k\rangle$ در دنباله $\{|u_i\rangle, |u_j\rangle, \dots, |u_p\rangle\}$ ظاهر می‌شود، یعنی، برابر است با تعداد ذرات در حالت $|u_k\rangle$ (مسلماً، داریم $\sum_k n_k = N$). دو کت مختلف $|\lambda : u_i; \mu : u_j; \dots; N : u_p\rangle$ برای آنها اعداد اشغال برابرند، می‌توانند توسط عمل یک عملگر جایگشت، از یکدیگر به دست آیند. در نتیجه، پس از عمل متقارن‌نگر S (پادمقارن‌نگر A)، کتهای یادشده به یک حالت فیزیکی منجر می‌شوند، که آن را با $|n_1, n_2, \dots, n_k, \dots\rangle$ نمایش خواهیم داد

$$|n_1, n_2, \dots, n_k, \dots\rangle = c S \underbrace{|\lambda : u_1; \mu : u_1; \dots; n_1 : u_1\rangle}_{|u_1\rangle \text{ ذره در حالت } n_1} \underbrace{|\nu_1 + 1 : u_2; \dots; n_1 + n_2 : u_2; \dots\rangle}_{|u_2\rangle \text{ ذره در حالت } n_2} \quad (92-14)$$

برای فرمیونها، S ، در (92-14) توسط A جایگزین خواهد شد (c ضریبی است که بهنجارش حالتی

که به این طریق به دست می آید را، ممکن می سازد).^۱ در اینجا حالت های $(n_1, n_2, \dots, n_k, \dots)$ را به تفصیل مورد مطالعه قرار نخواهیم داد، بلکه بعضی خواص مهم آنها را بیان خواهیم کرد:
 ۱. حاصلضرب نرده ای دو کت $(n_1, n_2, \dots, n_k, \dots)$ و $(n'_1, n'_2, \dots, n'_k, \dots)$ فقط وقتی مخالف صفر است که تمام اعداد اشغال برابر باشند (به ازای تمام k ها، $n_k = n'_k$).

با استفاده از (۹۲-۱۴) و تعاریف (۶۱-۱۴) و (۶۲-۱۴) ی S و A ، می توانیم بسط دو کت مورد نظر را روی پایه راست هنجار $\{|1\rangle; |2\rangle; \dots; |N\rangle; |u_p\rangle\}$ به دست آوریم. در این صورت به آسانی می بینیم که، اگر اعداد اشغال همگی مساوی نباشند، این دو کت نمی توانند به طور همزمان دارای مؤلفه های غیر صفر روی یک بردار پایه باشند.

۲. اگر ذرات مورد مطالعه، بوزون باشند، کتهای $(n_1, n_2, \dots, n_k, \dots)$ که در آنها اعداد اشغال گوناگون n_k دلخواه هستند (البته با $\sum_k n_k = N$) یک پایه راست هنجار در فضای حالت فیزیکی تشکیل می دهند.

حال نشان می دهیم که، برای بوزونها، کتهای $(n_1, n_2, \dots, n_k, \dots)$ که توسط (۹۲-۱۴) تعریف می شوند هرگز صفر نیستند. برای این منظور، k را با تعریف (۶۱-۱۴) آن جایگزین می کنیم. در این صورت، در طرف راست (۹۲-۱۴)، کتهای متعامد گوناگون $\{|1\rangle; |2\rangle; \dots; |N\rangle; |u_p\rangle\}$ ، که ضرایب همه آنها مثبت است ظاهر می شوند. بنابراین، $(n_1, n_2, \dots, n_k, \dots)$ نمی تواند صفر باشد.
 $(n_1, n_2, \dots, n_k, \dots)$ ها یک پایه در فضای \mathcal{E}_S تشکیل می دهند زیرا این کتها فضای \mathcal{E}_S را تولید می کنند، همگی غیر صفر و بر یکدیگر متعامدند.

۳. اگر ذرات مورد مطالعه، فرمیون باشند، با انتخاب مجموعه کتهای $(n_1, n_2, \dots, n_k, \dots)$ که در آنها تمام اعداد اشغال یا برابر ۱ یا برابر ۰ هستند (باز هم با: $\sum_k n_k = N$)، یک پایه از فضای حالت فیزیکی \mathcal{E}_A به دست می آید.

اثبات قبلی، به دلیل علامتهای منفی که قبل از جایگشتهای فرد در تعریف (۶۲-۱۴) از A ، ظاهر می شوند، به فرمیونها قابل اعمال نیست. به علاوه، در بخش ۱۴-۳ دیدیم که دو فرمیون یکسان نمی توانند یک حالت کوانتومی منفرد را اشغال کنند: اگر یکی از اعداد اشغال بزرگتر از ۱ باشد، برداری که توسط (۹۲-۱۴) تعریف می شود، صفر است. از طرف دیگر، اگر تمام اعداد اشغال برابر یک یا صفر باشند، این بردار هرگز صفر نخواهد بود، زیرا، در این صورت دو ذره هرگز در یک حالت کوانتومی منفرد نخواهند بود، به گونه ای که کتهای $\{|1\rangle; |2\rangle; \dots; |N\rangle; |u_p\rangle\}$ و $\{|1\rangle; |2\rangle; \dots; |N\rangle; |u_p\rangle\}$ همیشه متمایز و متعامد باشند. بنابراین، رابطه (۹۲-۱۴)، در این مورد، یک کت فیزیکی غیر صفر را تعریف می کند. بقیه اثبات نظیر بوزونهاست.

۱. یک محاسبه ساده برای بوزونها مقدار: $c = \sqrt{N! / n_1! n_2! \dots}$ و برای فرمیونها مقدار $\sqrt{N!}$ را می دهد.

۱۴-۳-۴ کاربرد اصول موضوع دیگر

آنچه می‌ماند این است که نشان دهیم چگونه می‌توان با توجه به اصل موضوع متقارن‌سازی که در بخش ۱۴-۳-۱ معرفی کردیم، اصول موضوع عام فصل ۳ را به‌کار برد و تحقیق کرد که هیچ تناقضی بروز نمی‌کند. به بیان دقیقتر، خواهیم دید که چگونه فرایندهای اندازه‌گیری را می‌توانیم توسط کتهایی که فقط به \mathcal{E}_S یا به \mathcal{E}_A تعلق دارند، توصیف کنیم، و نشان خواهیم داد که فرایند تحول زمانی، کت $|\psi(t)\rangle$ وابسته به حالت سیستم را از این زیرفضا خارج نمی‌کند. به این ترتیب، تمام فرمول‌بندیهای مکانیک کوانتومی را می‌توان یا در داخل \mathcal{E}_S یا در داخل \mathcal{E}_A اعمال کرد.

الف) اصول موضوع اندازه‌گیری

۱. احتمال یافتن سیستم در یک حالت فیزیکی معین

یک اندازه‌گیری که بر روی یک سیستم از ذرات یکسان انجام شده است را در نظر بگیرید. کت $|\psi(t)\rangle$ که حالت کوانتومی سیستم را قبل از اندازه‌گیری توصیف می‌کند، باید، بر طبق اصل موضوع متقارن‌سازی و بسته به اینکه سیستم از بوزونها یا فرمیونها تشکیل شده است، به \mathcal{E}_S یا \mathcal{E}_A تعلق داشته باشد. برای اعمال اصول موضوع فصل ۳ مربوط به اندازه‌گیریها، باید حاصلضرب نرده‌ای $|\psi(t)\rangle$ را با کت $|u\rangle$ متناظر با حالت فیزیکی سیستم بعد از اندازه‌گیری، در نظر بگیریم. این کت $|u\rangle$ را باید با اعمال قاعده‌آ آمده در بخش ۱۴-۳-۳ الف، بسازیم. بنابراین، دامنه احتمال $\langle u|\psi(t)\rangle$ را می‌توان برحسب دو بردار، که هر دو به \mathcal{E}_S یا به \mathcal{E}_A تعلق دارند، بیان کرد. در بخش ۱۴-۴-۲ چند نمونه از چنین محاسباتی را مورد بحث قرار خواهیم داد.

اگر اندازه‌گیری مورد نظر، یک اندازه‌گیری "کامل" باشد (به‌عنوان مثال، مکانها و مؤلفه‌های S_z اسپین را برای کلیه ذرات بدهد)، کت فیزیکی $|u\rangle$ (با تقریب یک ضریب ثابت) منحصر به‌فرد است. از طرف دیگر، اگر اندازه‌گیری "ناکامل" باشد (به‌عنوان مثال، فقط یک اندازه‌گیری از اسپینها، یا اندازه‌گیری که روی یک ذره منفرد انجام شود)، چندین کت فیزیکی متعامد به‌دست می‌آید، و در این صورت، احتمالات متناظر را باید با هم جمع کرد.

۲. مشاهده‌پذیرهای فیزیکی؛ ناوردایی \mathcal{E}_A و \mathcal{E}_S

در بعضی موارد، می‌توان اندازه‌گیری انجام‌شده بر روی سیستم ذرات یکسان را با دادن عبارت صریح مشاهده‌پذیر متناظر برحسب $\mathbf{R}_1, \mathbf{P}_1, \mathbf{S}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{P}_2, \mathbf{S}_2$ و غیره، مشخص کرد.

چند مثال واقعی از مشاهده‌پذیرهایی که می‌توانند در یک سیستم سه‌ذره‌ای اندازه‌گیری شوند

ارائه می‌دهیم

— مکان مرکز جرم \mathbf{R}_G ، تکانه کل \mathbf{P} و تکانه زاویه‌ای کل \mathbf{L}

$$R_G = \frac{1}{3}(R_1 + R_2 + R_3) \quad (۹۳-۱۴)$$

$$P = P_1 + P_2 + P_3 \quad (۹۴-۱۴)$$

$$L = L_1 + L_2 + L_3 \quad (۹۵-۱۴)$$

— انرژی دافعه الکتروستاتیکی

$$W = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{|R_1 - R_2|} + \frac{1}{|R_2 - R_3|} + \frac{1}{R_3 - R_1} \right) \quad (۹۶-۱۴)$$

— اسپین کل

$$S = S_1 + S_2 + S_3 \quad (۹۷-۱۴)$$

و غیره.

از این عبارات واضح است که مشاهده پذیرهای وابسته به کمیت‌های فیزیکی مورد نظر، ذرات مختلف را به طور مقارنی شامل می‌شوند. این خاصیت مهم مستقیماً از این واقعیت نتیجه می‌شود که ذرات یکسان‌اند. به عنوان مثال در (۹۳-۱۴)، R_1, R_2 و R_3 دارای یک ضریب‌اند، زیرا سه ذره دارای جرم‌های مساوی هستند. مبنای شکل مقارن (۹۶-۱۴) مساوی بودن بارهاست. به طور کلی، چون با جابه‌جا کردن نقش‌های این N ذره یکسان، هیچ‌یک از خواص فیزیکی تغییر نمی‌کند، این N ذره باید در هر مشاهده پذیر قابل اندازه‌گیری واقعی، یک نقش مقارن ایفا کنند. از نظر ریاضی، مشاهده پذیر G ی متناظر، که آن را یک مشاهده پذیر فیزیکی می‌نامیم، باید تحت تمام جایگشت‌های N ذره یکسان ناوردا باشد. بنابراین، مشاهده پذیر یادشده باید با کلیه عملگرهای جایگشت P_α N ذره، جابه‌جاپذیر باشد (بخش ۱۴-۲-۲-د)؛ یعنی باید به ازای تمام P ها داشته باشیم

$$[G, P_\alpha] = 0 \quad (۹۸-۱۴)$$

به عنوان مثال، برای سیستمی متشکل از دو ذره یکسان، مشاهده پذیر $R_1 - R_2$ (تفاضل برداری مکانهای دو ذره)، که تحت اثر جایگشت P_{21} ناوردا نیست ($R_1 - R_2$ تغییر علامت می‌دهد)، یک مشاهده پذیر فیزیکی نیست؛ در واقع، در یک اندازه‌گیری ($R_1 - R_2$) فرض بر این است که ذره (۱) بتواند از ذره (۲) متمایز باشد. از طرف دیگر، می‌توانیم فاصله بین دو ذره، یعنی، $\sqrt{(R_1 - R_2)^2}$ ، را که مقارن است، اندازه بگیریم.

رابطه (۹۸-۱۴) حاکی از آن است که \mathcal{E}_S و \mathcal{E}_A هر دو تحت عمل یک مشاهده‌پذیر فیزیکی G ناوردا هستند. اکنون نشان می‌دهیم که اگر $|\psi\rangle$ متعلق به \mathcal{E}_A باشد، $G|\psi\rangle$ نیز به \mathcal{E}_A متعلق است (البته، همین استدلال در مورد \mathcal{E}_S نیز به‌کار می‌رود). این واقعیت که $|\psi\rangle$ به \mathcal{E}_A تعلق دارد می‌رساند که

$$P_\alpha|\psi\rangle = \varepsilon_\alpha|\psi\rangle \quad (99-14)$$

اکنون $P_\alpha G|\psi\rangle$ را محاسبه می‌کنیم. بر طبق (۹۸-۱۴) و (۹۹-۱۴) داریم

$$P_\alpha G|\psi\rangle = GP_\alpha|\psi\rangle = \varepsilon_\alpha G|\psi\rangle \quad (100-14)$$

چون جایگشت P_α اختیاری است، (۱۰۰-۱۴) این واقعیت را بیان می‌کند که $G|\psi\rangle$ کاملاً پادمقارن، و از این‌رو متعلق به \mathcal{E}_A است.

بنابراین، تمام اعمالی که معمولاً بر روی یک مشاهده‌پذیر انجام می‌گیرد، بخصوص، تعیین ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارها، را می‌توان کلاً در داخل یکی از زیرفضاهای \mathcal{E}_S یا \mathcal{E}_A ، بر G اعمال کرد. فقط ویژه‌کتهای G متعلق به زیرفضای فیزیکی، و ویژه‌مقدارهای متناظر، حفظ می‌شوند.

یادداشتها:

۱. اگر مطالعه خود را به زیرفضای \mathcal{E}_S (یا \mathcal{E}_A) محدود کنیم، لزوماً تمام ویژه‌مقدارهای G را که در فضای کل \mathcal{E} وجود دارند، پیدا نخواهیم کرد. بنابراین، اثر اصل موضوع مقارن‌سازی بر طیف یک مشاهده‌پذیر مقارن G ، می‌تواند این باشد که بعضی از ویژه‌مقدارها را حذف کند. از طرف دیگر، این اثر هیچ ویژه‌مقدار جدیدی را به این طیف اضافه نمی‌کند، زیرا به علت ناوردایی کلی \mathcal{E}_S (یا \mathcal{E}_A) تحت اثر G ، هر ویژه‌بردار G در \mathcal{E}_S (یا \mathcal{E}_A) یک ویژه‌بردار G در \mathcal{E} ، با همان ویژه‌مقدار، نیز هست.

۲. می‌خواهیم مشاهده‌پذیرهای متناظر با انواع مختلف اندازه‌گیری که در بخش ۱۴-۳-۴ الف-۱ بررسی کردیم را به طریق ریاضی برحسب مشاهده‌پذیرهای \mathbf{R}_1 ، \mathbf{P}_1 ، \mathbf{S}_1 و غیره بنویسیم. این مسئله همیشه ساده نیست. به‌عنوان مثال، برای سیستمی متشکل از سه ذره یکسان، سعی خواهیم کرد مشاهده‌پذیرهای متناظر با اندازه‌گیری همزمان سه مکان را برحسب \mathbf{R}_1 ، \mathbf{R}_2 ، و \mathbf{R}_3 بنویسیم. می‌توانیم مسئله را این‌طور حل کنیم که چندین مشاهده‌پذیر فیزیکی را طوری انتخاب کنیم که بتوانیم، از روی نتایج به‌دست آمده در اندازه‌گیری آنها، بدون ابهام مکان هر ذره را نتیجه‌گیری کنیم (البته بدون اینکه بتوانیم به هر مکان یک ذره

شماره‌گذاری شده وابسته کنیم). به عنوان مثال می‌توان مجموعه

$$X_1 + X_2 + X_3, X_1X_2 + X_2X_3 + X_3X_1, X_1X_2X_3$$

(و مشاهده‌پذیرهای متناظر برای مختصات Y و Z) را انتخاب کرد. اما، این دیدگاه یک دیدگاه نسبتاً رسمی است به جای اینکه سعی کنیم عبارتها را برای مشاهده‌پذیرها در تمام موارد بنویسیم، ساده‌تر این است که روش به‌کاررفته در بخش ۱۴-۳-۴ الف-۱ را، که در آن خود را به استفاده از ویژه‌کتهای فیزیکی اندازه‌گیری محدود کردیم، دنبال کنیم.

ب) اصول موضوع تحول زمانی

همایلتونی یک سیستم از ذرات یکسان باید یک مشاهده‌پذیر فیزیکی باشد. به عنوان مثال، همایلتونی توصیف‌کننده حرکت دو الکترون اتم هلیم حول هسته را که فرض می‌کنیم بدون حرکت باشد، می‌نویسیم^۱

$$H(1, 2) = \frac{P_1^2}{2m_e} + \frac{P_2^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{R_1} - \frac{Ze^2}{R_2} + \frac{e^2}{|R_1 - R_2|} \quad (101-14)$$

دو جمله اول، معرف انرژی جنبشی سیستم‌اند که به علت برابر بودن دو جرم، متقارن هستند. دو جمله بعدی از جاذبه هسته (که بار آن دو برابر بار پروتون است) ناشی می‌شوند. بدیهی است که الکترونها به‌طور مساوی تحت تأثیر این جاذبه قرار می‌گیرند. بالاخره، جمله آخر مبین برهم‌کنش متقابل الکترونهاست. این جمله نیز متقارن است، زیرا هیچ‌کدام از دو الکترون بر دیگری مزیتی ندارد، روشن است که این استدلال را می‌توان به هر سیستمی از ذرات یکسان تعمیم داد. در نتیجه، تمام عملگرهای جایگشت با همایلتونی سیستم جابه‌جا می‌شوند

$$[H, P_\alpha] = 0 \quad (102-14)$$

تحت این شرایط، اگر کت $|\psi(t_0)\rangle$ که حالت سیستم را در زمان معین t_0 توصیف می‌کند، یک کت فیزیکی باشد، کت $|\psi(t)\rangle$ که با حل معادله شرودینگر از $|\psi(t_0)\rangle$ به‌دست می‌آید نیز باید یک کت فیزیکی باشد. بر طبق این معادله

$$|\psi(t + dt)\rangle = \left(1 + \frac{dt}{i\hbar} H\right) |\psi(t)\rangle \quad (103-14)$$

۱. در اینجا، فقط مهم‌ترین جملات این همایلتونی را در نظر خواهیم گرفت. برای اطلاعات بیشتر در مورد اتم هلیم به مکمل ۲ از فصل ۱۴ مراجعه کنید.

حال با اعمال P_α و استفاده از رابطه (۱۰۴-۱۴) داریم

$$P_\alpha |\psi(t + dt)\rangle = \left(1 + \frac{dt}{i\hbar} H\right) P_\alpha |\psi(t)\rangle \quad (104-14)$$

اگر $|\psi(t)\rangle$ یک ویژه بردار P_α باشد، $|\psi(t + dt)\rangle$ نیز یک ویژه بردار P_α با همان ویژه مقدار خواهد بود. چون $|\psi(t_0)\rangle$ بنا به فرض، یک کت کاملاً متقارن یا کاملاً پادمقارن است، این خاصیت در طول زمان پایدار خواهد ماند.

بنابراین، اصل موضوع متقارن سازی، با اصل موضوعی که تحول زمانی سیستمهای فیزیکی را می دهد، نیز سازگار است: معادله شرودینگر، کت $|\psi(t)\rangle$ را از \mathcal{E}_S یا \mathcal{E}_A حذف نمی کند.

۱۴-۴ بحث فیزیکی

در این بخش نهایی، پیامدهای اصل موضوع متقارن سازی را بر خواص فیزیکی سیستمهای ذرات یکسان بررسی خواهیم کرد. قبل از هر چیز، به اختلافهای اساسی که اصل طرد پاؤلی بین سیستمهای فرمیونی یکسان و سیستمهای بوزونی یکسان وارد می کند اشاره خواهیم کرد. سپس، تأثیرات اصل موضوع متقارن سازی را بر محاسبه احتمالات وابسته به فرایندهای مختلف فیزیکی، بررسی خواهیم کرد.

۱۴-۴-۱ تفاوتهای بین بوزونها و فرمیونها. اصل طرد پاؤلی

در بیان اصل موضوع متقارن سازی، تفاوت بین بوزونها و فرمیونها ممکن است مهم به نظر نرسد. در واقع، این اختلاف علامت ساده در تقارن کت فیزیکی، دارای پیامدهای فوق العاده مهمی است. همان طور که در بخش ۱۴-۳-۳ دیدیم، اصل موضوع متقارن سازی، حالتی منفرد قابل دسترس یک سیستم از بوزونهای یکسان را محدود نمی سازد. از طرف دیگر، این اصل موضوع ایجاب می کند که فرمیونها از اصل طرد پاؤلی تبعیت کنند؛ دو فرمیون یکسان نمی توانند یک حالت مکانیک کوانتومی را اشغال کنند.

اصل طرد، ابتدا به منظور توضیح خواص اتمهای چند الکترونی فرمولبندی شد (بخش ۱۴-۴-۱ الف در زیر، و مکمل ۱ از فصل ۱۴)، اما اکنون می توانیم ببینیم که این اصل بیش از آن است که فقط برای الکترونها به کار برود: این اصل، نتیجه ای از اصل متقارن سازی است که برای تمام سیستمهای فرمیونی معتبر است. پیش بینیهای مبتنی بر این اصل، که اغلب جالب هستند، همیشه به طور تجربی تأیید شده اند. در اینجا مثالهایی از آنها را می آوریم.

الف) حالت پایه یک سیستم از ذرات یکسان مستقل

هامیلتونی یک سیستم از ذرات یکسان (بوزونها یا فرمیونها) همیشه نسبت به جایگشت‌های این ذرات متقارن است (۱۴-۳-۴). چنین سیستمی را در نظر بگیرید که در آن ذرات مختلف مستقل باشند، یعنی با یکدیگر برهم‌کنش نداشته باشند (لااقل با تقریب اول). در این صورت، هامیلتونی متناظر حاصل جمع عملگرهای یک ذره‌ای، به شکل زیر است

$$H(1, 2, \dots, N) = h(1) + h(2) + \dots + h(N) \quad (105-14)$$

$h(1)$ فقط تابعی از مشاهده‌پذیرهای وابسته به ذره‌ای است که با (۱) شماره‌گذاری شده است؛ این واقعیت که ذرات یکسان هستند [که حاکی از یک هامیلتونی متقارن $H(1, 2, \dots, N)$ است] ایجاب می‌کند که تابع h در N جمله عبارت (۱۴-۱۰۵) یکسان باشد. برای تعیین ویژه‌حالت‌ها و ویژه‌مقدارهای هامیلتونی کل $H(1, 2, \dots, N)$ ، ما فقط مقادیر نظیر را برای هامیلتونی منفرد $h(j)$ در فضای حالت $\mathcal{E}(j)$ یکی از ذرات، حساب می‌کنیم

$$h(j)|\varphi_n\rangle = e_n|\varphi_n\rangle; \quad |\varphi_n\rangle \in \mathcal{E}(j) \quad (106-14)$$

برای سهولت فرض می‌کنیم طیف $h(j)$ گسسته و ناواگن باشد.

اگر یک سیستم از بوزونهای یکسان مورد نظر ما باشد، ویژه‌بردارهای فیزیکی هامیلتونی $H(1, 2, \dots, N)$ را می‌توان با متقارن کردن حاصلضرب تانسوری N حالت منفرد $|\varphi_n\rangle$ به‌دست آورد

$$|\Phi_{n_1, n_2, \dots, n_N}\rangle = c \sum_{\alpha} P_{\alpha} |1: \varphi_{n_1}; 2: \varphi_{n_2}; \dots, N: \varphi_{n_N}\rangle \quad (107-14)$$

که در آن، انرژی متناظر برابر با مجموع N انرژی منفرد است

$$E_{n_1, n_2, \dots, n_N} = e_{n_1} + e_{n_2} + \dots + e_{n_N} \quad (108-14)$$

په راحتی می‌توان نشان داد که هر یک از گتهای ظاهر شده در طرف راست (۱۴-۱۰۷)، یک ویژه‌ک H با ویژه‌مقدار (۱۴-۱۰۸) است؛ این مطلب در مورد مجموع آنها نیز صادق است. به‌ویژه، اگر e_1 کوچکترین ویژه‌مقدار $h(j)$ و $|\varphi_1\rangle$ ویژه‌حالت مربوطه باشد، حالت پایه سیستم وقتی به‌دست

می‌آید که N بوزون یکسان، همگی در حالت $|\varphi_1\rangle$ باشند. بنابراین، انرژی این حالت پایه برابر است با

$$E_{1,1,\dots,1} = N e_1 \quad (109-14)$$

و بردار حالت آن برابر است با

$$|\varphi_{1,1,\dots,1}^{(S)}\rangle = |1 : \varphi_1; 2 : \varphi_1; \dots; N : \varphi_1\rangle \quad (110-14)$$

حال فرض کنید که N ذره یکسان مورد نظر، فرمیون باشند. در این صورت، دیگر برای این N ذره امکان ندارد که همگی بتوانند در حالت منفرد $|\varphi_1\rangle$ باشند. برای به دست آوردن حالت پایه سیستم، باید اصل طرد پائولی را به حساب آوریم. اگر انرژیهای منفرد e_n را به ترتیب صعودی مرتب کنیم

$$e_1 < e_2 < \dots < e_{n-1} < e_{n+1} < \dots, \quad (111-14)$$

حالت پایه سیستم N فرمیون یکسان، دارای انرژی زیر است

$$E_{1,2,\dots,N} = e_1 + e_2 + \dots + e_N \quad (112-14)$$

و خود توسط کت فیزیکی بهنجار شده زیر توصیف می‌شود

$$|\Phi_{1,2,\dots,N}^{(A)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |1 : \varphi_1\rangle & |1 : \varphi_2\rangle \cdots |1 : \varphi_N\rangle \\ |2 : \varphi_1\rangle & |2 : \varphi_2\rangle \cdots |2 : \varphi_N\rangle \\ \vdots & \vdots \\ |N : \varphi_1\rangle & |N : \varphi_2\rangle \cdots |N : \varphi_N\rangle \end{vmatrix} \quad (113-14)$$

بالاترین انرژی منفرد e_N که در حالت پایه یافت می‌شود را انرژی فرمی سیستم می‌گویند. بنابراین، اصل طرد پائولی، در تمام حوزه‌های فیزیک که در آنها سیستمهای چند الکترونی، نظیر فیزیک اتمی و مولکولی (مکملهای ۱ و ۲ از فصل ۱۴) و فیزیک حالت جامد (مکمل ۳ از فصل ۱۴) دخالت دارند، و در تمام حوزه‌هایی که در آنها سیستمهای چند پروتونی و چند نوترونی دخالت دارند، نظیر فیزیک هسته‌ای، نقشی بسیار با اهمیت ایفا می‌کند.^۱

۱. کت معرف حالت یک هسته باید نسبت به مجموعه پروتونها و مجموعه نوترونها بادمقارن باشد.

یادداشت:

در اغلب موارد، انرژیهای منفرد e_n در واقع واگن‌اند. در این صورت، هر یک از آنها می‌تواند، در حاصل‌جمعی همانند (۱۴-۱۱۲) به تعداد دفعاتی برابر با درجهٔ واگنی آن وارد شود. ■

(ب) آمار کوانتومی

موضوع مکانیک آماری عبارت است از مطالعهٔ سیستمهایی که متشکل از تعداد بسیار زیادی ذره هستند. (در موارد گوناگون، برهم‌کنشهای متقابل بین این ذرات آن قدر ضعیف است که می‌توان با تقریب اول از آنها صرف‌نظر کرد). چون حالت میکروسکوپیکی سیستم را به‌طور دقیق نمی‌شناسیم، با استفاده از خواص ماکروسکوپیکی سیستم (فشار، دما، چگالی و غیره) به توضیح کلی آن قناعت می‌کنیم. یک حالت ماکروسکوپیکی خاص، متناظر است با کلیتی از یک مجموعه حالت‌های ماکروسکوپیکی. سپس از احتمالات استفاده می‌کنیم: وزن آماری یک حالت ماکروسکوپیکی، متناسب است با تعداد حالت‌های میکروسکوپیکی متمایزی که با آن متناظرند، و سیستم، در تعادل ترمودینامیکی، در محتملترین حالت ماکروسکوپیکی خود است (با به حساب آوردن هر قیدی که ممکن است اعمال شود). از این‌رو، برای مطالعهٔ خواص ماکروسکوپیکی سیستم، ضروری است تعیین کنیم که چه تعداد حالت میکروسکوپیکی مختلف دارای مشخصات معینی، از جمله، یک انرژی مفروض، هستند. در مکانیک آماری کلاسیک (آمار ماکسول-بولتزمن)، N ذرهٔ سیستم را طوری در نظر می‌گیریم که گویی دارای طبیعت‌های مختلفی هستند، حتی اگر در واقع یکسان باشند. یک چنین حالت میکروسکوپیکی را با مشخص کردن حالت منفرد هر یک از N ذره تعریف می‌کنیم. دو حالت میکروسکوپیکی وقتی متمایز از هم تلقی می‌شوند که این N حالت منفرد یکسان ولی جایگشت ذرات متفاوت باشد.

در مکانیک آماری کوانتومی، باید اصل موضوع متقارن‌سازی را منظور کنیم. یک حالت میکروسکوپیکی از یک سیستم ذرات یکسان، با شماره‌گذاری N حالت منفردی که آن را می‌سازند، مشخص می‌شود؛ ترتیب این حالت‌ها هیچ اهمیتی ندارد زیرا حاصلضرب تانسوری آنها باید متقارن شده یا پادمقارن شده باشد. بنابراین، شماره‌گذاری حالت‌های میکروسکوپیکی به همان نتیجهٔ مکانیک آماری کلاسیک منجر نمی‌شود. علاوه بر این، اصل طرد پاولی، به‌طور ریشه‌ای میان سیستم‌های بوزونی یکسان و سیستم‌های فرمیونی یکسان فرق می‌گذارد: تعداد ذراتی که یک حالت منفرد معین را اشغال می‌کنند، در مورد فرمیونها نمی‌تواند از یک تجاوز کند، در حالی‌که برای بوزونها این عدد می‌تواند هر تعدادی باشد (بخش ۱۴-۳). از این مطلب، خواص آماری مختلفی نتیجه می‌شود: بوزونها از آمار بوز-اینشتین و فرمیونها از آمار فرمی-دیراک پیروی می‌کنند. وجه تسمیهٔ "بوزونها" و "فرمیونها" همین است.

خواص فیزیکی سیستمهای فرمیونی یکسان و سیستمهای بوزونی یکسان بسیار متفاوت است. این تفاوتها را می‌توان به‌عنوان مثال، در دماهای پایین مشاهده کرد. در این صورت، ذرات تمایل دارند که در حالت منفرد با پایینترین انرژی جمع شوند. این امر برای بوزونهای یکسان امکان دارد (این پدیده را چگالش بوز می‌گویند) در حالی که فرمیونها یکسان مقید به محدودیتهای اصل پاولی هستند. چگالش بوز، منشأ خواص چشمگیری (ابر شاری) در ایزوتوپ ${}^4\text{He}$ هلیوم است، در حالی که ایزوتوپ ${}^3\text{He}$ که یک فرمیون است (یادداشت بخش ۱۴-۳-۱ را ببینید)، دارای این خواص نیست.

۱۴-۴-۲ نتایج تمیزناپذیری ذرات در محاسبهٔ پیش‌بینیهای فیزیکی

در مکانیک کوانتومی، تمام پیش‌بینیهای مربوط به خواص یک سیستم را برحسب دامنه‌های احتمال (حاصلضربهای نرده‌ای دو بردار حالت) یا عناصر ماتریسی یک عملگر بیان می‌کنیم. بنابراین، جای تعجب نیست که مقارن‌سازی یا پادمقارن‌سازی بردارهای حالت، باعث شود که آثار تداخلی خاصی در سیستمهای ذرات یکسان ظاهر شوند. ابتدا، این آثار را مشخص خواهیم کرد و سپس خواهیم دید که چگونه این آثار تحت شرایط معینی ناپدید می‌شوند (ذرات سیستم، با وجودی که یکسان‌اند، طوری رفتار می‌کنند که گویی دارای طبیعتهای متفاوت‌اند). برای ساده کردن بحث، مطالعهٔ خود را به سیستمهایی که شامل فقط دو ذرهٔ یکسان هستند، محدود می‌کنیم.

الف) تداخلهای بین فرایندهای مستقیم و تبادل

۱. پیش‌بینیهای مربوط به یک اندازه‌گیری بر روی سیستمی از ذرات یکسان: جملهٔ مستقیم و جملهٔ تبادل

سیستمی متشکل از دو ذرهٔ یکسان را در نظر بگیرید، که یکی از آنها در حالت منفرد (φ) و دیگری در حالت منفرد (χ) باشد. فرض خواهیم کرد که (φ) و (χ) متعامدند، به طوری که حالت سیستم توسط کت فیزیکی بهنجارشدهٔ [فرمول (۱۴-۸۱) را ببینید] زیر توصیف شود

$$|\varphi; \chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [1 + \varepsilon P_{12}] |1; \varphi; 2; \chi\rangle \quad (14-114)$$

که در آن

$\varepsilon = +1$ اگر ذرات بوزون باشند

$\varepsilon = -1$ اگر ذرات فرمیون باشند (14-115)

با علم به اینکه سیستم در این حالت است، فرض کنید می‌خواهیم روی هر کدام از دو ذره کمیت فیزیکی B که مشاهده‌پذیرهای $B(1)$ و $B(2)$ به آن وابسته‌اند را اندازه بگیریم. برای سهولت، فرض خواهیم کرد که طیف B کلاً گسسته و ناواگن است

$$B|u_i\rangle = b_i|u_i\rangle \quad (116-14)$$

احتمال یافتن بعضی مقادیر معین، در این اندازه‌گیری (b_n برای یکی از ذرات و $b_{n'}$ برای ذره دیگر) چقدر است؟ ابتدا فرض می‌کنیم که b_n و $b_{n'}$ مختلف باشند، به طوری که ویژه‌بردارهای متناظر $|u_n\rangle$ و $|u_{n'}\rangle$ متعامد باشند. تحت این شرایط، کت فیزیکی بهنجار شده‌ای که توسط نتیجه این اندازه‌گیری تعریف می‌شود را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$|u_n; u_{n'}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [1 + \varepsilon P_{r1}] |1 : u_n; 2 : u_{n'}\rangle \quad (117-14)$$

که دامنه احتمال وابسته به این نتیجه را می‌دهد

$$\langle u_n; u_{n'} | \varphi; \chi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle 1 : u_n; 2 : u_{n'} | (1 + \varepsilon P_{r1}^\dagger) (1 + \varepsilon P_{r1}) | 1 : \varphi; 2 : \chi \rangle \quad (118-14)$$

با استفاده از خواص (14-9) و (14-91) عملگر P_{r1} می‌توان نوشت

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (1 + \varepsilon P_{r1}^\dagger) (1 + \varepsilon P_{r1}) = 1 + \varepsilon P_{r1} \quad (119-14)$$

در این صورت (14-118) می‌شود

$$\langle u_n; u_{n'} | \varphi; \chi \rangle = \langle 1 : u_n; 2 : u_{n'} | (1 + \varepsilon P_{r1}) | 1 : \varphi; 2 : \chi \rangle \quad (120-14)$$

با اعمال $(1 + \varepsilon P_{r1})$ بر روی پرا، به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \langle u_n; u_{n'} | \varphi; \chi \rangle &= \langle 1 : u_n; 2 : u_{n'} | 1 : \varphi; 2 : \chi \rangle \\ &\quad + \varepsilon \langle 1 : u_n; 2 : u_{n'} | 1 : \varphi; 2 : \chi \rangle \\ &= \langle 1 : u_n | 1 : \varphi \rangle \langle 2 : u_{n'} | 2 : \chi \rangle \\ &\quad + \varepsilon \langle 1 : u_{n'} | 1 : \varphi \rangle \langle 2 : u_n | 2 : \chi \rangle \\ &= \langle u_n | \varphi \rangle \langle u_{n'} | \chi \rangle + \varepsilon \langle u_{n'} | \varphi \rangle \langle u_n | \chi \rangle \end{aligned} \quad (121-14)$$

$$\langle u_n | \longleftrightarrow | \varphi \rangle$$

$$\langle u_n | \longleftrightarrow | \chi \rangle$$

(الف)

$$\langle u_n | \begin{array}{l} \nearrow | \varphi \rangle \\ \searrow | \chi \rangle \end{array}$$

$$\langle u_n | \begin{array}{l} \searrow | \varphi \rangle \\ \nearrow | \chi \rangle \end{array}$$

(ب)

شکل ۴-۱۴ نمایش طرح وار جمله مستقیم و جمله تبادل وابسته به یک اندازه‌گیری انجام شده بر روی سیستمی از دو ذره یکسان. قبل از اندازه‌گیری، می‌دانیم که یک ذره در حالت $|\varphi\rangle$ و ذره دیگر در حالت $|\chi\rangle$ است؛ نتیجه اندازه‌گیری به دست آمده متناظر است با وضعیتی که در آن یک ذره در حالت $|u_n\rangle$ و ذره دیگر در حالت $|u_{n'}\rangle$ باشد. دو دامنه احتمال به چنین اندازه‌گیری وابسته‌اند؛ این دامنه‌ها را به‌طور طرح‌وار توسط شکل‌های الف و ب نشان داده‌ایم. این دامنه‌ها با علامت + برای بوزونها و با علامت - برای فرمیونها تداخل می‌کنند.

به این ترتیب، شماره‌گذاری، از دامنه احتمال، که اکنون مستقیماً برحسب حاصلضربهای تردهای $\langle u_n | \varphi \rangle \dots \langle u_n | \chi \rangle$ بیان می‌شود، حذف شده است. همچنین، دامنه احتمال یا به‌صورت جمع دو جمله (برای بوزونها) و یا تفاضل دو جمله (برای فرمیونها) ظاهر می‌شود؛ نمودارهای شکل (۴-۱۴ الف) و (۴-۱۴ ب)، مربوط به دامنه احتمال هستند.

نتیجه (۴-۱۴) را می‌توان به طریق زیر تعبیر کرد: دو کت $|\varphi\rangle$ و $|\chi\rangle$ وابسته به حالت اولیه می‌توانند توسط دو "مسیر" مختلف، که به‌طور طرح‌وار آنها را در شکل‌های (۴-۱۴ الف) و (۴-۱۴ ب) نشان داده‌ایم، به دو برای $|u_n\rangle$ و $|u_{n'}\rangle$ وابسته به حالت نهایی، متصل شوند. به هر کدام از این دو مسیر یک دامنه احتمال وابسته است، $\langle u_n | \varphi \rangle \langle u_{n'} | \chi \rangle$ یا $\langle u_n | \chi \rangle \langle u_{n'} | \varphi \rangle$ ، و این دو دامنه با علامت + برای بوزونها و با علامت - برای فرمیونها تداخل می‌کنند. به این طریق، جواب سؤال مطرح شده در بخش ۴-۱۴-۳ الف را به دست می‌آوریم: احتمال $\mathcal{P}(b_n; b_{n'})$ مطلوب برابر است با مربع قدرمطلق (۴-۱۴) (۱۲۱)

$$\mathcal{P}(b_n; b_{n'}) = |\langle u_n | \varphi \rangle \langle u_{n'} | \chi \rangle + \epsilon \langle u_{n'} | \varphi \rangle \langle u_n | \chi \rangle|^2 \quad (۴-۱۲۲)$$

از دو جمله طرف راست (۴-۱۴) (۱۲۱)، جمله‌ای که، مثلاً با مسیر (۴-۱۴ الف) متناظر است را اغلب جمله مستقیم و دیگری را جمله تبادل می‌نامند.

یادداشت:

حال بینیم وقتی دو ذره، به جای یکسان بودن، مختلف باشند چه اتفاقی می‌افتد. در این صورت،

حالت اولیه سیستم را به صورت کت حاصلضرب تانسوری زیر انتخاب می‌کنیم

$$|\psi\rangle = |1; \varphi; 2; \chi\rangle \quad (123-14)$$

حال، وسیله اندازه‌گیری را در نظر بگیرید که علی‌رغم متفاوت بودن دو ذره (۱) و (۲)، قادر به تشخیص آنها از یکدیگر نیست. اگر این وسیله نتایج b_n و $b_{n'}$ را به دست بدهد، نمی‌دانیم که به ذره (۱) وابسته است یا به ذره (۲) (به عنوان مثال، برای سیستمی مرکب از یک میون μ^- و یک الکترون e^- ، وسیله اندازه‌گیری ممکن است فقط نسبت به بار ذرات حساس باشد، و هیچ اطلاعی در مورد جرم آنها ندهد). در این صورت، دو ویژه حالت $|1; u_n; 2; u_n\rangle$ و $|1; u_{n'}; 2; u_{n'}\rangle$ (که در این مورد، معرف حالت‌های فیزیکی مختلفی‌اند) با یک نتیجه اندازه‌گیری متناظرند. چون این حالتها متعامدند، باید احتمالهای مربوطه را با هم جمع کنیم، که می‌دهد

$$\begin{aligned} \mathcal{P}'(b_n; b_{n'}) &= |\langle 1; u_n; 2; u_{n'} | 1; \varphi; 2; \chi \rangle|^2 \\ &\quad + |\langle 1; u_{n'}; 2; u_n | 1; \varphi; 2; \chi \rangle|^2 \\ &= |\langle u_n | \varphi \rangle|^2 |\langle u_{n'} | \chi \rangle|^2 + |\langle u_{n'} | \varphi \rangle|^2 |\langle u_n | \chi \rangle|^2 \end{aligned} \quad (124-14)$$

مقایسه روابط (۱۲۲-۱۴) با (۱۲۴-۱۴)، به وضوح اختلاف فاحشی در پیش‌بینیهای فیزیکی مکانیک کوانتومی، بسته به اینکه ذرات مورد نظر یکسان باشند یا نباشند، نمایان می‌سازد ■

حال موردی را در نظر می‌گیریم که در آن، دو حالت $|u_{n'}\rangle |u_n\rangle$ یکی باشند. وقتی دو ذره فرمیون باشند، حالت فیزیکی متناظر، توسط اصل پاولی طرد می‌شود، و احتمال $\mathcal{P}(b_n; b_n)$ صفر است. از طرف دیگر، اگر دو ذره بوزون باشند، داریم

$$|u_n; u_n\rangle = |1; u_n; 2; u_n\rangle \quad (125-14)$$

و در نتیجه

$$\begin{aligned} \langle u_n; u_n | \varphi; \chi \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle 1; u_n; 2; u_n | (1 + P_{12}) | 1; \varphi; 2; \chi \rangle \\ &= \sqrt{2} \langle u_n | \varphi \rangle \langle u_n | \chi \rangle \end{aligned} \quad (126-14)$$

که می‌دهد

$$\mathcal{P}(b_n; b_n) = 2 |\langle u_n | \varphi \rangle \langle u_n | \chi \rangle|^2 \quad (127-14)$$

یادداشتها:

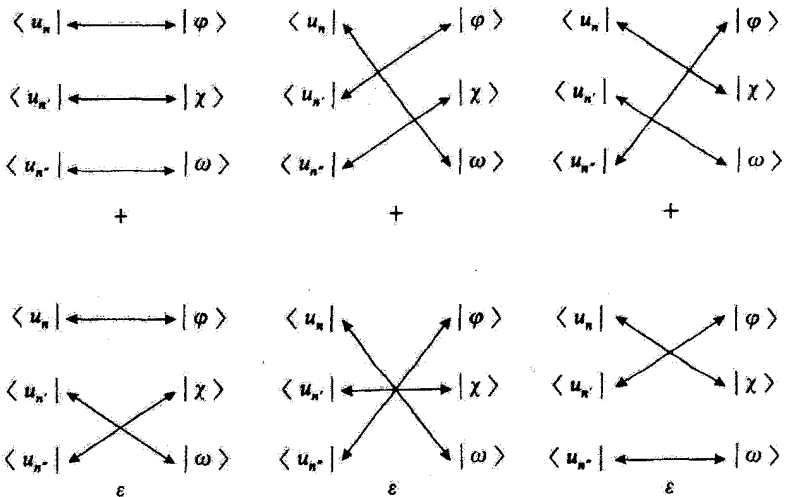
۱. حال این نتیجه را با نتیجه‌ای که در مورد پیش‌گفته به‌دست می‌آید و در آن دو ذره متفاوت‌اند، مقایسه می‌کنیم. در این صورت، باید $\langle \varphi; \chi \rangle$ را با $\langle \chi; \varphi \rangle$ و $\langle u_n; u_n \rangle$ را با $\langle u_n; u_n \rangle$ جایگزین کنیم، که برای دامنه احتمال مقدار زیر را می‌دهد

$$\langle u_n | \varphi \rangle \langle u_n | \chi \rangle \quad (۱۲۸-۱۴)$$

و در نتیجه

$$\mathcal{P}'(b_n; b_n) = |\langle u_n | \varphi \rangle \langle u_n | \chi \rangle|^2 \quad (۱۲۹-۱۴)$$

۲. برای سیستمی شامل N ذره یکسان، عموماً، $N!$ جمله تبادلی متمایز وجود دارد که در دامنه احتمال با هم جمع (یا از هم کم) می‌شوند. به‌عنوان مثال، سیستمی از سه ذره یکسان را در حالت‌های منفرد $|\varphi\rangle$ ، $|\chi\rangle$ و $|\omega\rangle$ ، و احتمال یافتن نتایج b_n ، $b_{n'}$ و $b_{n''}$ را در یک اندازه‌گیری، در نظر بگیرید. "مسیرهای" ممکن را در شکل ۵-۱۴ نشان داده‌ایم. شش مسیر از چنین مسیرهایی وجود دارد (اگر سه ویژه‌مقدار b_n ،



شکل ۵-۱۴ نمایش طرح‌وار شش دامنه احتمال وابسته به یک سیستم از سه ذره یکسان. قبل از اندازه‌گیری، می‌دانیم که یکی از ذرات در حالت $|\varphi\rangle$ ، دیگری در حالت $|\chi\rangle$ و آخری در حالت $|\omega\rangle$ است. نتیجه به‌دست آمده متناظر با وضعیتی است که در آن یک ذره در حالت $|u_n\rangle$ ، دیگری در حالت $|u_{n'}\rangle$ و آخری در حالت $|u_{n''}\rangle$ است. این شش دامنه با علامتی که زیر هر کدام نشان داده شده است ($\varepsilon = +1$ برای برون‌ها و $\varepsilon = -1$ برای فرمون‌ها) تداخل می‌کنند.

b_{n1} , b_{n2} متفاوت باشند تمام مسیرها مختلف‌اند). بعضی، همواره با علامت + در دامنهٔ احتمال شرکت می‌کنند، و بقیه با علامت ε (+ برای بوزونها و - برای فرمیونها).

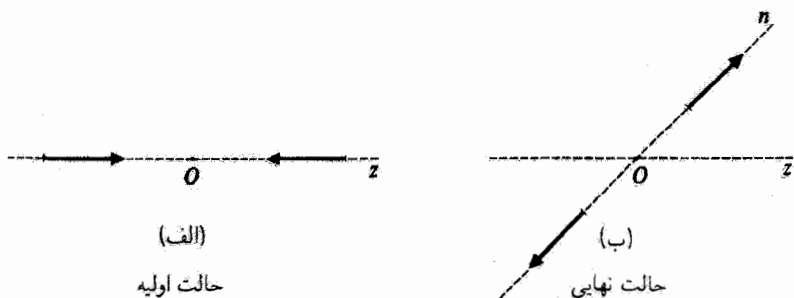
۲. مثال: برخورد کشسان دو ذرهٔ یکسان

برای درک معنای فیزیکی جملهٔ تبادل، به بررسی یک مثال واقعی (که قبلاً در بخش ۱۴-۱-۳ الف، به آن اشاره شده) می‌پردازیم: برخورد کشسان دو ذرهٔ یکسان در چارچوب مرکز جرم آنها^۱. برخلاف وضعیت آمده در بخش ۱۴-۴-۲ الف-۱ ی بالا، در اینجا باید تحول سیستم را بین لحظهٔ اولیه که در آن سیستم در حالت $|\psi_i\rangle$ است و لحظهٔ t که اندازه‌گیری انجام می‌شود، در نظر بگیریم. اما، همان‌طور که خواهیم دید، این تحول مسئله را به‌طور فاحش تغییر نمی‌دهد و جملهٔ تبادل به‌صورت قبلی وارد می‌شود.

در حالت اولیهٔ سیستم (شکل ۱۴-۶ الف)، دو ذره، با تکانه‌های متقابل به طرف یکدیگر می‌روند. محور Oz را در راستای این تکانه‌ها انتخاب می‌کنیم، و قدرمطلق آنها را با p نمایش می‌دهیم. به این ترتیب، یکی از ذرات دارای تکانهٔ pe_z ، و دیگری دارای تکانهٔ $-pe_z$ است (e_z بردار یکهٔ محور Oz است). کت فیزیکی $|\psi_i\rangle$ معرف این حالت اولیه را به‌صورت زیر می‌نویسیم

$$|\psi_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + \varepsilon p_{z1})|1 : pe_z ; 2 : -pe_z\rangle \quad (14-13)$$

$|\psi_i\rangle$ حالت سیستم را در زمان t_0 قبل از برخورد، نشان می‌دهد.



شکل ۱۴-۶ برخورد بین دو ذرهٔ یکسان در چارچوب مرکز جرم: تکانه‌های دو ذره در حالت اولیه (شکل الف) و حالت نهایی (شکل ب) را که در اندازه‌گیری به‌دست می‌آیند، نشان داده‌ایم. برای سهولت، از اسپین ذرات صرف‌نظر می‌کنیم.

۱. بررسی ساده‌شده‌ای از این مسئله را ارائه خواهیم داد، که صرفاً برای نشان دادن رابطهٔ بین جملهٔ مستقیم و جملهٔ تبادل است. بخصوص، از اسپین دو ذره صرف‌نظر خواهیم کرد. اما، محاسبات این بخش در موردی که در آن برهم‌کنشها مستقل از اسپین، و دو ذره در آغاز در یک حالت اسپینی باشند، معتبر می‌ماند.

معادله شرودینگر که بر تحول زمانی سیستم حاکم است خطی است. در نتیجه، یک عملگر خطی مانند $U(t, t')$ وجود دارد، که تابعی از هامیلتونی H است، به طوری که بردار حالت در لحظه t با رابطه زیر داده می شود (مکمل F، فصل ۳، جلد اول، کتاب فارسی)

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi_i\rangle \quad (۱۳۱-۱۴)$$

در حالت خاص، بعد از برخورد، حالت سیستم در زمان t_1 توسط کت فیزیکی زیر مشخص می شود

$$|\psi(t_1)\rangle = U(t_1, t_0)|\psi_i\rangle \quad (۱۳۲-۱۴)$$

توجه کنید که، چون هامیلتونی H متقارن است، عملگر تحول U با عملگر جایگشت جابه جایپذیر است

$$[U(t, t'), P_{r1}] = 0 \quad (۱۳۳-۱۴)$$

حال، دامنه احتمال نتیجه حاصل در قسمت ۱۴-۱-۳ الف را، که در آن ذرات در دو جهت مخالف محور On ، با بردار یکه n ، آشکار می شوند، محاسبه می کنیم (شکل ۱۴-۶ الف). کت فیزیکی وابسته به این حالت نهایی را با فرمول زیر نمایش می دهیم

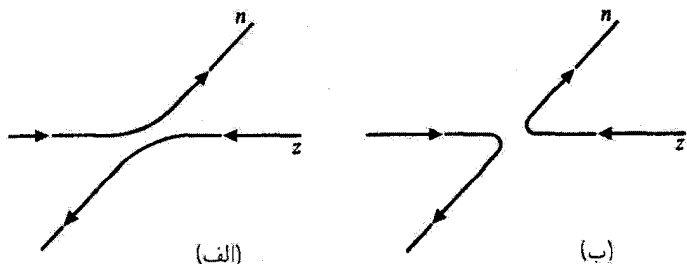
$$|\psi_f\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + \varepsilon P_{r1})|1 : pn; 2 : -pn\rangle \quad (۱۳۴-۱۴)$$

بنابراین، دامنه احتمال مطلوب را می توان به صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned} \langle \psi_f | \psi(t_1) \rangle &= \langle \psi_f | U(t_1, t_0) | \psi_i \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} |1 : pn; 2 : -pn| (1 + \varepsilon P_{r1}^\dagger) U(t_1, t_0) (1 + \varepsilon P_{r1}) |1 : pe_z; 2 : -pe_z\rangle \end{aligned} \quad (۱۳۵-۱۴)$$

بر طبق رابطه (۱۳۳-۱۴) و خواص عملگر P_{r1} بالاخره داریم

$$\begin{aligned} \langle \psi_f | U(t_1, t_0) | \psi_i \rangle &= \langle 1 : pn; 2 : -pn | (1 + \varepsilon P_{r1}^\dagger) U(t_1, t_0) | 1 : pe_z; 2 : -pe_z \rangle \\ &= \langle 1 : pn; 2 : -pn | U(t_1, t_0) | 1 : pe_z; 2 : pe_z \rangle \\ &\quad + \varepsilon \langle 1 : -pn; 2 : pn | U(t_1, t_0) | 1 : pe_z; 2 : -pe_z \rangle \end{aligned} \quad (۱۳۶-۱۴)$$



شکل ۷-۱۴ برخورد بین دو ذره یکسان در چارجوب مرکز جرم: نمایش طرح وار فرایندهای فیزیکی متناظر با جمله مستقیم و جمله تبادل. دامنه‌های پراکندگی وابسته به این دو فرایند برای بوزونها با علامت + و برای فرمیونها با علامت - تداخل می‌کنند.

جمله مستقیم، به‌عنوان مثال، متناظر است با فرایند شکل (۷-۱۴ الف)، و در این صورت جمله تبادل توسط شکل (۷-۱۴ ب) نمایش داده می‌شود. در اینجا نیز، دامنه‌های احتمال وابسته به این دو فرایند باید جمع یا تفریق شوند. این امر باعث می‌شود که وقتی مربع قدرمطلق عبارت (۷-۱۴) را می‌گیریم، یک جمله تداخلی ظاهر شود. همچنین توجه کنید که این عبارت، وقتی n به $-n$ تبدیل شود فقط در ϵ ضرب می‌شود، به طوری که احتمال متناظر بر اثر تبادل، ناوردا می‌ماند.

ب) وضعیتهایی که در آنها می‌توان از اصل موضوع مقارن‌سازی صرف نظر کرد

اگر کاربرد اصل موضوع مقارن‌سازی همواره ضروری بود، غیرممکن بود که بتوانیم خواص یک سیستم متشکل از تعداد محدودی ذره را مطالعه کنیم، زیرا در آن صورت، باید تمام ذرات جهان را که با ذرات این سیستم یکسان بودند به حساب می‌آوردیم. در این بخش خواهیم دید که این چنین نیست. در واقع، تحت بعضی شرایط خاص، ذرات یکسان طوری رفتار می‌کنند که گویی در واقع یکسان نیستند و لزومی ندارد که برای به‌دست آوردن پیش‌بینیهای فیزیکی صحیح، اصل موضوع مقارن‌سازی را در نظر بگیریم. طبیعی به نظر می‌رسد، که با توجه به نتایج بخش ۱۴-۲-۴ الف، انتظار داشته باشیم که هرگاه جملات تبادل ناشی از اصل موضوع مقارن‌سازی صفر باشند، چنین وضعیتی بروز کند. برای این منظور دو مثال می‌آوریم.

۱. ذرات یکسان واقع در دو ناحیه متمایز از فضا

دو ذره یکسان را در نظر می‌گیریم که یکی در حالت منفرد $\langle \varphi \rangle$ و دیگری در حالت $\langle \chi \rangle$ باشد. جهت ساده کردن نمادگذاری از اسپین آنها صرف نظر می‌کنیم. فرض کنید که حوزه توابع موج معرف

کنتهای $\langle \varphi |$ و $\langle \chi |$ کاملاً در فضا از یکدیگر مجزا باشند

$$\begin{cases} \varphi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \varphi \rangle = 0 & \mathbf{r} \notin D \text{ اگر} \\ \chi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \chi \rangle = 0 & \mathbf{r} \notin \Delta \text{ اگر} \end{cases} \quad (14-137)$$

که در آن نواحی D و Δ برهم افتادگی ندارند. این وضعیت، مشابه با وضعیت مکانیک کلاسیکی (۱۴-۱) است: تا وقتی نواحی D و Δ روی هم افتادگی نداشته باشند، می توان هر کدام از ذرات را "دنبال" کرد؛ بنابراین انتظار داریم که به کار بردن اصل موضوع مقارن سازی غیر ضروری باشد. در این مورد، می توانیم اندازه گیری یک مشاهده پذیر مربوط به یکی از دو ذره را مورد توجه قرار دهیم. آنچه نیاز داریم عبارت است از یک وسیله اندازه گیری که طوری قرار داده شده باشد که نتواند آنچه را که در حوزه D یا در حوزه Δ روی می دهد، ثبت کند. اگر، با این روش، D را طرد کنیم، اندازه گیری فقط به ذره واقع در Δ مربوط خواهد شد، و برعکس.

حال یک اندازه گیری همزمان مربوط به دو ذره را در نظر بگیرید و فرض کنید که این اندازه گیریها با دو وسیله اندازه گیری متمایز انجام شده است، که یکی از آنها به پدیده هایی که در Δ رخ می دهد حساس نیست، و دیگری به پدیده هایی که در D به وقوع می پیوندد. حال، چگونه می توان احتمال یافتن یک نتیجه معینی را محاسبه کرد؟ فرض کنید $\langle u |$ و $\langle v |$ به ترتیب حالت های منفرد وابسته به نتایج دو وسیله اندازه گیری باشند. چون دو ذره یکسان اند باید از دیدگاه نظری، اصل موضوع مقارن سازی را منظور کنیم. در این صورت در دامنه احتمال وابسته به نتیجه اندازه گیری، جمله مستقیم برابر با $\langle u | \varphi \rangle \langle v | \chi \rangle$ و جمله تبادل برابر با $\langle u | \chi \rangle \langle v | \varphi \rangle$ است. اما، وضعیت فضایی وسایل اندازه گیری حاکی از آن است که

$$\begin{aligned} u(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | u \rangle &= 0 & \mathbf{r} \in \Delta \text{ اگر} \\ v(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | v \rangle &= 0 & \mathbf{r} \in D \text{ اگر} \end{aligned} \quad (14-138)$$

بر طبق (۱۴-۱۳۷) و (۱۴-۱۳۸)، توابع موج $u(\mathbf{r})$ و $\chi(\mathbf{r})$ و همین طور $v(\mathbf{r})$ و $\varphi(\mathbf{r})$ روی هم افتادگی ندارند، به طوری که

$$\langle u | \chi \rangle = \langle v | \varphi \rangle = 0 \quad (14-139)$$

بنابراین جمله تبادل صفر است. در نتیجه، در وضعیت فعلی، به کار بردن اصل موضوع مقارن سازی ضروری نیست. با این فرض که گویی دو ذره مختلف اند و، با زدن برچسب شماره ۱ به ذره مثلاً

واقع در ناحیه D و بر حسب شماره ۲ به ذره واقع در ناحیه Δ ، مستقیماً نتیجه مطلوب را به دست می آوریم: به این ترتیب، قبل از اندازه گیری، حالت سیستم توسط کت $\langle \chi; 2; \varphi; 1 \rangle$ توصیف می شود، و کت $\langle \psi; 2; u; 1 \rangle$ ، وابسته به نتیجه اندازه گیری مورد نظر است؛ حاصل ضرب نرده ای این دو، دامنه احتمال $\langle \psi | \chi \rangle \langle u | \varphi \rangle$ را می دهد.

این استدلال نشان می دهد که وجود ذرات یکسان، از مطالعه جداگانه سیستمهای مقیدی که متشکل از تعداد کمی ذره هستند، جلوگیری نمی کند.

یادداشت:

در حالت اولیه انتخابی، دو ذره در دو ناحیه متمایز از فضا قرار دارند. علاوه بر این، حالت سیستم را با مشخص کردن دو حالت منفرد تعریف کرده ایم. می خواهیم ببینیم که آیا پس از تحول سیستم باز هم می توان یکی از دو ذره را مطالعه کرد و از دیگری چشم پوشید. برای این منظور، نه فقط دو ذره باید در دو ناحیه متمایز از فضا باقی بمانند، بلکه باید بر یکدیگر برهم کنشی نیز نداشته باشند. در واقع، چه ذرات یکسان باشند و چه نباشد، همواره یک برهم کنش همبستگیهای بین آنها را ایجاد می کند، و دیگر نمی توان هر یک از آنها را با یک بردار حالت توصیف کرد. ■

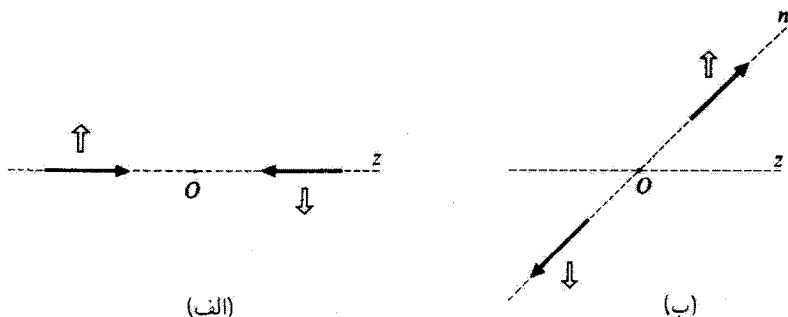
۲. ذراتی که با استفاده از جهت اسپین مشخص می شوند
 یک برخورد کشتان را بین دو ذره یکسان با اسپین $1/2$ (مثلاً الکترون) در نظر بگیرید، و فرض کنید که از برهم کنشهای وابسته به اسپین می توان چشم پوشید، به طوری که حالت های اسپینی دو ذره در خلال برخورد پایسته باشند. اگر این حالت های اسپین در ابتدا متعامد باشند، همواره می توانیم دو ذره را از یکدیگر تمیز دهیم، به طوری که گویی یکسان نبوده اند؛ در نتیجه، باز هم اصل موضوع مقارن سازی در اینجا اثری ندارد.

این مطلب را می توان با استفاده از محاسبه بخش ۱۴-۴-۲-الف-۱ نشان داد. کت فیزیکی اولیه عبارت است از [به عنوان مثال، (شکل ۱۴-۸ الف)]

$$|\psi_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - P_{11})|1; pe_{z1}, +; 2; -pe_{z2}, -\rangle \quad (14-14)$$

(که در آن نماد $+$ یا $-$ که بعد از هر تکانه اضافه شده است نشان دهنده مؤلفه اسپین در امتداد یک محور خاص است). حالت نهایی مورد نظر (شکل ۱۴-۸ ب) با رابطه زیر توصیف می شود

$$|\psi_f\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - P_{11})|1; pn_1, +; 2; -pn_2, -\rangle \quad (14-14)$$



شکل ۸-۱۴ برخورد بین دو ذره یکسان با اسپین $1/2$ در چارچوب مرکز جرم: نمایش طرح وار تکانه‌ها و اسپینهای دو ذره در حالت اولیه (شکل الف) و حالت نهایی که در اندازه‌گیری به دست می‌آید (شکل ب). اگر برهم‌کنشهای بین دو ذره مستقل از اسپین باشند سنگری اسپینها در خلال برخورد تغییری نمی‌کند. وقتی دو ذره قبل از برخورد در یک حالت اسپینی نباشند (مورد شکل)، می‌توان "مسیر" طی شده توسط سیستم را در ورود به یک حالت نهایی معینی مشخص کرد. به عنوان مثال، تنها فرایند پراکندگی که منجر به حالت نهایی شکل (ب) می‌شود و دارای دامنه غیر صفر است، از نوع شکل ۷-۱۴ الف است.

تحت این شرایط، فقط اولین جمله (۱۴-۱۳۶) مخالف صفر است، زیرا جمله دوم را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$(\downarrow : -pn, -; \uparrow : pn, + | U(t_1, t_0) | \uparrow : pe_z, +; \downarrow : -pe_z -) \quad (14-142)$$

این جمله عنصر ماتریسی یک عملگر مستقل از اسپین (بنا به فرض) بین دو کت است که حالت‌های اسپین آنها متعامدند؛ و از این رو برابر صفر است. در نتیجه، اگر دو ذره را مستقیماً طوری در نظر می‌گیریم که گویی مختلف‌اند، یعنی، اگر کتهای اولیه و نهایی را پادمقارن نمی‌کردیم و اگر شاخص ۱ را به حالت اسپین (+) و شاخص ۲ را به حالت اسپین (-) نسبت می‌دادیم، به همان نتیجه می‌رسیدیم. البته، اگر عملگر تحول U ، یعنی هامیلتونی H سیستم، مستقل از اسپین باشد، دیگر، این امر امکان‌پذیر نیست.

مراجع برای مطالعه بیشتر

اهمیت تداخل بین جملات مستقیم و تبادلی در (1.2) Feynman III بخشهای ۳-۴ و

فصل ۴.

آمار کوانتومی: (8.4) Reif, (8.2) Kittel.

- گروههای جایگشت: Messiah (1.17), پیوست D بخش (2.23) Wigner §IV;
فصل ۸۳, Bacry (10.31) بخشهای ۴۱ و ۴۲.
اثر اصل موضوع مقارن سازی بر طیف مولکولی: Herzberg (12.4) جلد اول فصل سوم,
بخش ۲۴.
و یک مقاله عامه پسند: Gamow (1.27).

مکملهای فصل ۱۴

۱. اتمهای چندالکترونی. پیکربندیهای الکترونی

۱. مطالعه ساده اتمهای چندالکترونی در تقریب میدان مرکزی. نتایج اصل طرد پاولی را بررسی و مفهوم یک پیکربندی را معرفی می‌کند. بحث در سطح کیفی باقی می‌ماند.

۲. ترازهای انرژی اتم هلیم: پیکربندیها، جملات، چندتاییها

۲. در مورد اتم هلیم، اثر دافعه الکتروستاتیکی بین الکترونها و برهم‌کنشهای مغناطیسی را مطالعه می‌کند. مفاهیم جملات و چندتاییها را معرفی می‌کند. می‌توان در مطالعات بعدی از آن استفاده کرد.

۳. خواص فیزیکی یک گاز الکترون. کاربرد در جامدات

۳. مطالعه حالت پایه یک گاز الکترون آزاد محبوس در یک "جعبه". معرفی مفهوم انرژی فرمی و شرایط مرزی متناوب. تعمیم به الکترونها در جامدات و بحث کیفی رابطه بین رسانندگی الکتریکی و مکان تراز فرمی، نسبتاً مشکل است. بحثهای فیزیکی را مورد تأکید قرار می‌دهد. می‌توان آن را به عنوان دنباله‌ای از مکمل ۶ فصل ۱۱ تلقی کرد.

مکمل ۱

اتمهای چندالکترونی. پیکربندیهای الکترونی

۱. تقریب میدان مرکزی

الف) مشکلات مربوط به برهمکنشهای الکترونی

ب) اساس روش

ج) ترازهای انرژی اتم

۲. پیکربندیهای الکترونی عناصر مختلف

ترازهای انرژی اتم هیدروژن را در فصل ۷ به تفصیل مطالعه کردیم. با توجه به اینکه اتم هیدروژن فقط یک الکترون دارد، این مطالعه، به طور قابل توجهی ساده می شود، به گونه ای که اصل پاولی نقشی پیدا نمی کند. علاوه بر این، با به کار بردن چارچوب مرکز جرم، می توان مسئله را به محاسبه ترازهای انرژی یک ذره منفرد (ذره نسبی) که تحت تأثیر یک پتانسیل مرکزی قرار دارد تقلیل داد.

در این مکمل، اتمهای چند الکترونی را در نظر خواهیم گرفت، که برای آنها این ساده سازیها میسر نیست. در چارچوب مرکز جرم، باید مسئله ای را که شامل چندین ذره غیرمستقل است، حل کنیم. خواهیم دید که این مسئله یک مسئله پیچیده است و با استفاده از تقریب میدان مرکزی (که بدون وارد شدن به جزئیات محاسبات، خلاصه آن را خواهیم دید) فقط یک جواب تقریبی دارد. علاوه بر این، همان طوری که نشان خواهیم داد، اصل پاولی نقش مهمی ایفا می کند.

۱. تقریب میدان مرکزی

یک اتم Z الکترونی را در نظر بگیرید. چون جرم هسته بسیار (چندین هزار مرتبه) سنگینتر از جرم الکترونهاست، مرکز جرم اتم عملاً بر هسته منطبق است، و از این رو فرض خواهیم کرد که هسته در مبدأ مختصات بی حرکت باشد.^۱ هامیلتونی توصیف کننده حرکت الکترونها را می توان، با چشمپوشی از تصحیحات نسبیتی و، بخصوص، جملات وابسته به اسپین، به صورت زیر نوشت

$$H = \sum_{i=1}^Z \frac{\mathbf{P}_i^2}{2m_e} - \sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{R_i} + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|} \quad (1)$$

۱. این تقریب معادل این است که از اثر جرم متناهی هسته ای صرف نظر کنیم.

در اینجا به طور اختیاری الکترونها را از ۱ تا Z شماره‌گذاری کرده و قرار داده‌ایم

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

که در آن q بار الکترون است. جمله اول هامیلتونی (۱) نماینده انرژی جنبشی کل سیستم الکترونی است؛ جمله دوم ناشی از جاذبه‌ای است که توسط هسته، که حامل بار مثبت $-Zq$ است، بر هر یک از آنها وارد می‌شود. جمله آخر، دافعه متقابل الکترونها را توصیف می‌کند [توجه کنید که در اینجا جمع‌بندی بر روی $Z(Z-1)/2$ طریق مختلف تزیوج الکترونها صورت می‌گیرد]. هامیلتونی (۱) پیچیده‌تر از آن است که بتوانیم، حتی در ساده‌ترین مورد، مورد هلیوم ($Z=2$)، معادله ویژه مقدار آن را دقیقاً حل کنیم.

الف) مشکلات مربوط به برهم‌کنشهای الکترونی

در غیاب جمله برهم‌کنش متقابل $\sum_{i < j} e^2 / |\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|$ در H ، الکترونها مستقل از هم می‌بودند و در این صورت، تعیین انرژیهای اتم ساده بود. کافی بود که انرژیهای Z الکترون را که به طور منفرد در پتانسیل کولنی $-Ze^2/r$ بودند، با هم جمع کنیم، و نظریه‌ای که در فصل ۷ مطرح کردیم، مستقیماً نتیجه را به دست می‌داد. ویژه حالت‌های اتم را نیز می‌توانستیم با پادمقارن‌سازی حاصلضرب تانسوری حالت‌های مانای الکترونهاي مختلف، به دست آوریم.

بنابراین، وجود جمله برهم‌کنش متقابل است که حل دقیق مسئله را مشکل می‌سازد. ممکن است سعی کنیم این جمله را با نظریه اختلال بررسی کنیم. اما، یک برآورد اجمالی از بزرگی نسبی آن نشان می‌دهد که این نظریه، تقریب خوبی به دست نخواهد داد. انتظار می‌رود که فاصله $|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|$ بین دو الکترون، به طور متوسط، تقریباً برابر با فاصله R_i ی یک الکترون از هسته باشد. بنابراین نسبت جمله سوم فرمول (۱) به جمله دوم، ρ ، تقریباً برابر است با

$$\rho \approx \frac{\frac{1}{2}Z(Z-1)}{Z^2} \quad (3)$$

ρ ، بین $1/4$ به ازای $Z=2$ و $1/2$ برای Z های خیلی بزرگتر از ۱، تغییر می‌کند. در نتیجه، بررسی اختلال برهم‌کنشهای متقابل، حداکثر، نتایجی کم‌وبیش قانع‌کننده برای هلیوم ($Z=2$) می‌دهد، ولی اعمال آن به سایر اتمها غیر عملی است (ρ به ازای $Z=3$ ، برابر $1/3$ است). بنابراین، باید روش تقریبی کاملتری پیدا کرد.

(ب) اساس روش

برای درک مفهوم یک میدان مرکزی، از یک استدلال نیمه کلاسیک استفاده خواهیم کرد. یک الکترون خاص (i) را در نظر بگیرید. در تقریب اول، وجود $(Z - 1)$ الکترون دیگر فقط به این دلیل بر آن تأثیر می‌گذارد که توزیع بار آنها به طور جزئی جاذبه الکتروستاتیکی هسته را جبران می‌کند. در این تقریب، می‌توان در نظر گرفت که الکترون (i) در پتانسیلی که فقط به مکان r_i آن بستگی داشته باشد و اثر میانگین دافعه سایر الکترونها را شامل شود، حرکت می‌کنند. پتانسیل $V_c(r_i)$ را که فقط به قدر مطلق r_i بستگی دارد انتخاب می‌کنیم و آن را "پتانسیل مرکزی" اتم مورد نظر می‌نامیم. البته، این فقط می‌تواند یک تقریب باشد؛ چون، در واقع، الکترون (i) بر روی $(Z - 1)$ الکترون دیگر اثر می‌گذارد، نمی‌توان از همبستگی‌هایی که بین آنها وجود دارد چشم پوشید، به علاوه، وقتی الکترون (i) در مجاورت بلا فصل الکترون دیگر (j) باشد، دافعه اعمال شده توسط (j) مهمتر می‌شود، و نیروی متناظر مرکزی نیست. اما در مکانیک کوانتومی، که واجیگزیدگی الکترونها را به صورت توزیع بار آنها در ناحیه گسترده‌ای از فضا در نظر می‌گیریم، ایده پتانسیل متوسط موجه‌تر به نظر می‌رسد.

پس، با این ملاحظات، هامیلتونی را به صورت زیر می‌نویسیم

$$H = \sum_{i=1}^Z \left[\frac{P_i^2}{2m_e} + V_c(R_i) \right] + W \quad (4)$$

که در آن

$$W = - \sum_{i=1}^Z \frac{Ze^2}{R_i} + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|R_i - R_j|} - \sum_{i=1}^Z V_c(R_i) \quad (5)$$

اگر پتانسیل مرکزی $V_c(r_i)$ را به طور مناسبی انتخاب کنیم، W در هامیلتونی H نقش یک تصحیح کوچک را بازی می‌کند. در این صورت، تقریب میدان مرکزی عبارت است از صرف نظر کردن از این تصحیح، یعنی، انتخاب هامیلتونی تقریبی

$$H_0 = \sum_{i=1}^Z \left[\frac{P_i^2}{2m_e} + V_c(R_i) \right] \quad (6)$$

به این ترتیب، W را به عنوان یک اختلال از H_0 تلقی خواهیم کرد (مکمل ۲ از فصل ۱۴، بخش ۲). قطری کردن H_0 ، ما را به مسئله ذرات مستقل هدایت می‌کند. برای به دست آوردن ویژه حالت‌های

H_0 ، کافی است ویژه‌حالت‌های هامیلتونی تک‌الکترونی زیر را تعیین کنیم

$$\frac{P^2}{2m_e} + V_c(R) \quad (7)$$

البته تعاریف (۴) و (۵) پتانسیل مرکزی $V_c(r)$ را مشخص نمی‌کنند، زیرا برای تمام $V_c(r)$ ها همیشه داریم $H = H_0 + W$ ، اما، برای اینکه بتوانیم W را اختلال در نظر بگیریم، باید $V_c(r)$ را درست انتخاب کنیم. در اینجا، به مسئله وجود و تعیین یک چنین پتانسیل بهینه‌ای خواهیم پرداخت. این یک مسئله پیچیده است. پتانسیل $V_c(r)$ که یک الکترون مفروض تحت تأثیر آن قرار دارد، به توزیع فضایی $(Z - 1)$ الکترون دیگر بستگی دارد، و این توزیع، به نوبه خود به پتانسیل $V_c(r)$ وابسته است، زیرا توابع موج $(Z - 1)$ الکترون را نیز باید از روی $V_c(r)$ محاسبه کنیم. بنابراین، باید به یک جواب همدوس (یا به اصطلاح، "خودسازگار") برسیم که برای آن، توابع موجی که از روی $V_c(r)$ تعیین می‌شود، توزیع باری تولید می‌کند که مجدداً همین پتانسیل $V_c(r)$ را می‌سازد.

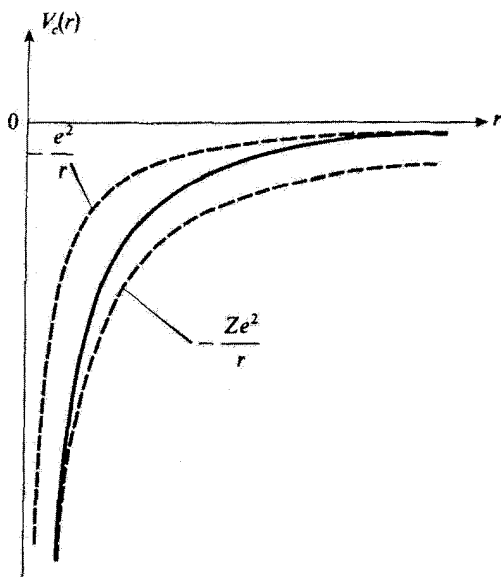
ج) ترازهای انرژی اتم

در حالی که تعیین دقیق پتانسیل $V_c(r)$ مستلزم محاسبات نسبتاً طولانی است، و به سهولت می‌توان رفتار این پتانسیل را در فواصل نزدیک و دور پیش‌بینی کرد. در واقع، انتظار می‌رود که، برای r های کوچک، الکترون (i) مورد نظر در داخل توزیع باری که توسط الکترونهای دیگر ایجاد می‌شود، باشد، به طوری که این الکترون، منحصراً پتانسیل جاذبه هسته را "می‌بیند"؛ از طرف دیگر، برای r های بزرگ، یعنی، در خارج از "ابر" متشکل از $(Z - 1)$ الکترون که به طور دسته‌جمعی در نظر گرفته می‌شوند، مانند این است که یک بار نقطه‌ای منفرد داریم که در مبدأ مختصات قرار دارد و برابر با مجموع بارهای هسته و "ابر" است [این $(Z - 1)$ الکترون میدان هسته را می‌پوشانند]. در نتیجه (شکل ۱)

$$V_c(r) \simeq -\frac{e^2}{r} \quad \text{برای } r \text{ های بزرگ}$$

$$V_c(r) \simeq -\frac{Ze^2}{r} \quad \text{برای } r \text{ های کوچک} \quad (8)$$

برای مقادیر میانی r ، تغییر $V_c(r)$ می‌تواند بسته به اتم تحت بررسی، کم‌وبیش پیچیده باشد. اگرچه این ملاحظات کیفی هستند، ولی یک دید کلی از طیف هامیلتونی تک‌الکترونی (۷) به دست می‌دهند. چون $V_c(r)$ به سادگی متناسب با $1/r$ نیست، واگنی تصادفی که برای اتم



شکل ۱ تغییرات پتانسیل مرکزی $V_c(r)$ نسبت به r . منحنیهای خطچین، رفتار این پتانسیل را در فواصل کوتاه $(-Ze^2/r)$ و فواصل دور $(-e^2/r)$ نشان می‌دهند.

هیدروژن پیدا کردیم (فصل ۷، بخش ۷-۳-۴-ب)، دیگر مشاهده نمی‌شود. ویژه‌مقدارهای هامیلتونی (۷) به دو عدد کوانتومی n و l بستگی دارند [اما چون $V_c(r)$ مرکزی است مستقل از m باقی می‌ماند]. البته، l ویژه‌مقدار عملگر L^2 را مشخص می‌کند، و n بنا به تعریف (مثل اتم هیدروژن)، مجموع عدد کوانتومی سمتی l و عدد کوانتومی شعاعی k است که در حل معادله شعاعی متناظر با l معرفی کردیم؛ بنابراین، n و l اعدادی صحیح هستند و در رابطه زیر صدق می‌کنند

$$0 \leq l \leq n - 1 \quad (9)$$

روشن است که برای یک مقدار معین l انرژیهای $E_{n,l}$ با n افزایش می‌یابند

$$E_{n,l} > E_{n',l} \quad \text{اگر } n > n' \quad (10)$$

به‌ازای n ثابت، وقتی یک ویژه‌حالت "پرنفوذتر" باشد یعنی، وقتی چگالی احتمال الکترون در مجاورت هسته زیادتر باشد، انرژی متناظر پایینتر است [بنا بر رابطه (۸) در این صورت اثر پوششی کمتر است]. بنابراین، انرژیهای $E_{n,l}$ وابسته به یک مقدار n را می‌توانیم به ترتیب صعودی تکانه

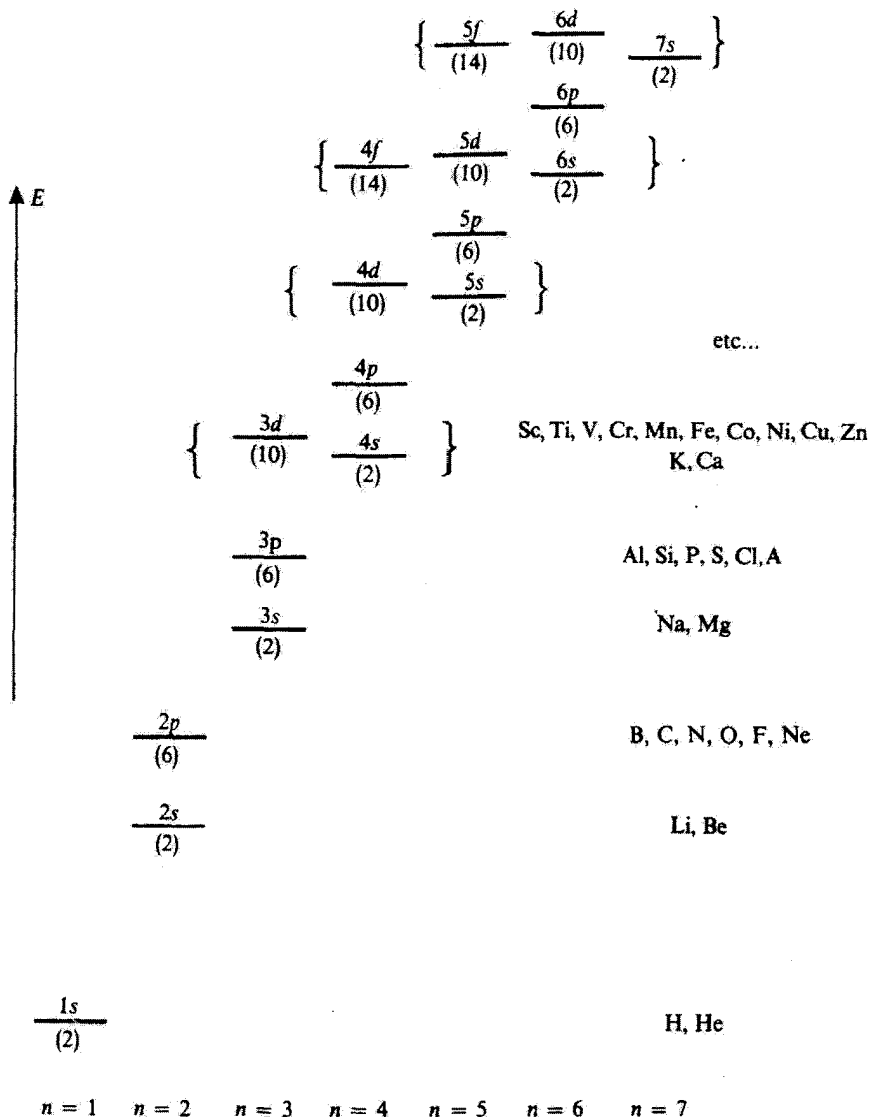
$$E_{n_1,0} < E_{n_1,1} < \dots < E_{n_1,n-1} \quad (11)$$

برحسب اتفاق، سلسله مراتب حالتها برای تمام اتمها تقریباً یکسان است، هر چند مقادیر مطلق انرژیهای متناظر با Z تغییر می‌کند، شکل ۲ این سلسله مراتب، و همچنین واگنی $(1 + 2l) - 2$ لای هر کدام از ترازها را نشان می‌دهد (ضریب ۲ از اسپین الکترون ناشی می‌شود). حالت‌های مختلف را با نمادگذاری اسپکتروسکوپیکی (فصل ۷، بخش ۷-۳-۴-ب) نشان می‌دهیم. ترازهایی که در داخل یک آکولاد قرار دارند، بسیار نزدیک به یکدیگرند، و حتی ممکن است، در بعضی اتمها، عملاً بر هم منطبق باشند (بر این واقعیت تأکید می‌کنیم که شکل ۲ صرفاً یک نمایش طرح‌وار است که به منظور قرار دادن ویژه‌مقدارهای $E_{n,l}$ نسبت به یکدیگر رسم شده است؛ سعی نشده است که یک مقیاس انرژی نسبتاً واقع‌بینانه ارائه شود).

به اختلاف زیاد بین طیف انرژی نشان داده شده و طیف انرژی اتم هیدروژن (فصل ۷، شکل ۷-۴) توجه کنید. همان‌طور که قبلاً گفته شد، در اینجا، انرژی به عدد کوانتومی مداری l بستگی دارد، و، علاوه بر این، ترتیب حالتها متفاوت است. به‌عنوان مثال، شکل ۲ نشان می‌دهد که انرژی لایه $4s$ کمی از انرژی لایه $3d$ کمتر است. همان‌طور که دیدیم این امر با این واقعیت که تابع موج $4s$ ، پرنفوذتر است، توجیه می‌شود. وضعیتهای مقلوب مشابهی برای لایه‌های $n = 4$ و $n = 5$ و غیره، رخ می‌دهند. این موضوع اهمیت دافعه بین الکترونی را نشان می‌دهد.

۲. پیکربندیهای الکترونی عناصر مختلف

در تقریب میدان-مرکزی، ویژه‌حالت‌های هامیلتونی کل H_0 اتم عبارت است از درمینانهای اسلاتر که از حالت‌های الکترونی منفرد وابسته به حالت‌های انرژی $E_{n,l}$ ، که پیش از این توضیح دادیم، ساخته می‌شوند. بنابراین، این همان وضعیتی است که در بخش ۱۴-۴-۱ الف از فصل ۱۴ ملاحظه کردیم؛ حالت پایه اتم وقتی به دست می‌آید که Z الکترون، پایینترین حالت‌هایی را که با اصل باژلی سازگارند، اشغال کنند. بیشترین تعداد الکترونی که می‌توانند انرژی مفروض $E_{n,l}$ را داشته باشند، برابر است با درجه واگنی آن تراز انرژی، $(1 + 2l) \cdot 2$. مجموعه حالت‌های منفرد وابسته به انرژی $E_{n,l}$ را یک لایه می‌نامیم. فهرست لایه‌های اشغال شده با تعداد الکترونی هر لایه را پیکربندی الکترونی می‌گویند. نمادگذاری مورد استفاده را در زیر با ذکر چند مثال مشخص خواهیم کرد. مفهوم پیکربندی، نقش مهمی در خواص شیمیایی اتمها نیز بازی می‌کند. دانستن توابع موج الکترونیهای مختلف و انرژیهای نظیر، امکان می‌دهد تا تعداد، پایداری و هندسه پیوندهای شیمیایی را که می‌توانند توسط این اتم تشکیل شوند تعبیر کنیم (مکمل ۵ از فصل ۷).



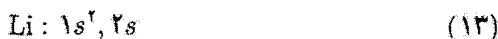
شکل ۲ نمایش طرح‌وار ترتیب ترازهای انرژی (لایه‌های الکترونی) در نوعی از پتانسیل مرکزی که در شکل ۱ نشان دادیم. برای هر مقدار n ، انرژی با l افزایش می‌یابد. واگنی هر تراز در پراکنش مشخص شده است. ترازهایی که در داخل یک آکولاد آمده‌اند، بسیار نزدیک به یکدیگرند، و تغییر مکان نسبی آنها از اتمی به اتم دیگر تغییر می‌کند. در طرف راست شکل، علائم شیمیایی اتمهایی نوشته شده است که برای آنها لایه الکترونی که بر روی همان خط ظاهر می‌شود عبارت است از آخرین لایه اشغال‌شده در بیکربندی حالت پایه.

برای تعیین پیکربندی الکترونی یک اتم مفروض در حالت پایه آن، لایه‌های مختلف را، متوالیاً به ترتیبی که در شکل ۲ نشان داده‌ایم، "پر" می‌کنیم (البته با شروع از تراز $1s$) تا Z الکترون تمام شود. این همان کاری است که در مرور سریع جدول مندلیف انجام خواهیم داد.

در حالت پایه اتم هیدروژن، تنها الکترون این اتم، تراز $1s$ را اشغال می‌کند. پیکربندی الکترونی عنصر هدی (هلیم، $Z = 2$) عبارت است از



که بدین معنی است که دو الکترون، دو حالت متعامد لایه $1s$ را اشغال می‌کنند (توابع موج فضایی یکسان، حالت‌های اسپین متعامد). سپس به لیتیم ($Z = 3$) می‌رسیم که پیکربندی الکترونی آن به صورت زیر است



لایه $1s$ فقط می‌تواند دو الکترون قبول کند، لذا الکترون سوم باید به ترازى که مستقیماً در بالای آن قرار دارد، یعنی، مطابق شکل ۲، به لایه $2s$ برود. این لایه می‌تواند الکترون دوم را قبول کند و عنصر بریلیوم ($Z = 4$) را با پیکربندی الکترونی زیر تشکیل دهد



برای $Z > 4$ ، لایه $2p$ (به شکل ۲ مراجعه شود) اولین لایه‌ای است که باید به تدریج پر شود، و به همین ترتیب با افزایش تعداد Z الکترونها، لایه‌های الکترونی بالاتر و بالاتری اشغال می‌شوند (در طرف راست شکل ۲، و در طرف مقابل هر یک از پایینترین لایه‌ها، علامت اتمهایی را که برای آنها این لایه، خارجیت‌ترین لایه است، نشان داده‌ایم). به این ترتیب، پیکربندیهای حالت پایه تمام اتمها را به دست می‌آوریم. این عمل، طبقه‌بندی مندلیف را توضیح می‌دهد. اما باید متذکر شد که ترازهایی که خیلی نزدیک به یکدیگرند (آنهايي که در آکولاد شکل ۲ گروه‌بندی شده‌اند) ممکن است به طور بسیار نامنظمی پر شوند. به عنوان مثال، اگرچه شکل ۲ برای لایه $4s$ انرژی کمتری از لایه $3d$ می‌دهد، کرومیم ($Z = 24$) دارای پنج الکترون $3d$ است، در حالی که لایه $4s$ آن پر شده است. بی‌نظمیهای مشابهی در مس ($Z = 29$)، و نیوبیم ($Z = 41$) و غیره وجود دارد.

یادداشت:

۱. پیکربندیهای الکترونی که بررسی کردیم، حالت پایه اتمهای مختلف را در تقریب میدان-مرکزی مشخص می‌کنند. پایینترین حالت‌های برانگیخته هامیلتونی H_0 وقتی به دست می‌آیند که یکی از

الکترونها به تراز منفردی که بالاتر از آخرین لایهٔ اشغال شده در حالت پایه است برود. به عنوان مثال، در مکمل ۲ از فصل ۱۴ خواهیم دید که، اولین پیکربندی برانگخته، اتم هلیم عبارت است از

$$1s, 2s \quad (15)$$

۲. به یک پیکربندی الکترونی مختوم به یک لایهٔ کامل، یک دترمینان اسلاتر غیر صفر وابسته است، زیرا، در این صورت به تعداد الکترونها، حالت متعامد منفرد وجود دارد. بنابراین، حالت پایهٔ گازهای کمیاب (ns^2, np^6, \dots) نظیر خاکشهای قلیایی (ns^2, \dots) ناواکن اند. از طرف دیگر، وقتی تعداد الکترونهاى خارجی از درجهٔ واگنی آخرین لایه کمتر باشد، حالت پایهٔ اتم واکن است. برای عناصر قلیایی (ns, \dots) درجهٔ واگنی برابر ۲ است برای کرین ($2p^2, 2s^2, 1s^2$)، این درجه برابر با $C_E^2 = 15$ است، زیرا دو حالت منفرد را می‌توانیم به‌طور دلخواه از بین شش حالت متعامد که لایهٔ $2p$ را تشکیل می‌دهند، انتخاب کنیم.

۳. می‌توان نشان داد که، برای یک لایهٔ کامل، تکانهٔ زاویه‌ای کل، و همچنین تکانهٔ زاویه‌ای مداری کل و اسپین کل (به ترتیب، مجموع تکانهٔ زاویه‌ای مداری و اسپین الکترونهاى اشغال‌کنندهٔ این لایه) صفر است. در نتیجه، تکانهٔ زاویه‌ای یک اتم^۱ فقط ناشی از الکترونهاى لایه‌های خارجی آن است. بنابراین، تکانهٔ زاویه‌ای کل اتم هلیم در حالت پایهٔ آن صفر است، و برای یک فلز قلیایی این تکانه مساوی $1/2$ (تک الکترون خارجی با تکانهٔ زاویه‌ای مداری صفر و اسپین $1/2$) است. ■

مراجع برای مطالعهٔ بیشتر

Pauling and Wilson (1.9), chap. IX; Levine (12.3), chap. 11, §§1, 2 and 3; Kuhn (11.1), chap. IV, §§A and B; Schiff (1. 18), §47; Slater (1.6), chap. 6; Landau and Lifshitz (1.19), §§68, 69 and 70.

همچنین مرجع زیر را ببینید

references of chap. XI (Hartree and Hartree-Fock methods).

The shell model in nuclear physics : Valentin (16.1), chap. VI; Preston (16.4), chap. 7; Deshalit and Feshbach (16.6), chap. IV and V.

همچنین مرجع زیر را ببینید

articles by Mayer (16.20), Peierls (16.21) and Baranger (16.22).

۱. تکانه زاویه‌ای مورد بحث در اینجا مربوط به ابرالکترونی اتم است. هسته نیز دارای تکانهٔ زاویه‌ای است که باید به این اضافه شود.

مکمل ۲

ترازهای انرژی اتم هلیم: پیکربندیها، جملات، چندتاییها

۱. تقریب میدان-مرکزی. پیکربندیها
الف) هامیلتونی الکتروستاتیکی
ب) پیکربندی حالت پایه و پیکربندیهای اولین برانگیختگی
ج) واگنی پیکربندیها
۲. اثر دافعه الکتروستاتیکی بین الکترونی: انرژی تبادل، جملات طیفی
الف) انتخاب پایه‌ای از $\mathcal{E}(n, l; n', l')$ که با تقارنهای W سازگار شده است
 ۱. تکانه مداری کل L و اسپین کل S
 ۲. قیدهای ناشی از اصل موضوع مقارن‌سازیب) جملات طیفی. نمادگذاری طیف‌نمایی
ج) بحث
 ۱. انرژیهای جملات طیفی ناشی از پیکربندی $1s, 2s$
 ۲. انتگرال تبادل
 ۳. منشأ فیزیکی اختلاف انرژی بین دو جمله طیفی
 ۴. بررسی نقش اصل موضوع مقارن‌سازی
 ۵. هامیلتونی مؤثر وابسته به اسپین
۳. ترازهای ساختار ریز؛ چندتاییها

در مکمل پیش اتمهای چند الکترونی را در تقریب میدان مرکزی، که در آن الکترونها مستقل‌اند مطالعه کردیم. از بحث مذکور توانستیم مفهوم پیکربندی را معرفی کنیم. حال تصحیحاتی را که باید، با منظور کردن دقیقتر دافعه الکتروستاتیکی بین الکترونی، به این تقریب اضافه کنیم، محاسبه خواهیم کرد. برای سادگی، مطالعه خود را به ساده‌ترین اتم چند الکترونی یعنی اتم هلیم، محدود می‌کنیم. نشان خواهیم داد که تحت اثر دافعه الکتروستاتیکی بین الکترونی، پیکربندیهای این اتم (بخش ۱ از مکمل ۲ فصل ۱۴) به جملات طیفی شکافته می‌شوند (بخش ۲ از مکمل ۲ فصل ۱۴) که، وقتی جملات کوچکتر در هامیلتونی اتمی (برهم‌کنشهای مغناطیسی) را به حساب می‌آوریم، به چندتاییهای ساختار ریز (بخش ۳ از مکمل ۲ فصل ۱۴) منجر می‌شوند. مفاهیمی را که از این بررسی به دست می‌آوریم، می‌توانیم به اتمهای پیچیده‌تر تعمیم دهیم.

۱. تقریب میدان-مرکزی. پیکربندیها

الف) هامیلتونی الکتروستاتیکی

مانند مکمل پیش، ابتدا فقط نیروهای الکتروستاتیکی را به حساب می آوریم، و هامیلتونی اتم هلیوم را [فرمول (۱۴-۱۰۱)] به صورت زیر می نویسیم

$$H = H_0 + W \quad (۱)$$

که

$$H_0 = \frac{P_1^2}{2m_e} + \frac{P_2^2}{2m_e} + V_c(R_1) + V_c(R_2) \quad (۲)$$

و

$$W = -\frac{\gamma e^2}{R_1} - \frac{\gamma e^2}{R_2} + \frac{e^2}{|R_1 - R_2|} - V_c(R_1) - V_c(R_2) \quad (۳)$$

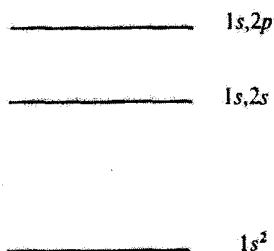
پتانسیل مرکزی $V_c(r)$ را طوری انتخاب می کنیم که W تصحیح کوچکی از H_0 باشد. وقتی از W صرف نظر کنیم، می توان الکترونها را مستقل در نظر گرفت (اگرچه نیروی دافعه الکتروستاتیکی آنها به طور جزئی توسط پتانسیل V_c به حساب آورده می شود). در این صورت، ترازهای انرژی H_0 پیکربندیهای الکتروستاتیکی را که در این بخش مطالعه می کنیم، تعریف می کنند. سپس در بخش ۲ با استفاده از نظریه اختلال مانا، اثر W را بررسی خواهیم کرد.

ب) پیکربندی حالت پایه و پیکربندیهای اولین برانگیختگی

بر طبق بحث مکمل ۱ از فصل ۱۴ (بخش ۲)، پیکربندیهای اتم هلیوم با اعداد کوانتومی l, m و l', m' دو الکترون (واقع در پتانسیل مرکزی V_c) مشخص می شوند. انرژی متناظر E_c را می توانیم به صورت زیر بنویسیم

$$E_c = E_{n,l} + E_{n',l'} \quad (۴)$$

بنابراین (شکل ۱)، پیکربندی حالت پایه، که به صورت $1s^2$ نوشته می شود، وقتی به دست می آید که دو الکترون در لایه $1s$ باشند؛ پیکربندی اولین برانگیختگی $2s$ و $1s$ ، وقتی به دست می آید که



شکل ۱ پیکربندی حالت پایه و پیکربندی اولین برانگیختگی اتم هلیوم (مقیاس انرژی رعایت نشده است).

یک الکترون در لایه $1s$ و الکترون دیگر در لایه $2s$ باشد. همچنین، پیکربندی دومین برانگیختگی، عبارت است از $1s, 2p$.

پیکربندیهای برانگیخته اتم هلیوم به شکل $1s, n'l'$ هستند. در واقع، پیکربندیهای "دوبار برانگیخته" از نوع nl و $n'l'$ (با $n, n' > 1$) نیز وجود دارند. اما، برای هلیوم، انرژی آنها بیشتر از انرژی یونش E_I اتم است (حد انرژی پیکربندی $1s, n'l'$ ، وقتی که $n' \rightarrow \infty$). بنابراین، اغلب حالت‌های متناظر بسیار ناپایدارند: این حالتها به سرعت به یک یون و یک الکترون تجزیه شوند و به "حالت‌های خودیوننده" معروف‌اند. اما تراز‌هایی وجود دارند که به پیکربندیهای دو بار برانگیخته تعلق دارند ولی خودیوننده نیستند، بلکه با گسیل فوتون‌هایی و امی‌باشند. بعضی از خطوط طیفی متناظر به تجزیه مشاهده شده‌اند.

ج) واگنی پیکربندیها

چون \vec{A} مرکزی و مستقل از اسپین است، انرژی یک پیکربندی به اعداد کوانتومی مغناطیسی m و m' ($-l \leq m \leq l$ ، $-l' \leq m' \leq l'$) یا به اعداد کوانتومی اسپین ε و ε' ($\varepsilon = \pm, \varepsilon' = \pm$) وابسته به دو الکترون، بستگی ندارد. بنابراین، اغلب پیکربندیها واگن‌اند! اکنون می‌خواهیم این واگنی را محاسبه کنیم.

یک حالت متعلق به یک پیکربندی را با مشخص کردن چهار عدد کوانتومی (n, l, m, ε) و $(n', l', m', \varepsilon')$ هر الکترون تعریف می‌کنیم. چون الکترون‌ها ذرات یکسانی هستند باید اصل موضوع متقارن‌سازی را به حساب آوریم. کت فیزیکی وابسته به این حالت را می‌توان، بر طبق نتایج ۱۴-۳-۳-ب از فصل ۱۴، به صورت زیر نوشت

$$\left| n, l, m, \varepsilon; n', l', m', \varepsilon' \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 - P_{12}) \left| 1 : n, l, m, \varepsilon; 2 : n', l', m', \varepsilon' \right\rangle \quad (5)$$

اصل یاژلی، حالت‌هایی از سیستم را که برای آنها دو الکترون بتوانند در یک حالت کوانتومی منفرد

باشند ($\varepsilon = \varepsilon'$ و $m = m', l = l', n = n'$) طرد می‌کند. بر طبق بحث بخش ۱۴-۳-۳-ب از فصل ۱۴، مجموعه کتهای فیزیکی (۵) که برای آنها l, m, n' ثابت و خود حالتها غیر صفرند (یعنی، توسط اصل پاؤلی طرد نمی‌شوند) تشکیل یک پایه راست‌هنجار در زیرفضای $\mathcal{E}(n, l; n', l')$ از \mathcal{E}_A می‌ایستد به پیکربندی $nl, n'l'$ می‌دهند.

برای محاسبه واگنی پیکربندی $nl, n'l'$ ، دو مورد متمایز را در نظر می‌گیریم:

۱. دو الکترون در یک لایه نیستند (موارد $n = n'$ و $l = l'$ را نداریم).

حالتهای منفرد دو الکترون هرگز نمی‌توانند منطبق شوند، و m, m', ε و ε' می‌توانند مستقلاً هر مقداری را بپذیرند. در نتیجه، واگنی پیکربندی برابر است با

$$2(2l+1) \times 2(2l'+1) = 4(2l+1)(2l'+1) \quad (6)$$

پیکربندیهای $1s, 2s$ و $1s, 2p$ از این مقوله‌اند؛ واگنیهای آنها به ترتیب، عبارت‌اند از ۴ و ۱۲.

۲. دو الکترون در یک لایه هستند ($l = l'$ و $n = n'$).

در این مورد، حالتهایی که برای آنها $m = m'$ و $\varepsilon = \varepsilon'$ باشد باید طرد شوند. چون تعداد حالتهای کوانتومی منفرد متمایز برابر با $2(2l+1)$ است، درجه واگنی پیکربندی nl^2 برابر است با تعداد زوجهایی که می‌توان از این حالتها منفرد تشکیل داد (۱۴-۳-۳-ب از فصل ۱۴)، یعنی

$$C_{2(2l+1)}^2 = (2l+1)(4l+1) \quad (7)$$

بنابراین، پیکربندی $1s^2$ ، که از این مقوله است، واگن نیست. بهتر است که درمیان اسلاتر متناظر با پیکربندی را بسط دهیم. اگر، در (۵)، قرار دهیم

$$\varepsilon' = -, \varepsilon = +, l = l' = m = m' = 0, n = n' = 1$$

با نوشتن قسمت فضایی به صورت یک ضرب مشترک، خواهیم داشت

$$|1s^2\rangle = |1: 1, 0, 0; 2: 1, 0, 0\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|1: +; 2: -\rangle - |1: -; 2: +\rangle) \quad (8)$$

در قسمت اسپین (۸)، عبارت مربوط به حالت تک‌تایی ($S = 0, M_S = 0$) را می‌شناسیم، که در آن S و M_S اعداد کوانتومی وابسته به اسپین کل $S = S_1 + S_2$ هستند (فصل ۱۰، بخش ۱۰-۲-۴). بنابراین، اگرچه هامیلتونی H_0 به اسپینها بستگی ندارد، ولی قیدهای ناشی از اصل موضوع متقارن‌سازی، ایجاب می‌کنند که اسپین کل حالت پایه دارای مقدار $S = 0$ باشد.

۲. اثر دافعه الکتروستاتیکی بین الکترونی: انرژی تبادل، جملات طیفی

اکنون اثر W را با استفاده از نظریه اختلال مانا مطالعه خواهیم کرد. برای این منظور، باید تعیین W را در داخل زیرفضای $\mathcal{E}(n, l; n', l')$ که وابسته به بیکربندی $nl, n'l'$ است قطری کنیم. ویژه مقادیرهای ماتریس متناظر، تصحیحات انرژی بیکربندی E_c را تا مرتبه اول نسبت به W می دهند؛ ویژه حالت‌های وابسته به آنها، ویژه حالت‌های مرتبه صفرند.

برای محاسبه ماتریس معرف W در داخل $\mathcal{E}(n, l; n', l')$ ، می توانیم هر پایه‌ای، به ویژه پایه‌ای از کتهای (۵)، را انتخاب کنیم. در واقع، بهتر است که پایه‌ای را به کار ببریم که به خوبی با تقارنهای W سازگار باشد. خواهیم دید که می توان پایه‌ای انتخاب کرد که در آن، تعیین W از پیش قطری باشد.

الف) انتخاب پایه‌ای از $\mathcal{E}(n, l; n', l')$ که با تقارنهای W سازگار شده است

۱. تکانه مدار کل L و اسپین کل S
 W با تکانه‌های زاویه‌ای منفرد L_1 و L_2 هر الکترون جابه‌جاپذیر نیست. اما قبلاً نشان دادیم (فصل ۱۰، بخش ۱-۱-۲) که، اگر L معرف تکانه زاویه‌ای مدار کل

$$L = L_1 + L_2 \quad (9)$$

باشد، داریم

$$[W, L] = \left[\frac{e^2}{R_{12}}, L \right] = 0 \quad (10)$$

بنابراین، L یک ثابت حرکت است.^۱ به علاوه، چون W در فضای حالت اسپین عمل نمی‌کند، این موضوع برای اسپین کل S نیز درست است

$$[W, S] = 0 \quad (11)$$

حال، مجموعه چهار عملگر L^2, S^2, L_z, S_z را در نظر بگیرد. این عملگرها با یکدیگر و با W جابه‌جاپذیرند. نشان خواهیم داد که این عملگرها یک هم‌کدم-ج در زیرفضای $\mathcal{E}(n, l; n', l')$

۱. نتیجه فوق از این واقعیت ناشی می‌شود که تحت دورانی که هر دو الکترون را شامل می‌شود، فاصله بین آنها، R_{12} ، ناورداست. اما، اگر فقط یکی از دو الکترون را دوران دهیم، این فاصله تغییر می‌کند. به همین دلیل W نه با L_1 و نه با L_2 جابه‌جاپذیر نیست.

از \mathcal{E}_A تشکیل می‌دهند. با این کار می‌توانیم در بخش ب مستقیماً ویژه‌مقدارهای تحدید W را در این زیرفضا پیدا کنیم.

برای این منظور، به فضای \mathcal{E} ، حاصلضرب تانسوری فضاهای حالت $\mathcal{E}(1)$ و $\mathcal{E}(2)$ می‌منسوب به دو الکترونی که به‌طور اختیاری شماره‌گذاری کرده‌ایم، برمی‌گردیم. زیرفضای $\mathcal{E}(n, l; n', l')$ از \mathcal{E}_A که وابسته به پیکر بندی n, l, n', l' است را می‌توانیم با پادمقارن‌سازی کتهای مختلف زیرفضای $\mathcal{E}(2) \otimes \mathcal{E}_{n, l}(1)$ از \mathcal{E} به‌دست آوریم.^۱ اگر پایه $\{1 : n, l, m, \varepsilon\} \otimes \{2 : n', l', m', \varepsilon'\}$ را در این زیرفضا انتخاب کنیم، پایه کتهای فیزیکی (5) با پادمقارن‌سازی به‌دست می‌آید.

اما، از نتایج فصل ۱۰ می‌دانیم که همچنین می‌توانیم در $\mathcal{E}(2) \otimes \mathcal{E}_{n, l}(1)$ پایه دیگری مرکب از ویژه‌بردارهای مشترک $\mathbf{L}^2, \mathbf{L}_z, \mathbf{S}^2, S_z$ را انتخاب کنیم که کاملاً توسط مشخصات ویژه‌مقدارهای نظیر، تعریف می‌شود. این پایه را به‌صورت زیر خواهیم نوشت

$$\{|1 : n, l; 2 : n', l'; L, M_L\} \otimes \{|S, M_S\} \quad (12)$$

با

$$\begin{cases} L = l + l', l + l' - 1, \dots, |l - l'| \\ S = 1, 0 \end{cases} \quad (13)$$

چون $\mathbf{L}^2, \mathbf{L}_z, \mathbf{S}^2, S_z$ همگی عملگرهای مقارن هستند (یعنی، با P_{21} جابه‌جاپذیرند)، بردارهای (12) ، بعد از پادمقارن‌سازی، ویژه‌بردارهای $\mathbf{L}^2, \mathbf{L}_z, \mathbf{S}^2, S_z$ با همان ویژه‌مقدارها باقی می‌مانند (البته، بعضی از آنها ممکن است دارای یک تصویر صفر بر روی \mathcal{E}_A باشند، که در این مورد حالت‌های فیزیکی متناظر توسط اصل پاؤلی طرد می‌شوند، بخش ۱۴-۲-۲-ب-۲ زیر را ببینید). بنابراین، کتهای ناصفری که با پادمقارن‌سازی (12) به‌دست می‌آیند متعامدند، زیرا با ویژه‌مقدارهای متفاوت حداقل یکی از چهار مشاهده‌پذیر مورد نظر، متناظر هستند. چون این کتهای $\mathcal{E}(n, l; n', l')$ را تولید می‌کنند، یک پایه راست‌هنجار این زیرفضا را تشکیل می‌دهند. که آن را به‌صورت زیر می‌نویسیم

$$\{|n, l; n', l'; L, M_L; S, M_S\} \quad (14)$$

۱. همچنین می‌توانستیم از زیرفضای $\mathcal{E}_{n, l}(2) \otimes \mathcal{E}_{n', l'}(1)$ شروع کنیم [مکمل ۱ از بخش ۱۴-۲-۲-ج از فصل ۱۴ صفحه ۲۲۸].

$$|n, l; n', l'; L, M_L; S, M_S\rangle \\ = c(\lambda - P_{\gamma})\{|\lambda; n, l; \gamma; n', l'; L, M_L\rangle \otimes |S, M_S\rangle\} \quad (15)$$

که در آن c یک ضریب ثابت بهنجارش است. بنابراین، L_z, L^2, S_z, S^2 یک همکس-ج در داخل $\mathcal{E}(n, l; n', l')$ تشکیل می‌دهند. اکنون عملگر جایگشت $P_{\gamma}^{(S)}$ را در فضای حالت اسپین معرفی می‌کنیم:

$$P_{\gamma}^{(S)}|\lambda; \varepsilon; \gamma; \varepsilon'\rangle = |\lambda; \varepsilon'; \gamma; \varepsilon\rangle \quad (16)$$

در بخش ۱-۲-۲ از فصل ۱۰ [یادداشت ۲] نشان دادیم که

$$P_{\gamma}^{(S)}|S, M_S\rangle = (-1)^{S+1}|S, M_S\rangle \quad (17)$$

به‌علاوه، اگر عملگر جایگشت در فضای حالت متغیرهای مداری باشد، داریم

$$P_{\gamma} = P_{\gamma}^{(*)} \otimes P_{\gamma}^{(S)} \quad (18)$$

با استفاده از (۱۷) و (۱۸)، بالاخره می‌توانیم (۱۵) را به صورت زیر بنویسیم

$$|n, l; n', l'; L, M_L; S, M_S\rangle \\ = c\{[\lambda - (-1)^{S+1}P_{\gamma}^{(*)}][|\lambda; n, l; \gamma; n', l'; L, M_L\rangle\} \otimes |S, M_S\rangle \quad (19)$$

۲. قیدهای ناشی از اصل موضوع متقارن‌سازی

دیدیم که بُعد $\mathcal{E}(n, l; n', l')$ همیشه برابر با $(2l' + 1)(2l + 1)$ ، یعنی، برابر یا بُعد $\mathcal{E}_{n', l'}(2) \otimes \mathcal{E}_{n, l}(1)$ نیست. بنابراین، بعضی از کتهای $\mathcal{E}_{n, l}(1) \otimes \mathcal{E}_{n', l'}(2)$ می‌توانند دارای تصویر صفر در $\mathcal{E}(n, l; n', l')$ باشند. مطالعه نتایج پایه (۱۴) از این قید، که توسط اصل متقارن‌سازی اعمال می‌شود، جالب توجه است.

ابتدا فرض می‌کنیم که دو الکترون یک پوسته را اشغال نکنند. در این صورت به راحتی می‌بینیم که قسمت مداری (۱۹) برابر با مجموع یا تفاضل دو کت متعامد است، و در نتیجه هرگز صفر

نمی‌شود.^۱ چون همین مطلب برای $|S, M_S\rangle$ نیز صادق است، می‌بینیم که تمام مقادیر ممکن L و S [فرمول (۱۳)] مجازند. به عنوان مثال، برای پیکربندی $1s, 2s$ ، می‌توانیم داشته باشیم $S = 0$ ، $L = 0$ و $S = 1$ ، $L = 0$ ؛ برای پیکربندی $1s, 2p$ داریم $S = 0$ ، $L = 1$ ، $S = 1$ و $L = 1$ ، و به همین ترتیب.

حال اگر فرض کنیم که دو الکترون یک پوسته را اشغال کنند، داریم $n = n'$ و $l = l'$ و بعضی از کتهای (۱۹) می‌توانند صفر باشند. حال، $(\lambda : n, l; \lambda' : n', l'; L, M_L)$ را به صورت زیر می‌نویسیم

$$|\lambda : n, l; \lambda' : n', l'; L, M_L\rangle = \sum_m \sum_{m'} (l, l'; m, m' | L, M_L | \lambda : n, l, m; \lambda' : n', l', m') \quad (20)$$

بنابر رابطه (۲۵) از مکمل ۲ فصل ۱۰ داریم

$$\langle l, l'; m, m' | L, M_L \rangle \equiv (-1)^l \langle l, l'; m'; m | L, M_L \rangle \quad (21)$$

سپس با استفاده از (۲۰)، به دست می‌آوریم

$$P_{\lambda\lambda'}^{(0)} |\lambda : n, l; \lambda' : n', l'; L, M_L\rangle = (-1)^L |\lambda : n, l; \lambda' : n', l'; L, M_L\rangle \quad (22)$$

با قرار دادن این نتیجه در (۱۹)، داریم^۲

$$|n, l; n, l; L, M_L; S, M_S\rangle \equiv \begin{cases} 0 & \text{اگر } L + S \text{ فرد باشد} \\ |\lambda : n, l; \lambda' : n, l; L, M_L\rangle \odot |S, M_S\rangle & \text{اگر } L + S \text{ زوج باشد} \end{cases} \quad (23)$$

بنابراین، L و S نمی‌توانند اختیاری باشند. $L + S$ باید زوج باشد. بخصوص، برای پیکربندی $1s^2$ ، باید داشته باشیم $L = 0$ ، لذا $S = 1$ ظرد می‌شود. این همان نتیجه‌ای است که قبلاً پیدا کردیم.

سرانجام، توجه کنید که اصل موضوع متقارن‌سازی، یک همبستگی نزدیک بین تقارن قسمت مداری و قسمت اسپینی کت فیزیکی (۱۹) تولید می‌کند. چون کت کل باید پادمقارن باشد، و

۱. در این صورت، ثابت بهنجارش c برابر است با $1/\sqrt{2}$.

۲. در این صورت ثابت بهنجارش برابر $1/2$ است.

پیکربندی $1s, 2s$ مطالعه خواهیم کرد. سعی خواهیم کرد بفهمیم که چرا دو جمله $1s$ و $2s$ که از این پیکربندی حاصل می‌شوند، و مقادیر اسپین کل آنها متفاوت است، و با اینکه هامیلتونی اصلی به‌طور خالص الکتروستاتیک است، دارای انرژیهای متفاوت هستند.

ج) بحث

۱. انرژیهای جملات طیفی ناشی از پیکربندی $1s, 2s$

در پیکربندی $1s, 2s$ داریم: $l = l' = L = 0$. در این صورت، به راحتی از (۲۰) به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} & |1 : n = 1, l = 0; 2 : n' = 2, l' = 0; L = M_L = 0\rangle = \\ & |1 : n = 1, l = m = 0; 2 : n' = 2, l' = m' = 0\rangle \end{aligned} \quad (25)$$

که برداری است که آن را به‌صورت ساده‌تر $|1 : 1s; 2 : 2s\rangle$ خواهیم نوشت. اگر $|2S, M_S\rangle$ و $|1S, 0\rangle$ معرف حالت‌های متناظر با دو جمله طیفی $1S$ و $2S$ ناشی از پیکربندی $1s, 2s$ باشند، با قرار دادن (۲۵) در (۱۹) خواهیم داشت

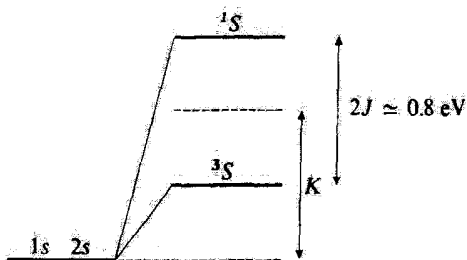
$$\begin{cases} |2S, M_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[(1 - P_{11}^{(+)}) |1 : 1s; 2 : 2s\rangle \right] \otimes |S = 1, M_S\rangle & \text{(الف-۲۶)} \\ |1S, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[(1 + P_{11}^{(+)}) |1 : 1s; 2 : 2s\rangle \right] \otimes |S = 0, M_S = 0\rangle & \text{(ب-۲۶)} \end{cases}$$

چون W بر روی متغیرهای اسپینی عمل نمی‌کند، ویژه‌مقدارهایی که توسط (۲۶) داده می‌شوند را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned} \delta(2S) &= \frac{1}{2} \langle 1 : 1s; 2 : 2s | (1 - P_{11}^{(+)}) W (1 - P_{11}^{(+)}) | 1 : 1s; 2 : 2s \rangle & \text{(الف-۲۷)} \\ \delta(1S) &= \frac{1}{2} \langle 1 : 1s; 2 : 2s | (1 + P_{11}^{(+)}) W (1 + P_{11}^{(+)}) | 1 : 1s; 2 : 2s \rangle & \text{(ب-۲۷)} \end{aligned}$$

(از این واقعیت استفاده کرده‌ایم که $P_{11}^{(+)}$ هرمیتی است). علاوه بر این، $P_{11}^{(+)}$ با W جابه‌جاپذیر است، و مربع $P_{11}^{(+)}$ یک عملگر همانی است. بنابراین

$$\left(1 \pm P_{11}^{(+)} \right) W \left(1 \pm P_{11}^{(+)} \right) = \left(1 \pm P_{11}^{(+)} \right)^2 W = 2 \left(1 \pm P_{11}^{(+)} \right) W \quad (28)$$



شکل ۲ مکان نسبی جمله‌های طیفی 1S و 2S ناشی از پیگر بندی $1s, 2s$ در اتم هالیم. K معرف یک انتقال کلی پیگر بندی است. رفع واگتی متناسب با انتگرال مبادله J است.

سرا انجام، داریم

$$\begin{cases} \delta(^2S) = K - J & (۲۹-الف) \\ \delta(^1S) = K + J & (۲۹-ب) \end{cases}$$

یا

$$K = \langle \uparrow : 1s; \uparrow : 2s | W | \uparrow : 1s; \uparrow : 2s \rangle \quad (۳۰)$$

$$\begin{aligned} J &= \langle \uparrow : 1s; \uparrow : 2s | P_{11}^{(2)} W | \uparrow : 1s; \uparrow : 2s \rangle \\ &= \langle \uparrow : 2s; \uparrow : 1s | W | \uparrow : 1s; \uparrow : 2s \rangle \end{aligned} \quad (۳۱)$$

بنابراین، K معرف یک انتقال کلی انرژی دو جمله است و سهمی در فاصله جدایی آنها ندارد. اما J جالبتر است زیرا یک اختلاف انرژی بین جملات 1S و 2S وارد می‌کند (شکل ۲). از این رو، آن را به‌طور مفصلتری مطالعه خواهیم کرد.

۲. انتگرال تبادل

وقتی برای W عبارت (۳) را در (۳۱) قرار می‌دهیم، عبارتهایی به‌صورت زیر ظاهر می‌شوند

$$\begin{aligned} &\langle \uparrow : 2s; \uparrow : 1s | V_c(R_{12}) | \uparrow : 1s; \uparrow : 2s \rangle \\ &= \langle \uparrow : 2s | V_c(R_{12}) | \uparrow : 1s \rangle \langle \uparrow : 1s | \uparrow : 2s \rangle \end{aligned} \quad (۳۲)$$

اکنون، حاصلضرب نرده‌ای دو حالت متعامد $\langle 2 : 1s \rangle$ و $\langle 2 : 2s \rangle$ صفر است. پس، عبارت (۳۲) مسای صفر است. استدلالی از این نوع نشان می‌دهد که جملاتی که از عملگرهای $V_c(R_1), -2e^2/R_1, -2e^2/R_2$ نتیجه می‌شوند نیز صفرند، زیرا هر کدام از این عملگرها فقط در فضاهای تک‌الکترونی عمل می‌کنند، در صورتی که حالت دو الکترونی در کت و برای (۳۱) متفاوت است. بالاخره، آنچه که باقی می‌ماند عبارت است از

$$J = \langle 1 : 2s; 2 : 1s \left| \frac{e^2}{|R_1 - R_2|} \right| 1 : 1s; 2 : 2s \rangle \quad (33)$$

بنابراین، J شامل فقط دافعه الکتروستاتیکی بین الکترون‌هاست.

فرض کنید $\varphi_{n,l,m}(\mathbf{r})$ توابع موج وابسته به حالت‌های $|n, l, m\rangle$ باشند (حالت‌های مانای یک الکترون در پتانسیل مرکزی V_c)

$$\varphi_{n,l,m}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | n, l, m \rangle \quad (34)$$

در نمایش $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ ، محاسبه J از رابطه (۳۳) می‌دهد

$$J = \int d^3r_1 \int d^3r_2 \varphi_{2,0,0}^*(\mathbf{r}_1) \varphi_{1,0,0}^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \varphi_{1,0,0}(\mathbf{r}_1) \varphi_{2,0,0}(\mathbf{r}_2) \quad (35)$$

این انتگرال را "انتگرال تبادل" می‌نامند. در اینجا، ما آن را به‌طور صریح محاسبه نمی‌کنیم، اما متذکر می‌شویم که مثبت است.

۳. منشأ فیزیکی اختلاف انرژی بین دو جمله طیفی

از عبارتهای (۲۶) و (۲۷) مشاهده می‌کنیم که منشأ اختلاف انرژی جملات 1S و 3S ، در اختلافهای تقارنی قسمتهای مداری این جملات نهفته است. همان‌طور که در انتهای بخش ۲-الف تأکید کردیم، یک جمله سه‌تایی ($S = 1$) باید دارای یک قسمت مداری باشد که تحت اثر تبادل دو الکترون، پادمتقارن است. از این‌رو، در (۲۶-الف) و (۲۷-الف) یک علامت منفی قبل از $P_1^{(0)}$ ظاهر می‌شود. از طرف دیگر، یک جمله تک‌تایی ($S = 0$) باید دارای یک قسمت مداری متقارن باشد [علامت + در (۲۶-ب) و (۲۷-ب)].

این مطلب، مکان نسبی جملات 1S و 3S را که در شکل ۲ نشان داده‌ایم، توجیه می‌کند. برای جمله تک‌تایی، تابع موج مداری نسبت به تبادل دو الکترون متقارن است، که در این صورت، یک احتمال غیر صفر برای اینکه دو الکترون در یک نقطه از فضا باشند وجود دارد. به همین دلیل،

دافعه الکتروستاتیکی، با انرژی e^2/r_{12} ، که وقتی الکترونها به هم نزدیک‌اند مقدار آن زیاد است، انرژی حالت تک‌تایی را به طور قابل توجهی افزایش می‌دهد. از طرف دیگر، برای حالت سه‌تایی، تابع مداری نسبت به تبادل دو الکترون پادمقارن است. که در این صورت احتمال اینکه دو الکترون در یک نقطه از فضا باشند، صفر خواهد بود. به این ترتیب، مقدار متوسط دافعه الکتروستاتیکی کوچکتر است. بنابراین، اختلاف بین حالت‌های تک‌تایی و سه‌تایی از این واقعیت ناشی می‌شود که همبستگی‌های بین متغیرهای مداری دو الکترون، به علت اصل موضوع مقارن‌سازی، به مقدار اسپین کل بستگی دارد.

۴. بررسی نقش اصل موضوع مقارن‌سازی

در این مرحله از بحث، ممکن است تصور شود که واگنی یک پیکربندی توسط اصل موضوع مقارن‌سازی از بین می‌رود. نشان خواهیم داد^۱ که این تصور درست نیست. این اصل موضوع، صرفاً مقدار اسپین کل جملات ناشی از یک پیکربندی مفروض را مشخص می‌سازد (به خاطر دافعه الکتروستاتیکی بین الکترونی).

برای درک این مطلب، فرض کنید که احتیاجی به اعمال اصل موضوع مقارن‌سازی نداشته باشیم. به عنوان مثال، فرض کنید که دو الکترون را با دو ذره (البته مجازی) که جرم، بار و اسپین آنها با الکترون یکسان است ولی دارای خاصیت ذاتی دیگری هستند که تمیز دادن آنها را از یکدیگر برای ما ممکن سازد، جانشین سازیم [بدون اینکه هامیلتونی H مسئله را که باز هم با فرمول (۱) داده می‌شود تغییر دهیم]. چون H به اسپین بستگی ندارد و مجبور نیستیم که اصل موضوع مقارن‌سازی را اعمال کنیم، می‌توانیم تا مرحله آخر محاسبات کلاً از اسپینها صرف نظر، و سپس واگنهایی را که به دست می‌آوریم در ۴ ضرب کنیم. از لحاظ مداری، تراز انرژی H با پیکربندی $1s, 2s$ دو بار واگن متناظر است زیرا دو حالت متعامد $(1s; 2s; 1)$ و $(1s; 2s; 2)$ با آن متناظرند. (اینها، حالت‌های فیزیکی متفاوتی هستند زیرا طبیعت‌های دو ذره، متفاوت‌اند). برای مطالعه اثر W ، باید W را در فضای دوبعدی ناشی از این دو کت، قطری کنیم: ماتریس نظیر را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\begin{pmatrix} K & J \\ J & K \end{pmatrix} \quad (36)$$

که در آن J و K توسط (۳۰) و (۳۱) داده می‌شوند [دو عضو قطری (۳۶) برابر یکدیگرند زیرا W تحت جایگشت دو ذره ناورداست]. ماتریس (۳۶) را می‌توانیم بلافاصله قطری کنیم.

۱. همچنین یادداشت ۱ (بخش ۱۴-۳-۴-الف-۱) از فصل ۱۴ صفحه ۲۴۰ را ببینید.

ویژه‌مقدارهایی که پیدا می‌کنیم عبارت‌اند از $K + J$ و $K - J$ ، که به ترتیب به ترکیبات خطی متقارن و پادمقارن دوکت $\{2s; 2; 1s; 1\}$ و $\{2s; 2; 1s; 1\}$ وابسته‌اند. این واقعیت که این ویژه‌حالت‌های مداری دارای تقارنهای خوش‌تعریف نسبت به مبادله دو ذره هستند هیچ ربطی به اصل پاؤلی ندارد، بلکه فقط ناشی از این حقیقت است که W با $P_{11}^{(0)}$ جابه‌جاپذیر است (از این رو ویژه‌حالت‌های مشترک W و $P_{11}^{(0)}$ می‌توانند پیدا شوند).

وقتی دو ذره یکسان نباشند، همان ترتیب لایه‌ها و همان تقارن مداری قبل را به دست می‌آوریم. از طرف دیگر، واگنی ترازها به‌وضوح، متفاوت است: تراز پایتتر، با انرژی $K - J$ می‌تواند دارای اسپین کل $S = 0$ یا $S = 1$ باشد، همین‌طور تراز بالاتر.

حال، اگر به اتم هلیم حقیقی برگردیم، نقشی را که اصل پاؤلی ایفا کرده است، به خوبی مشاهده می‌کنیم. این اصل، عامل شکافتگی تراز اولیه $1s, 2s$ به دو تراز انرژی $K + J$ و $K - J$ نیست، زیرا این شکافتگی می‌تواند برای دو ذره متفاوت نیز ظاهر شود. همچنین، ویژگی متقارن یا پادمقارن قسمت مداری ویژه‌بردارها به ناوردایی برهم‌کنش الکتروستاتیکی، تحت اثر جایگشت دو الکترون، مربوط است. اصل پاؤلی صرفاً حالت پایتتر را از داشتن اسپین کل $S = 0$ و حالت بالاتر را از داشتن اسپین $S = 1$ باز می‌دارد، زیرا، در غیر این صورت، حالت‌های متناظر در واقع به‌طور کلی متقارن می‌شوند، که برای فرمیونها غیرقابل قبول است.

۵. هامیلتونی موثر وابسته به اسپین W را با عملگر زیر جایگزین می‌کنیم

$$\tilde{W} = \alpha + \beta S_1 \cdot S_2 \quad (37)$$

که در آن S_1 و S_2 معرف اسپین‌های دو الکترون‌اند. همچنین داریم

$$\tilde{W} = \alpha - \frac{3\beta\hbar^2}{4} + \frac{\beta}{4} S^2 \quad (38)$$

به طوری که ویژه‌حالت‌های \tilde{W} ، عبارت‌اند از حالت‌های سه‌تایی، با ویژه‌مقدار $\alpha + \beta\hbar^2/4$ ، و حالت تک‌تایی با ویژه‌مقدار $\alpha - 3\beta\hbar^2/4$. بنابراین، اگر قرار دهیم

$$\begin{cases} \alpha = K - \frac{J}{2} \\ \beta = -\frac{2J}{\hbar^2} \end{cases} \quad (39)$$

با قطری کردن \bar{W} ، همان ویژه‌حالتها و ویژه‌مقدارهایی که در بالا پیدا کردیم را به دست می‌آوریم. در این صورت می‌توان چنین تصور کرد که اختلال عامل پیدایش عبارتها، \bar{W} بوده است (هامیلتونی "مؤثر")، که به همان شکل برهم‌کنش مغناطیسی بین دو اسپین است. اما نباید نتیجه گرفت که انرژی جفت‌شدگی بین الکترونها، که عامل پیدایش دو جمله است، منشأ مغناطیسی دارد: اگر دو گشتاور مغناطیسی برابر با گشتاور الکترون را به فاصله‌ای حدود 1 \AA از یکدیگر قرار دهیم، انرژی برهم‌کنشی آنها خیلی کوچکتر از J خواهد بود. ولی، به علت شکل بسیار ساده \bar{W} ، این هامیلتونی مؤثر را اغلب به جای \bar{W} به کار می‌بریم.

وضعیت مشابهی در بررسی مواد فرومغناطیسی بروز می‌کند. در این موارد، اسپینهای الکترونی تمایل دارند به موازات یکدیگر قرار گیرند. چون در این صورت حالت اسپین کاملاً متقارن است، اصل پاولی ایجاب می‌کند که حالت مداری کاملاً پادمقارن باشد. در این صورت، به همان دلایلی که برای اتم هلیوم گفتیم، انرژی دافعه الکترونی کمینه است. هنگام مطالعه این پدیده‌ها، اغلب از هامیلتونیهای مؤثر نوع (۳۷) استفاده می‌کنیم. با این همه، لازم به ذکر است که برهم‌کنش فیزیکی منشأ جفت‌شدگی، باز هم الکتروستاتیکی است و نه مغناطیسی.

یادداشتها:

۱. پیکربندی $2p, 1s$ را می‌توان به همین طریق بررسی کرد. در این صورت داریم $L = 1$ ، به طوری که $M_L = +1, 0, -1$. همانند پیکربندی $2s, 1s$ ، لایه‌هایی که توسط دو الکترون اشغال می‌شوند متفاوتند، به طوری که دو جمله 3P و 1P به طور همزمان وجود دارند. جمله اول 3P بار و جمله دوم 1P بار واگن است. مانند بالا، می‌توان نشان داد که جمله 3P دارای انرژی کمتری نسبت به جمله 1P است، و اختلاف بین دو انرژی متناسب است با یک انتگرال تبادل، که مشابه با انتگرال موجود در (۳۵) است. برای تمام پیکربندیهای دیگر از نوع $1s, n'l$ ، به همین روش می‌توان عمل کرد.

۲. \bar{W} را مانند یک اختلال H تلقی کرده‌ایم. برای اینکه این روش هم‌دوس باشد، باید انتقالهای انرژی وابسته به \bar{W} (به عنوان مثال، انتگرال تبادل موجود در (۳۵)) بسیار کمتر از اختلافهای انرژی بین پیکربندیها باشد. ولی این طور نیست. به عنوان مثال، ریزا پیکربندیهای $2s, 1s$ و $2p, 1s$ در حالی که اختلاف انرژی $\Delta E(1s = 2s)$ در پیکربندی $2s, 1s$ حدود 18 eV است، کمترین فاصله بین ترازها برابر 35 eV است. از این رو، ممکن است تصور کنیم که در نظر گرفتن \bar{W} به عنوان یک اختلال H ، معتبر نیست.

اما، روشی که ارائه داده‌ایم صحیح است. این امر ناشی از این حقیقت است که، برای تمام پیکربندیهای

۱. مسلماً باید فقط ویژه‌مقدارهای \bar{W} را که به H_0 تعلق دارند منظور کنیم.

از نوع $1s, n'l$ داریم $L = l$. بنابراین، W که بر طبق (10) ، با I جایه جایپذیر است دارای عناصر ماتریسی صفر بین حالت‌های پیکربندی $1s, 2s$ و $1s, 2p$ است که با مقادیر متفاوت L متناظر است. W پیکربندی $1s, n'l'$ را فقط به پیکربندی‌هایی با انرژی‌های مشخصاً بالاتر، از نوع $1s, n''l''$ با $l'' = l'$ (فقط مقادیر n متفاوت‌اند) یا از نوع $nl, n''l''$ با n و n'' مخالف l (تکانه‌های زاویه‌ای l و l'' می‌توانند جمع شوند و l' را بدهند)، جفت می‌کند.

۳. ترازهای ساختار ریز؛ چندتابیها

تا کنون، فقط برهم‌کنش‌هایی را که صرفاً منشأ الکتروستاتیکی دارند در هامیلتونی منظور کرده و از تمام آثاری که منشأ نسبیتی و مغناطیسی دارند صرف‌نظر کرده‌ایم. در واقع، چنین آثاری وجود دارند، و ما آنها را قبلاً در مورد اتم هیدروژن مطالعه کردیم (فصل ۱۲، بخش ۱۴-۲-۱). در اتم هیدروژن، این آثار از تغییر جرم الکترون با سرعت، از جفت‌شدگی اسپین-مدار $I \cdot S$ ، و از جمله داروین ناشی می‌شوند. در هلیم، به علت حضور همزمان دو الکترون، مسئله پیچیده‌تر می‌شود. به‌عنوان مثال، یک جمله جفت‌شدگی مغناطیسی اسپین-اسپین در هامیلتونی وجود دارد (مکمل ۲ از فصل ۱۱) که هم در فضای حالت اسپین و هم در فضای حالت مداری دو الکترون عمل می‌کند.^۱ با وجود این، این واقعیت که اختلاف‌های انرژی وابسته به این جفت‌شدگیها، که منشأ نسبیتی و مغناطیسی دارند؛ از اختلاف‌های موجود بین دو جمله طیفی خیلی ضعیفتر است، باعث می‌شود که مسئله به‌طور قابل توجهی ساده شود. این امر ما را قادر می‌سازد که هامیلتونی متناظر را (هامیلتونی ساختار ریز) همانند یک اختلال در نظر بگیریم.

مطالعه مفصل ترازهای ساختار ریز هلیم در خارج از حوزه این مکمل است. ما در اینجا بحث خود را به توصیف تقارنهای مسئله و نشان دادن اینکه چگونه ترازهای مختلف انرژی را از هم تمیز دهیم، محدود خواهیم کرد؛ برای این کار، از این واقعیت استفاده می‌کنیم که هامیلتونی ساختار ریز H_{SF} تحت دوران همزمان تمام متغیرهای مداری و اسپینی ناورد است. این بدان معناست (مکمل ۲ از فصل ۶، بخش ۶-۶) که، اگر J ، معرف تکانه زاویه‌ای کل الکترونها باشد:

$$J = L + S \quad (40)$$

داریم

$$[H_{SF}, J] = 0 \quad (41)$$

۱. به‌عنوان مثال، برای عبارت صریح حملات مختلف ساختار ریز هامیلتونی (Breit Hamiltonian) به بخش ۶-۱۹ در Sobel'man مراجعه کنید.

از طرف دیگر، اگر دوران فقط بر متغیرهای مداری یا فقط بر روی اسپینها اعمال شود، هامیلتونی ساختار زیر تغییر می‌کند

$$[H_{SF}, L] = -[H_{SF}, S] \neq 0 \quad (42)$$

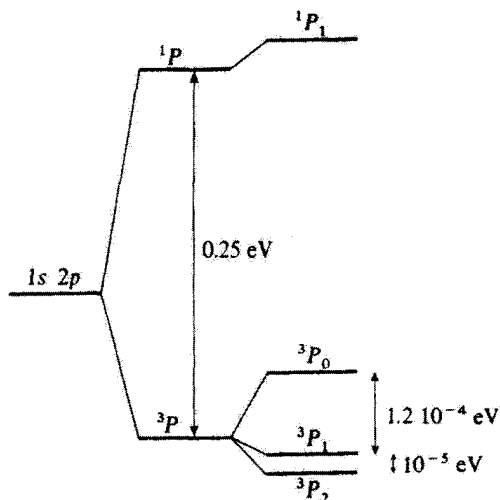
این خواص را می‌توان به سهولت، به‌عنوان مثال، برای عملگرهای $\sum_i \xi(r_i) L_i \cdot S_i$ یا برای هامیلتونی برهم‌کنش مغناطیسی دوقطبی-دوقطبی (مکمل ۲ از فصل ۱۱) مشاهده کرد. فضای حالت وابسته به یک جمله، توسط حالت‌های $(n, l; n', l'; L, M_L; S, M_S)$ رابطه (۱۹)، تولید می‌شود که در آن L و S ثابت‌اند، و

$$\begin{cases} -L \leq M_L \leq +L \\ -S \leq M_S \leq +S \end{cases} \quad (43)$$

در این زیرفضا، می‌توان نشان داد که J_z و J^2 تشکیل یک مک‌م-ج می‌دهند، که بر طبق رابطه (۴۱)، با H_{SF} جابه‌جاپذیر است. از این رو، ویژه‌بردارهای (J, M_J) مشترک بین J^2 [با ویژه‌مقدار $J(J+1)\hbar^2$] و J_z (با ویژه‌مقدار $M_J\hbar$) الزاماً ویژه‌بردارهای H_{SF} (با ویژه‌مقداری که به J بستگی دارد ولی مستقل از M_J است) خواهند بود. (این خاصیت اخیر، از این واقعیت ناشی می‌شود که H_{SF} با J_+ و J_- جابه‌جاپذیر است). بر طبق نظریه عمومی جمع‌بندی تکانه‌های زاویه‌ای، مقادیر ممکن J عبارت‌اند از

$$J = L + S, L + S - 1, L + S - 2, \dots, |L - S| \quad (44)$$

بنابراین، اثر H_{SF} برطرف کردن واگنی به‌طور جزئی است. بنابر رابطه (۴۴)، برای هر جمله، به همان تعدادی که برای J مقدار مختلف وجود دارد، تراز متمایز ظاهر می‌شود. هر یک از این ترازها، $(2J+1)$ بار واگن است و یک "چندتایی" نامیده می‌شود. نمادگذاری متداول طیف‌نمایی برای نمایش یک چندتایی، به این صورت است که یک شاخص پایین (برابر با مقدار J) در سمت راست نمادی که معرف جمله‌ای است که چندتایی از آن حاصل می‌شود، بنویسیم. به‌عنوان مثال، حالت پایه اتم هلیوم، یک چندتایی منفرد، 1S_0 می‌دهد. همچنین، هر یک از جملات 1S_0 و 3S_1 می‌گیرند 2S_1 ، 3S_1 ، 3P_0 ، 3P_1 ، 3P_2 ، به یک یا چندتایی منفرد منتهی می‌شود؛ به ترتیب، 1S_0 و 3S_1 از طرف دیگر، جمله 3P_0 که از 3P_1 حاصل می‌شود، سه چندتایی 3P_0 ، 3P_1 ، 3P_2 می‌دهد (شکل ۳)، و به همین ترتیب. لازم به ذکر است که اندازه‌گیری و محاسبه نظری ساختار ریز تراز 3P_0 پیچیده‌تر است.



شکل ۳ مکان نسبی جملات طیفی و چندتاییهای حاصل از پیکربندیهای $1s, 2p$ اتم هلیم (برای واضحتر کردن شکل، شکافتگی بین سه چندتایی $^3P_0, ^3P_1, ^3P_2$ بزرگتر نشان داده‌ایم).

$1s, 2p$ حائز اهمیت فراوانی است، زیرا می‌تواند به اطلاعات بسیار دقیقی از "ثابت ساختار ریز"، $\alpha = e^2/\hbar c$ ، منجر شود.

یادداشتها:

۱. برای بسیاری از اتمها، هامیلتونی ساختار ریز اساساً با رابطه زیر داده می‌شود

$$H_{SF} \simeq \sum_{i=1}^N \xi(R_i) \mathbf{L}_i \cdot \mathbf{S}_i \quad (45)$$

که در آن $\mathbf{R}_i, \mathbf{L}_i, \mathbf{S}_i$ معرف، مکانها، تکانه‌های زاویه‌ای و اسپینهای هر یک از N الکترون هستند. در این صورت، می‌توان با استفاده از قضیهٔ ویگنر-اکارت (مکمل ۴ از فصل ۱۰ را ببینید) نشان داد که انرژی چندتایی J متناسب است با $J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)$. این نتیجه را گاهی "قاعدهٔ بازه‌های لانده" می‌نامند.

برای هلیم، ترازهای 2P_1 و 2P_2 حاصل از پیکربندی $1s, 2p$ بسیار نزدیکتر از آن هستند که این قاعده پیش‌بینی می‌کند. این امر از اهمیت جفت‌شدگی مغناطیسی-دوقطبی-دوقطبی اسپینهای دو الکترون ناشی می‌شود.

۲. در این مکمل، از اثرهای "فوق ریز" مربوط به اسپین هسته‌ای (فصل ۱۲، بخش ۱۲-۲) صرف‌نظر کرده‌ایم. در واقع، این اثرها فقط برای ایزوتوپ ^3He وجود دارند، که هستهٔ آن دارای اسپین

$I = 1/2$ است (هسته ایزوتوپ ${}^4\text{He}$ دارای اسپین صفر است). هر چندتایی از تکانه زاویه‌ای الکترونی J ، در مورد ${}^4\text{He}$ ، به دو تراز فوق ریز با تکانه زاویه‌ای کل $F = J \pm 1/2$ شکافته می‌شود که $(2F + 1)$ -بار واگن است (مگر اینکه، البته، $J = 0$). ■

مراجع برای مطالعه بیشتر

Kuhn (11.1), chap. III-B; Slater (11.8), chap. 18; Bethe and Salpeter (11.10).

Multiplet theory and the Pauli principle: Landau and Lifshitz (1.19), §§64 and 65; Slater (1.6), chap. 7 and (11.8), chap. 13; Kuhn (11.1), chap. V, §A; Sobel'man (11.12), chap. 2, §5.3.

خواص فیزیکی یک گاز الکترون. کاربرد در جامدات

۱. الکترونهاى آزاد محبوس در یک "جعبه"

(الف) حالت پایه یک گاز الکترون؛ انرژی فرمی E_F

(ب) اهمیت الکترونهاى با انرژیهای نزدیک به E_F

(ج) شرایط مرزی تناوبی

۲. الکترونها در جامدات

(الف) نوارهای مجاز

(ب) مکان تراز فرمی و رسانندگی الکتريکی

در مکملهای ۱ و ۲ از فصل ۱۴، با در نظر گرفتن اصل موضوع متقارن سازی، ترازهای انرژی تعداد معدودی الکترون مستقل را که در یک پتانسیل مرکزی قرار داشتند، مطالعه کردیم (مدل لایه‌ای اتمهای چندالکترونی). حال، سیستمهایی را در نظر می‌گیریم که از تعداد بسیار زیادتری الکترون تشکیل شده‌اند، و نشان خواهیم داد که چگونه اصل طرد پاولی به همان میزان اثر نمایانی بر رفتار آنها دارد.

برای ساده کردن بحث، از برهم‌کنشهای بین الکترونها صرف‌نظر خواهیم کرد. به علاوه، ابتدا (بخش ۱ از مکمل ۳ از فصل ۱۴) فرض خواهیم کرد که این الکترونها تحت تأثیر هیچ پتانسیل خارجی به جز پتانسیلی که آنها را به یک حجم مفروض محدود می‌سازد و فقط در نواحی خیلی نزدیک به مرز مؤثر است قرار ندارند (یک گاز الکترون آزاد محبوس در یک "جعبه"). مفهوم مهم انرژی فرمی E_F ، را که فقط به تعداد الکترونها در واحد حجم بستگی دارد، معرفی خواهیم کرد. همچنین نشان خواهیم داد که خواص فیزیکی گاز الکترون (گرمای ویژه، خودگیری مغناطیسی، ...) اساساً توسط الکترونهاى که انرژی آنها نزدیک به E_F است تعیین می‌شود.

مدل الکترون آزاد، خواص اصلی بعضی از فلزها را به‌طور نسبتاً خوبی توصیف می‌کند. ولی الکترونهاى یک جامد، در واقع تحت تأثیر یک پتانسیل تناوبی که به وسیله یونهای بلور ایجاد می‌شود، قرار دارند. می‌دانیم که در این صورت ترازهای انرژی هر الکترون به نوارهای انرژی مجاز که توسط نوارهای ممنوع از یکدیگر جدا شده‌اند، دسته‌بندی می‌شوند (مکملهای ۶ از فصل ۱۱ را ببینید). در بخش ۲ از مکمل ۳ فصل ۱۴ به‌طور کیفی نشان خواهیم داد که رسانندگی الکتريکی یک جامد اساساً توسط مکان تراز فرمی سیستم الکترونی نسبت به نوارهای انرژی مجاز تعیین می‌شود. بسته به اینکه این مکان در کجا باشد، جسم جامد عایق یا یک رساناست.

۱. الکترونیهای آزاد محبوس در یک "جعبه"

(الف) حالت پایه یک گاز الکترون؛ انرژی فرمی E_F

یک سیستم متشکل از N الکترون را، که برهم‌کنشهای متقابل آنها صرف‌نظر خواهیم کرد، و علاوه بر این، تحت تأثیر هیچ پتانسیل خارجی قرار ندارند، در نظر بگیریم. اما، این الکترونها در جعبه‌ای که، برای سهولت، آن را به صورت یک مکعب با ابعاد L در نظر خواهیم گرفت، محبوس‌اند.

اگر الکترونها نتوانند از دیواره‌های جعبه عبور کنند به خاطر این است که دیواره‌ها عملاً سدهای پتانسیل نامتناهی تشکیل می‌دهند. چون انرژی پتانسیل الکترونها در داخل جعبه صفر است، مسئله به یک مسئله چاه مربعی نامتناهی سه‌بعدی تقلیل می‌یابد (مکملهای G از فصل ۲ و H از فصل ۱، جلد اول، کتاب فارسی را ببینید). حالت‌های مانای یک ذره در چنین چاهی به خوبی با توابع موج زیر توصیف می‌شوند

$$\varphi_{n_x, n_y, n_z}(\mathbf{r}) = \left(\frac{2}{L}\right)^{3/2} \sin\left(n_x \frac{\pi x}{L}\right) \sin\left(n_y \frac{\pi y}{L}\right) \sin\left(n_z \frac{\pi z}{L}\right) \quad (الف-۱)$$

$$n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots \quad (ب-۱)$$

[رابطه (الف-۱) به‌ازای $0 \leq x, y, z \leq L$ معتبر است. زیرا تابع موج در خارج از این ناحیه صفر است]. انرژی وابسته به φ_{n_x, n_y, n_z} برابر است با

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad (۲)$$

البته، اسپین الکترون را باید به حساب آوریم: هر یک از توابع موج (۱) قسمت فضایی دو حالت مانای متمایز را توصیف می‌کند که جهت اسپین آنها متفاوت است؛ این دو حالت به یک انرژی مربوط می‌شوند، زیرا هامیلتونی مسئله مستقل از اسپین است.

مجموعه این حالت‌های مانای یک پایه گسسته تشکیل می‌دهد، که به کمک آن می‌توانیم هر حالتی از یک الکترون محبوس در این جعبه (یعنی، الکترونی که تابع موج آن در دیواره‌ها صفر می‌شود) را بسازیم. توجه کنید که، با افزایش ابعاد جعبه، می‌توانیم فاصله بین انرژی‌های منفرد متوالی را تا هر اندازه که خواهیم کوچک کنیم، زیرا این فاصله به‌طور معکوس با L^2 متناسب است. بنابراین، اگر L به‌قدر کافی بزرگ باشد، عملاً نمی‌توانیم طیف گسسته (۲) را از یک طیف پیوسته که شامل تمام مقادیر مثبت انرژی است تمیز دهیم.

حالت پایه یک سیستم متشکل از N الکترون مستقل را می‌توان با پادمقارن کردن حاصلضرب تانسوری N حالت منفرد وابسته به پایینترین انرژی‌هایی که با اصل پاؤلی سازگارند، به‌دست آورد.

بنابراین، اگر N کوچک باشد، به سادگی می‌توان اولین ترازهای منفرد (۲) را بر کرد و حالت پایه سیستم، و همچنین درجه واگنی و کنتهای پادمقارن مربوط به آن را پیدا کرد. اما، وقتی N خیلی بزرگتر از ۱ باشد (در یک جامد ماکروسکوپیکی، N از مرتبه 10^{23} است)، این روش را نمی‌توان در عمل به‌کار برد و باید استدلال کلیتری را مورد استفاده قرار داد.

ابتدا، تعداد $n(E)$ حالت‌های مانای منفردی را که انرژی آنها از مقدار معین E پایینتر است تعیین خواهیم کرد. برای این منظور، رابطه (۲) برای انرژیهای ممکن را به‌صورت زیر خواهیم نوشت

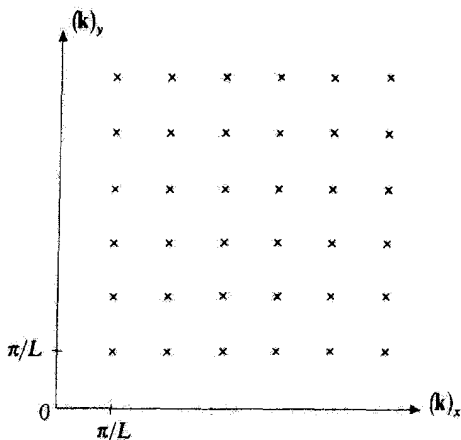
$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2}{2m_e} \mathbf{k}_{n_x, n_y, n_z}^2 \quad (3)$$

با

$$\begin{aligned} (\mathbf{k}_{n_x, n_y, n_z})_x &= n_x \frac{\pi}{L} \\ (\mathbf{k}_{n_x, n_y, n_z})_y &= n_y \frac{\pi}{L} \\ (\mathbf{k}_{n_x, n_y, n_z})_z &= n_z \frac{\pi}{L} \end{aligned} \quad (4)$$

بنابر رابطه (۱)، با هر تابع $\varphi_{n_x, n_y, n_z}(\mathbf{r})$ یک بردار $\mathbf{k}_{n_x, n_y, n_z}$ متناظر است. برعکس، با هر یک از این بردارها، یک و تنها یک تابع φ_{n_x, n_y, n_z} متناظر می‌شود. در این صورت تعداد حالت‌های $n(E)$ را می‌توان با ضرب کردن ۲ در تعداد بردارهای $\mathbf{k}_{n_x, n_y, n_z}$ که مدول آنها کوچکتر از $\sqrt{2m_e E/\hbar^2}$ است، به‌دست آورد (ضریب ۲، از وجود اسپین الکترون ناشی می‌شود). نوکهای بردارهای $\mathbf{k}_{n_x, n_y, n_z}$ فضای \mathbf{k} را به مکعبهای بنیادی به اضلاع π/L تقسیم می‌کنند (شکل ۱) که در آن برای سهولت، به جای یک فضای سه‌بعدی، یک فضای دوبعدی را نشان داده‌ایم ببینید). هر یک از این نوکها در هشت مکعب مجاور مشترک است، و هر مکعب دارای هشت رأس است. در نتیجه، اگر مکعبهای بنیادی به‌قدر کافی کوچک باشند (یعنی، اگر L به حد کافی بزرگ باشد)، می‌توان چنین فرض کرد که در عنصر حجم $(\pi/L)^3$ از فضای \mathbf{k} یک بردار $\mathbf{k}_{n_x, n_y, n_z}$ وجود دارد.

مقدار انرژی E انتخابی، در فضای \mathbf{k} ، کره‌ای به مرکز مبدأ و شعاع $\sqrt{2m_e E/\hbar^2}$ را مشخص می‌کند. ولی فقط یک هشتم حجم این کره را باید منظور کنیم، زیرا مؤلفه‌های \mathbf{k} مثبت‌اند [(۱-ب) و (۴) را ببینید]. اگر این حجم را بر عنصر حجم $(\pi/L)^3$ وابسته به هر حالت مانا



شکل ۱ نوکهای بردارهای k_{n_x, n_y} که توابع موج مانا را در یک چاه مربعی نامتناهی دویعدی مشخص می‌کنند.

تقسیم کنیم، و اگر ضریب ۲ی مربوط به اسپین را به حساب آوریم، خواهیم داشت

$$n(E) = 2 \frac{1}{8} \frac{4}{3} \pi \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} E \right)^{3/2} \frac{1}{\left(\frac{\pi}{L} \right)^3} = \frac{L^3}{3\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} E \right)^{3/2} \quad (5)$$

با استفاده از این نتیجه می‌توانیم بلافاصله انرژی منفرد بیشینه یک الکترون را در حالت پایه سیستم، یعنی، انرژی فرمی E_F گاز الکترون را محاسبه کنیم. این انرژی E_F در رابطه زیر صدق می‌کند

$$n(E_F) = N \quad (6)$$

که می‌دهد

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(3\pi^2 \frac{N}{L^3} \right)^{2/3} \quad (7)$$

توجه کنید که، همان‌گونه که انتظار می‌رود، انرژی فرمی فقط به تعداد الکترونها در واحد حجم، N/L^3 ، بستگی دارد. در صفر مطلق، تمام حالت‌های منفردی که انرژی آنها کمتر از E_F است

اشغال، و تمام آنهایی که انرژی‌شان بزرگتر از E_F است خالی خواهند بود. در بخش ۱-ب خواهیم دید که در دماهای غیر صفر چه اتفاقی می‌افتد.

همچنین می‌توانیم از (δ) ، چگالی حالتها، $\rho(E)$ ، را نتیجه‌گیری کنیم. $\rho(E) dE$ بنا به تعریف، عبارت است از تعداد حالتهایی که انرژیهای آنها بین E و $E + dE$ قرار دارند. همان‌طور که بعداً خواهیم دید، این چگالی حالت، اهمیت فیزیکی قابل ملاحظه‌ای دارد. چگالی انرژی را می‌توان به سادگی از مشتق گرفتن $n(E)$ نسبت به E ، به دست آورد

$$\rho(E) = \frac{dn(E)}{dE} = \frac{L^3}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2} \quad (8)$$

بنابراین، $\rho(E)$ با \sqrt{E} متناسب است. در صفر مطلق، تعداد الکترونها با یک انرژی مفروض بین E و $E + dE$ (البته، کمتر از E_F) برابر است با $\rho(E) dE$. با به کار بردن مقدار (V) برای انرژی فرمی E_F ، $\rho(E)$ را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\rho(E) = \frac{3}{2} N \frac{E^{1/2}}{E_F^{3/2}} \quad (9)$$

یادداشت:

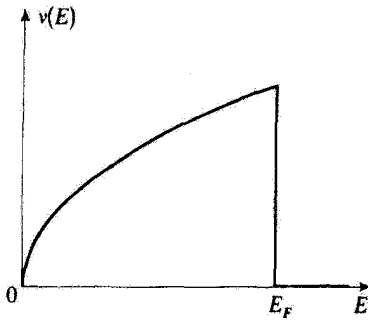
از رابطه (δ) می‌توان دید که ابعاد جعبه فقط از طریق عنصر حجم $(\pi/L)^3$ ، که در فضای k ، به هر حالت مانا وابسته است، دخالت دارند. اگر به جای یک جعبه مکعبی به اضلاع L ، یک متوازی‌السطوح به اضلاع L_1, L_2, L_3 انتخاب کرده بودیم، یک عنصر حجم $\pi^3/L_1 L_2 L_3$ به دست می‌آوردیم؛ بنابراین فقط حجم $L_1 L_2 L_3$ جعبه، در چگالی حالتها وادار می‌شود. می‌توان نشان داد که، شکل دقیق جعبه هر چه باشد، به شرط اینکه به قدر کافی بزرگ باشد، این نتیجه معتبر است. ■

ب) اهمیت الکترونها با انرژیهای نزدیک به E_F

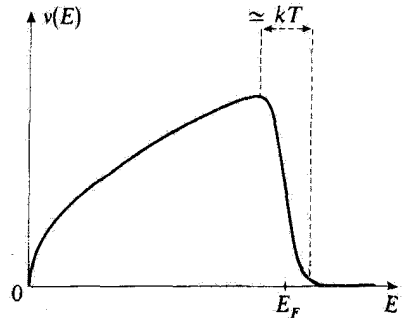
با استفاده از نتایج به دست آمده در بخش قبل، می‌توان به خواص فیزیکی یک گاز الکترون آزاد پی برد. در اینجا دو مثال ساده ارائه خواهیم کرد. یکی گرمای ویژه و دیگری خودگیری مغناطیسی سیستم. با این همه، مطالعه خود را به بحثهای نیمه‌کمی که به سادگی اهمیت اساسی اصل طرد پازلی را نشان می‌دهند، محدود خواهیم ساخت.

۱. گرمای ویژه

در صفر مطلق، گاز الکترون در حالت پایه‌اش قرار دارد: تمام ترازهای منفرد با انرژی کمتر از E_F اشغال می‌شوند و تمام ترازهای دیگر خالی می‌مانند. با در نظر داشتن صورت (8) از چگالی حالتهای



(الف)



(ب)

شکل ۲ تغییرات $\nu(E)$ نسبت به E عبارت است از تعداد الکترونها با انرژی بین E و $E + dE$. در صفر مطلق، تمام ترازهایی که انرژی شان کمتر از انرژی فرمی E_F است اشغال شده اند (شکل الف). در دمای قدری بالاتر T ، گذار بین ترازهای خالی و اشغال شده، در یک بازه انرژی چند kT (شکل ب) اتفاق می افتد.

می توانیم وضعیت را به طور طرح وار همانند شکل (۲-الف) نشان دهیم: تعداد $\nu(E) dE$ الکترونها با انرژی بین E و $E + dE$ ، برای $E < E_F$ برابر با $\rho(E) dE$ و برای $E > E_F$ برابر با صفر است. حال، وقتی دمای T پایین باشد ولی دقیقاً صفر نباشد، چه اتفاقی می افتد؟ اگر الکترونها از مکانیک کلاسیک تبعیت می کردند، هر یک از آنها، هنگام رفتن از صفر مطلق به دمای T ، انرژی از مرتبه kT ، کسب می کرد (که در آن k ثابت بولتزمن است). در این صورت، انرژی کل گاز الکترون بر واحد حجم تقریباً برابر می بود با

$$U_{cl}(T) \simeq \frac{N}{L^3} kT \quad (۱۰)$$

که منتهی به یک گرمای ویژه در حجم ثابت، $\partial U_{cl} / \partial T$ ، مستقل از دما می شد. در واقع، پدیده های فیزیکی کلاً متفاوت اند، زیرا اصل پائولی اغلب الکترونها را از گرفتن انرژی باز می دارد. برای الکترونی که انرژی اولیه E آن خیلی کمتر از E_F است (به طور دقیقتر، اگر $E_F - E \gg kT$)، حالتی که الکترون می تواند، پس از افزایش انرژی به مقدار kT ، به آنها برود، قبلاً اشغال شده اند و از این رو برای آن ممنوع هستند. فقط الکترونهايي که انرژی اولیه E آنها به E_F نزدیک است ($E_F - E \simeq kT$) می توانند، همان طوری که در شکل ۲-ب نشان داده شده است، "گرمای بگیرند". تعداد این الکترونها، [بر طبق (۹)] تقریباً برابر است با

$$\Delta N \simeq \rho(E_F) kT = \frac{3}{2} N \frac{kT}{E_F} \quad (۱۱)$$

چون انرژی هر یک، حدود kT افزایش می‌یابد، انرژی کل در واحد حجم را می‌توان به جای رابطه کلاسیکی (1°)، به صورت زیر نوشت

$$U(T) \simeq \frac{N}{L^3} \frac{kT}{E_F} kT \quad (12)$$

در نتیجه، گرمای ویژه در حجم ثابت با دمای مطلق T متناسب است

$$c_V = \frac{\partial U}{\partial T} \simeq \frac{Nk}{L^3} \frac{kT}{E_F} \quad (13)$$

برای یک فلز، که مدل الکترون آزاد را می‌توان به آن اعمال کرد، E_F نوعاً از مرتبه چند eV است. چون kT در دماهای معمولی در حدود 3°eV است، ملاحظه می‌کنیم که در این مورد، ضریب kT/E_F که توسط اصل پاولی وارد می‌شود، از مرتبه $1/10^{\circ}$ است.

یادداشتها:

۱. برای اینکه گرمای ویژه گاز الکترون را به طور کمی محاسبه کنیم، باید احتمال $f(E, T)$ اشغال بودن یک حالت منفرد با انرژی E را وقتی سیستم در دمای T در تعادل ترمودینامیکی است، بدانیم. در این صورت تعداد $\nu(E) dE$ الکترونی که انرژیهایشان بین E و $E + dE$ است برابر است با

$$\nu(E)dE = f(E, T)\rho(E) dE \quad (14)$$

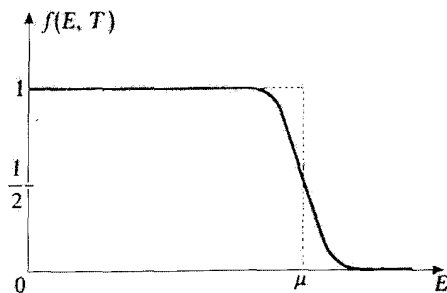
در مکانیک آماری نشان داده می‌شود که برای فرمیونها، تابع $f(E, T)$ را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$f(E, T) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/kT} + 1} \quad (15)$$

که در آن μ پتانسیل شیمیایی است، که تراز فرمی سیستم نیز نامیده می‌شود. این تابع، توزیع فرمی-دیراک است. تراز فرمی، یا این شرط که تعداد کل الکترونها باید برابر N باشد، به دست می‌آید

$$\int_0^{+\infty} \frac{\rho(E) dE}{e^{(E-\mu)/kT} + 1} = N \quad (16)$$

μ به دما بستگی دارد، ولی می‌توان نشان داد که برای T های کوچک خیلی کندتر تغییر می‌کند. شکل تابع $f(E, T)$ در شکل ۳ نشان داده شده است. در صفر مطلق، $f(E, 0)$ به ازای $E < \mu$ برابر ۱ و به ازای $E > \mu$ برابر ۰ است (تابع "پله‌ای"). در دماهای غیر صفر، $f(E, T)$ به شکل یک "پله" لبه گرد است (مادامی که $\mu \ll kT$ باشد، فاصله انرژی که این تابع بر روی آن تغییر می‌کند از مرتبه چند kT است).



شکل ۳ شکل توزیع فرمی-دیراک در صفر مطلق (خط چین) و در دماهای پایین (خط پرا). برای یک گاز الکترون در صفر مطلق، تراز فرمی μ بر انرژی فرمی E_F منطبق است. منحنیهای شکل ۲ را می توان از ضرب کردن چگالی حالتها، $\rho(E)$ ، در $f(E, T)$ به دست آورد.

برای یک گاز الکترون آزاد، واضح است که، تراز فرمی μ ، در صفر مطلق بر انرژی فرمی E_F ، که در بخش ۱-الف محاسبه کردیم، منطبق است. در این صورت، بنا بر رابطه (۱۴) و شکلی که $f(E, T)$ به ازای $T = 0$ می گیرد (شکل ۳)، μ مانند E_F ، بالاترین انرژی منفرد را مشخص می کند.

از طرف دیگر، برای یک سیستم با طیف گسسته ای از ترازهای انرژی $(E_1, E_2, \dots, E_i, \dots)$ ، تراز فرمی μ که از فرمول (۱۶) به دست می آید، در صفر مطلق بر بالاترین انرژی منفرد E_m در حالت پایه، منطبق نیست. در این مورد، چگالی حالتها، متشکل از یک رشته "توابع دلتا" به مرکزهای $E_1, E_2, \dots, E_i, \dots$ است؛ در نتیجه، در صفر مطلق، μ می تواند هر مقداری بین E_m و E_{m+1} را اختیار کند، زیرا، بر طبق رابطه (۱۴)، تمام این امکانات به یک مقدار $\nu(E)$ منجر می شوند. μ در صفر مطلق را به عنوان حد $\mu(T)$ ، وقتی T به سمت صفر میل کند، تعریف می کنیم. چون در دماهای غیر صفر، تراز E_m کمی خالی می شود، و E_{m+1} شروع به پر شدن می کند، حد $\mu(T)$ ، مقداری بین E_m و E_{m+1} دارد (اگر دو حالت E_m و E_{m+1} دارای یک درجه واگنی باشند، مقدار آن در وسط این دو مقدار خواهد بود).

همچنین، برای سیستمی که شامل یک رشته نوارهای مجاز انرژی است که توسط نوارهای ممنوع از هم جدا می شوند (الکترونهای یک جامد؛ مکمل ۶ از فصل ۱۱ را ببینید)، وقتی بالاترین انرژی منفرد در صفر مطلق، بر حد بالایی یک نوار مجاز منطبق باشد، تراز فرمی μ در یک نوار ممنوع قرار دارد. از طرف دیگر، وقتی E_F در وسط یک نوار مجاز باشد، تراز فرمی μ مساوی E_F است.

۲. نتایج قبل، رفتار گرمای ویژه فلزات در دماهای بسیار پایین را توصیف می کنند. در دماهای معمولی، گرمای ویژه اساساً ناشی از ارتعاشات شبکه بونی است (مکمل ۱۱ از فصل ۵ را ببینید)، زیرا گرمای ویژه گاز الکترون عملاً قابل چشمپوشی است. اما، گرمای ویژه شبکه برای T های کوچک به صورت T^3 به سمت صفر میل می کند، از این رو، گرمای ویژه گاز الکترون در دماهای پایین (حدود $1^\circ K$) غالب و یک کاهش خطی نسبت به T برای فلزات مشاهده می شود.

۲. پذیرفتاری مغناطیسی

حال فرض کنید که یک گاز الکترون آزاد را در یک میدان مغناطیسی یکنواخت \mathbf{B} که به موازات Oz است، قرار داده‌ایم. در این صورت، انرژی یک حالت مانای منفرد به حالت اسپین متناظر بستگی دارد، زیرا هامیلتونی شامل یک جمله اسپین پارامغناطیسی است (فصل ۹، بخش ۹-۱-۲ را ببینید)

$$W = -2 \frac{\mu_B}{\hbar} B S_z \quad (17)$$

که در آن μ_B ، مگنتون بور

$$\mu_B = \frac{q\hbar}{2m_e} \quad (18)$$

و S عملگر اسپین الکترون است. برای سهولت، رابطه (۱۷) را به عنوان تنها جمله اضافه شده به هامیلتونی در نظر خواهیم گرفت (رفتار توابع موج فضایی به تفصیل در مکمل ۵ از فصل ۶ بررسی شده است). تحت این شرایط، حالت‌های مانا، همان حالت‌های مانای در غیاب میدان مغناطیسی باقی می‌مانند، و بسته به حالت اسپین، انرژی متناظر به اندازه $\mu_B B$ افزایش یا کاهش می‌یابد. بنابراین، چگالی‌های حالت‌های $\rho_+(E)$ و $\rho_-(E)$ که به ترتیب با حالت‌های اسپین $|+\rangle$ و $|-\rangle$ متناظرند را می‌توان به طور بسیار ساده‌ای از چگالی $\rho(E)$ ، که در بخش ۱-الف محاسبه کردیم، به دست آورد

$$\rho_{\pm}(E) = \frac{1}{2} \rho(E \pm \mu_B B) \quad (19)$$

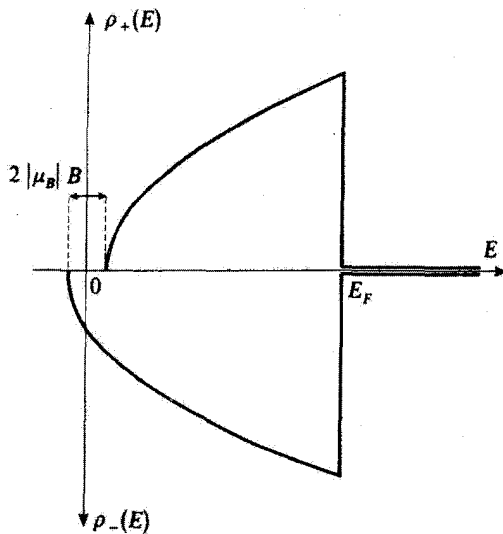
بنابراین، در صفر مطلق، به وضعیتی که در شکل ۴ نشان داده‌ایم، می‌رسیم.

چون انرژی مغناطیسی $|\mu_B|B$ بسیار کوچکتر از E_F است، اختلاف بین تعداد الکترون‌هایی که اسپین‌هایشان پادموازی میدان مغناطیسی است و آنهایی که اسپین‌هایشان موازی \mathbf{B} است، عملاً در صفر مطلق، برابر است با

$$N_- - N_+ \simeq \frac{1}{2} \rho(E_F) |\mu_B| B \quad (20)$$

بنابراین، گشتاور مغناطیسی M بر واحد حجم را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned} M &= |\mu_B| \frac{1}{L^3} (N_- - N_+) \\ &= \mu_B \frac{1}{L^3} \rho(E_F) \end{aligned} \quad (21)$$



شکل ۴ چگالیهای حالت‌های $\rho_+(E)$ و $\rho_-(E)$ که به ترتیب با حالت‌های اسپین $(+)$ و $(-)$ (μ_B منفی است) متناظرند. در صفر مطلق، فقط حالت‌هایی که انرژیهایشان کمتر از E_F است اشغال هستند.

این گشتاور مغناطیسی با میدان اعمال شده متناسب است، به طوری که پذیرفتاری مغناطیسی در واحد حجم برابر است با

$$\chi = \frac{M}{B} = \mu_B \frac{1}{L^3} \rho(E_F) \quad (22)$$

یا، با استفاده از رابطه (۹) برای $\rho(E)$

$$\chi = \frac{3}{2} \frac{N}{L^3} \frac{\mu_B}{E_F} \quad (23)$$

یادداشتها:

۱. فرض کرده‌ایم که سیستم در صفر مطلق باشد، اما نتیجه (۲۳) در دماهای پایین معتبر می‌ماند، زیرا تغییرات تعداد حالت‌های اشغال شده (شکل ۲-ب) عملاً برای هر دو جهت اسپین یکی است. بنابراین، یک پذیرفتاری مغناطیسی مستقل از دما به دست می‌آوریم. این، در واقع همان چیزی است که برای فلزات مشاهده می‌شود.

۲. همانند بخش گذشته، می‌بینیم که رفتار سیستم در حضور یک میدان مغناطیسی، اساساً توسط الکترونی‌هایی که انرژیهایشان نزدیک به E_F است، تعیین می‌شود. این مطلب، تجلی دیگری از

اصل پاؤلی است. وقتی میدان مغناطیسی اعمال می‌شود، الکترونهايي که در حالت اسپین (+) قرار دارند متمایل اند که به حالت (-)، که از نظر انرژی مطلوبتر است، بروند. اما اغلب آنها توسط اصل طرد از انجام این کار باز می‌مانند، زیرا تمامی حالتهاي (-)ی مجاور قبلاً اشغال شده‌اند. ■

ج) شرایط مرزی تناوبی

۱. مقدمه

ساختار توابع φ_{n_x, n_y, n_z} که با فرمول (۱-الف) داده می‌شوند، با ساختار توابع موج تخت $e^{ik \cdot r}$ که معمولاً حالتهاي مانای الکترونهايي آزاد را توصیف می‌کنند کاملاً متفاوت است. این اختلاف صرفاً از شرایط مرزی تحمیل شده توسط دیواره‌های جعبه ناشی می‌شود، زیرا، در داخل جعبه، امواج تخت در همان معادله‌ای صدق می‌کنند که φ_{n_x, n_y, n_z} صدق می‌کند

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \varphi(\mathbf{r}) = E \varphi(\mathbf{r}) \quad (24)$$

کار کردن با امواج تخت از توابع (۱-الف) راحت‌تر است؛ به همین دلیل ترجیحاً از امواج تخت استفاده می‌کنیم. برای این منظور، بر جوابهای معادله (۲۴)، شرایط مرزی ساختگی جدیدی تحمیل می‌کنیم که امواج تخت را مستثنی نکنند. البته، چون این شرایط با آنهايي که در واقع توسط دیواره‌های جعبه ایجاد می‌شوند متفاوت‌اند، این امر مسئله فیزیکی را تغییر خواهد داد. ولی در این بخش نشان خواهیم داد که می‌توانیم از این روش مهم‌ترین خواص فیزیکی سیستم اولیه را به دست آوریم. بدین منظور، لازم است که شرایط مرزی جدید به یک مجموعه گسسته از مقادیر ممکن k منجر شود، به طوری که

۱. سیستم امواج تخت متناظر با این مقادیر k ، پایه‌ای تشکیل دهند که بتوان هر تابعی را که حوزه آن در داخل جعبه است بر آن پایه بسط داد.

۲. چگالی حالتهاي وابسته به این مجموعه مقادیر k ، $\rho'(E)$ ، با چگالی حالتهاي، $\rho(E)$ ، که در بخش ۱-الف از روی حالتهاي مانای واقعی محاسبه شد، یکسان باشد.

البته، منظور از متفاوت بودن شرایط مرزی جدید با شرایط حقیقی، این است که امواج تخت نمی‌توانند به طور صحیح آنچه را که در نزدیکی دیواره‌ها رخ می‌دهد (آثار سطحی) توصیف کنند. اما، واضح است که این امواج می‌توانند، به خاطر شرط (۲)، به توصیف بسیار ساده‌ای از آثار حجمی، که بنا بر آنچه در بخش ۱-ب دیدیم فقط به چگالی حالتهاي، $\rho(E)$ ، بستگی دارند، برسند. به علاوه، به خاطر شرط (۱)، حرکت هر بسته موج را دور از دیواره‌ها می‌توان به طور صحیحی توسط برهم‌نهی امواج تخت توصیف کرد، زیرا، بین دو برخورد با دیواره‌ها، بسته موج آزادانه انتشار می‌یابد.

۲. شرایط بورن-فن کارمن

دیگر قید نمی‌کنیم که توابع موج منفرد در دیواره‌های جعبه صفر شوند، بلکه، شرط می‌کنیم که تناوبی باشند و دوره تناوب آنها L باشد

$$\varphi(x + L, y, z) = \varphi(x, y, z) \quad (25)$$

با روابط مشابهی برای y و z . توابع موج با شکل $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ ، وقتی در این شرایط صدق می‌کنند که مؤلفه‌های بردار \mathbf{k} در روابط زیر صدق کنند

$$\begin{cases} k_x = n'_x \frac{2\pi}{L} \\ k_y = n'_y \frac{2\pi}{L} \\ k_z = n'_z \frac{2\pi}{L} \end{cases} \quad (26)$$

که در آن، اکنون n'_x, n'_y, n'_z اعداد صحیح مثبت یا منفی یا صفرند. از این رو، یک سیستم توابع موج جدید معرفی می‌کنیم

$$\varphi'_{n'_x, n'_y, n'_z}(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\frac{2\pi}{L}(n'_x x + n'_y y + n'_z z)} \quad (27)$$

که در داخل جعبه بهنجار شده‌اند، بر طبق رابطه (۲۴)، انرژی متناظر را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$E_{n'_x, n'_y, n'_z} = \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{3\pi^2}{L^2} (n'^2_x + n'^2_y + n'^2_z) \quad (28)$$

هر تابعی که در داخل جعبه تعریف شده باشد را می‌توان به یک تابع تناوبی از x, y, z با تناوب L بسط داد. چون این تابع تناوبی را می‌توان همواره برحسب یک رشته فوریه بسط داد (پیوست الف، بخش ۱-ب را ببینید)، سیستم $\{\varphi'_{n'_x, n'_y, n'_z}(\mathbf{r})\}$ یک پایه برای توابع موج تشکیل می‌دهد که حوزه آن داخل جعبه است. به هر بردار $\mathbf{k}_{n'_x, n'_y, n'_z}$ که مؤلفه‌های آن با رابطه (۲۶) داده شود، یک مقدار کاملاً معین از انرژی $E_{n'_x, n'_y, n'_z}$ که با رابطه (۲۸) داده می‌شود، متناظر است. اما، توجه کنید که اکنون، بردارهای $\mathbf{k}_{n'_x, n'_y, n'_z}$ می‌توانند مؤلفه‌های مثبت، منفی یا صفر

داشته باشند، و اینکه نوکهای آنها فضا را به مکعبهای بنیادی، که ابعادشان دو برابر ابعاد به دست آمده در بخش ۱-الف است، تقسیم می‌کنند.

برای اینکه نشان دهیم شرایط مرزی (۲۵) (تا آنجا که آثار حجمی مورد نظرند)، به همان نتایج فیزیکی بخش ۱-الف منجر می‌شوند، کافی است تعداد $n'(E)$ حالت‌های مانای با انرژی کمتر از E را محاسبه کنیم، و مقدار (Δ) را به دست آوریم [انرژی فرمی E_F و چگالی حالت‌های $\rho(E)$ را می‌توان مستقیماً از $n(E)$ به دست آورد]. $n'(E)$ را، با در نظر گرفتن مشخصه‌های جدید بردارهای k_x, k_y, k_z ، به همان روش بخش ۱-الف حساب می‌کنیم. چون، در این حال، مؤلفه‌های k می‌توانند علامتهای دلخواه داشته باشند، حجم کره با شعاع $\sqrt{2m_e E/\hbar^2}$ را دیگر نباید بر ۸ تقسیم کرد. اما، این تغییر با این واقعیت که عنصر حجم $(2\pi/L)^3$ و وابسته به هر یک از حالت‌های (۲۷)، هشت مرتبه بزرگتر از عنصر حجم متناظر با شرایط مرزی بخش ۱-الف است، جبران می‌شود. در نتیجه، $n'(E)$ با عبارت (۵) برای $n(E)$ یکسان است.

از این رو، شرایط مرزی تناوبی (۲۵) به ما این امکان را می‌دهد که شرایط (۱) و (۲)ی بخش گذشته را برقرار سازیم. این شرایط، معمولاً شرایط بورن-فون کارمن نامیده می‌شوند ("شرایط B.V.K.").

یادداشت:

یک الکترون واقعاً آزاد (نه محبوس در یک جعبه) را در نظر بگیرید. ویژه تابعهای سه مؤلفه تکانه \mathbf{P} (و در نتیجه، ویژه تابعهای هامیلتونی $H = \mathbf{P}^2/2m_e$) تشکیل یک "پایه پیوسته" می‌دهند

$$\left\{ \left(\frac{\mathbf{p}}{2\pi\hbar} \right)^{3/2} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \right\} \quad (29)$$

قبلاً چندین بار خاطر نشان کردیم که حالت‌هایی که برای آنها شکل (۲۹) در تمام فضا معتبر است، حالت‌های فیزیکی نیستند، ولی، می‌توان آنها را به عنوان واسطه‌های ریاضی برای مطالعه حالت‌های فیزیکی، که همان بسته‌های موج هستند، به کار برد.

گاهی ترجیح می‌دهیم، به جای پایه پیوسته (۲۹) از پایه گسسته (۲۷) استفاده کنیم. برای این منظور، الکترون را محبوس در یک جعبه مجازی در نظر می‌گیریم که ابعاد L آن از هر بُعد موجود در مسئله خیلی بزرگتر باشد، و شرایط B.V.K. را اعمال می‌کنیم. هر بسته موجی که، همواره به ازای مقدار به حد کافی بزرگ L ، در داخل جعبه باشد، را می‌توان هم بر روی پایه پیوسته (۲۹)، و هم بر روی پایه گسسته (۲۷) بسط داد. از این رو، حالت‌های (۲۷) را می‌توان همانند حالت‌های (۲۹)، به عنوان واسطه‌های محاسبه در نظر گرفت؛ ولی، این حالت‌ها از این امتیاز برخوردارند که در داخل جعبه بهنجار شده‌اند. البته، باید در آخر محاسبات توجه داشته باشیم که کمیت‌های فیزیکی مختلفی که به دست می‌آوریم (احتمالات گذار، سطوح مقطع، ...)، با شرط به حد کافی بزرگ بودن L ، به L بستگی نداشته باشند.

مسلّم است که برای یک الکترون واقعاً آزاد، L ، مادامی که به حد کافی بزرگ باشد تا حالت‌های (۲۷)

تشکیل پایه‌ای بدهند که بسته‌های موج موجود در مسئله را بتوان بر روی آن بسط داد، هیچ معنای فیزیکی ندارد و می‌تواند دلخواه باشد [شرط (۱) از بخش ۱-ج-۱]. از طرف دیگر، در مسئله‌ای که در اینجا مطالعه می‌کنیم، L^3 حجمی است که N الکترون در واقع محدود به آن هستند و، در نتیجه، دارای یک مقدار معین است.

۲. الکترون‌ها در جامدات

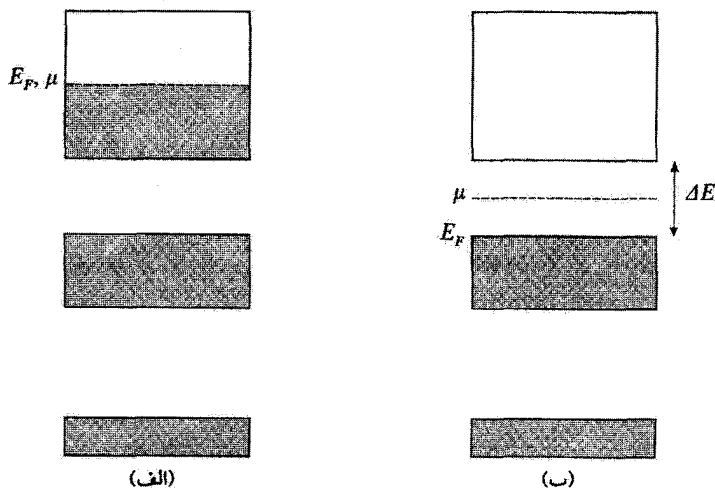
الف) نوارهای مجاز

مدل گاز الکترون آزاد محبوس در یک جعبه را می‌توان به‌طور نسبتاً خوبی به الکترون‌های رسانش یک فلز اعمال کرد. این الکترون‌ها را می‌توانیم این‌طور در نظر بگیریم که آزادانه در داخل فلز حرکت می‌کنند، و جاذبه الکتروستاتیکی شبکه بلوری مانع می‌شود که وقتی به سطح فلز نزدیک می‌شوند از آن خارج شوند. اما، این مدل توضیح نمی‌دهد که چرا بعضی از جامدات رساناهای الکتریکی خوبی هستند، در حالی‌که بقیه عایق‌اند. این یک واقعیت تجربی مهم است. خواص الکتریکی بلورها، ناشی از الکترون‌های اتم‌های تشکیل‌دهنده آنهاست. با وجود این، رسانندگی ذاتی می‌تواند بین یک عایق خوب و یک فلز خالص، با ضریب 10^{20} تغییر کند. خواهیم دید که چگونه این مطلب را می‌توان با استفاده از اصل پاؤلی و نوارهای انرژی حاصل از طبیعت تناوبی پتانسیل ایجادشده توسط یونها، به‌طور کیفی توضیح داد. (مکمل‌های O از فصل ۳ و ۶ از فصل ۱۱ را ببینید).

در مکمل ۶ از فصل ۱۱ نشان دادیم که اگر، در تقریب اول، الکترون‌های یک جامد را مستقل از هم در نظر بگیریم، انرژی‌های منفرد ممکن آنها به نوارهای مجازی که توسط نوارهای ممنوع از هم جدا شده‌اند، دسته‌بندی می‌شوند. با فرض اینکه هر الکترون تحت تأثیر یک زنجیر خطی از یون‌های مثبتی باشد که به فواصل منظمی از هم قرار دارند، در تقریب پیوندی قوی، رشته‌هایی از نوارها را پیدا کردیم، که هر یک شامل $2N$ تراز بود، (N تعداد یونها و ضریب ۲ به خاطر اسپین است). البته، در یک بلور واقعی، که در آن یون‌های مثبت گره‌های یک شبکه سه‌بعدی را اشغال می‌کنند، وضعیت پیچیده‌تر است. فهم نظری خواص یک جامد مستلزم مطالعه دقیق نوارهای انرژی است، مطالعه‌ای که مبتنی بر مشخصه‌های فضایی شبکه بلوری است. ما در اینجا این مسائل خاص نیز یک حالت جامد را به تفصیل بررسی نمی‌کنیم، بلکه به یک بحث کیفی از این پدیده‌ها اکتفا خواهیم کرد.

ب) مکان تراز فرمی و رسانندگی الکتریکی

با دانستن ساختار نوار و تعداد حالت‌های موجود در هر نوار، حالت پایه سیستم الکترونی یک جامد را با "پر کردن متوالی حالت‌های منفرد نوارهای مجاز مختلف، و با شروع از پایینترین انرژیها، به‌دست



شکل ۵ نمایش طرح‌وار ترازهای منفرد اشغال شده توسط الکترونها در صفر مطلق (به رنگ خاکستری)، E_F بالاترین انرژی منفرد است.

در یک رسانا (شکل الف)، E_F (که در این صورت بر تراز فرمی μ منطبق است) در داخل یک نوار مجاز، که "نوار رسانش" نامیده می‌شود، قرار دارد. در این صورت الکترونیایی که انرژیهایشان نزدیک E_F است می‌توانند به سادگی شتابدار شوند، زیرا حالت‌های انرژی اندکی بالاتر، برای آنها قابل دسترس است.

در یک عایق (شکل ب)، E_F در مرز بالایی یک نوار مجاز که "نوار ظرفیت" نامیده می‌شود قرار دارد (در این صورت تراز فرمی μ در نوار ممنوع مجاور واقع است). الکترونها فقط می‌توانند با عبور از نوار ممنوع پرانگیخته شوند. این امر، مستلزم انرژی است که حداقل مساوی با پهنای ΔE این نوار باشد.

می‌آوریم. سیستم الکترونی فقط در صفر مطلق واقعاً در حالت پایه قرار دارد. ولی، همان‌طور که در بخش ۱-ب گفته شد، مشخصه‌های این حالت پایه، درک نیمه‌کمی رفتار سیستم را در دماهای غیر صفر (اغلب، تا دماهای معمولی) ممکن می‌سازد. نظیر خواص گرمایی و مغناطیسی (بخش ۱-ب را ببینید)، خواص الکتریکی سیستم عمدتاً توسط الکترونیایی تعیین می‌شود که انرژیهای تک‌تک آنها خیلی نزدیک به بالاترین مقدار E_F است. اگر جامد را در یک میدان الکتریکی قرار دهیم، الکترونی که انرژی اولیه آن خیلی پایینتر از E_F است نمی‌تواند با شتابدار شدن انرژی بگیرد، زیرا از این طریق به حالت‌هایی می‌رسد که قبلاً اشغال شده‌اند. از این رو، ضروری است که مکان E_F را نسبت به نوارهای انرژی مجاز، بدانیم.

ابتدا، فرض می‌کنیم (شکل ۵-الف) که E_F در وسط یک نوار مجاز واقع باشد. در این صورت تراز فرمی μ مساوی با E_F است [یادداشت ۱ از بخش ۱-ب]. الکترونیایی که انرژیهایشان

نزدیک به E_F است، در این مورد، می‌تواند به سادگی شتاب بگیرند، زیرا حالت‌های با انرژی کمی بالاتر، خالی و قابل دسترس هستند. در نتیجه، یک جامد که برای آن تراز فرمی در وسط یک نوار مجاز واقع باشد، رساناست. در این صورت الکترونها با بالاترین انرژی، تقریباً مانند الکترونهاى آزاد رفتار می‌کنند.

از طرف دیگر، جامدی را در نظر بگیرید که برای آن حالت پایه از نوارهای مجاز کاملاً اشغال شده، تشکیل شده باشد (شکل ۵-ب). در این صورت E_F با حد بالایی یک نوار مجاز برابر است، و تراز فرمی μ در داخل نوار ممنوع مجاور قرار می‌گیرد [یادداشت ۱ از بخش ۱-ب-۱]. در این مورد، هیچ الکترونی نمی‌تواند شتابدار شود، زیرا حالت‌های انرژی که بلافاصله در بالای حالت‌های آنها قرار دارند، ممنوع‌اند. از این رو، جامدی که برای آن تراز فرمی در داخل یک نوار ممنوع قرار داشته باشد، یک عایق است. هر چه فاصله ΔE بین آخرین نوار اشغال شده و اولین نوار مجاز خالی بیشتر باشد، عایق بهتر است. بعداً به این نکته خواهیم گشت.

نوارهای مجاز عمیق، که کاملاً توسط الکترونها اشغال شده‌اند و، در نتیجه، از نظر الکتریکی و گرمایی خنثی هستند، نوارهای ظرفیت نامیده می‌شوند. این نوارها عموماً باریک‌اند. در یک "پیوند قوی" (مکمل ۶ از فصل ۱۱، بخش ۲ را ببینید)، این نوارها از ترازهای اتمی با پایتترین انرژی، که فقط به میزان اندکی تحت تأثیر وجود سایر اتم‌های بلور قرار می‌گیرند، حاصل می‌شوند. از طرف دیگر، نوارهای بالاتر، پهن‌ترند؛ یک نوار که به‌طور جزئی اشغال شده است، نوار رسانش نامیده می‌شود.

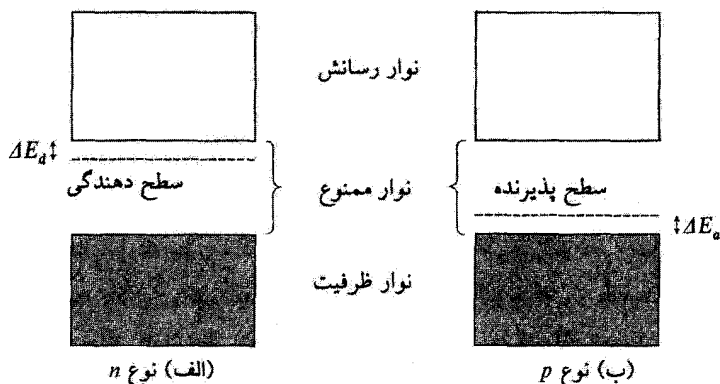
برای اینکه یک جامد عایق خوبی باشد، باید نه تنها آخرین نوار اشغال شده در حالت پایه کاملاً پر باشد، بلکه باید از نوار مجاز بالاتر مجاور خود نیز، توسط یک نوار ممنوع به حد کافی پهن جدا شده باشد. همان‌طور که گفتیم (بخش ۱-ب-۱)، در دماهای غیر صفر، بعضی از حالت‌های با انرژی پایتتر از E_F می‌توانند خالی باشند، در حالی که بعضی از حالت‌های با انرژی بالاتر پهن‌ترند (شکل ۲-ب). برای اینکه جامد در دمای T عایق باقی بماند، باید پهنای ΔE نوار ممنوع که از این برانگیختگی الکترونها جلوگیری می‌کند، خیلی بزرگتر از kT باشد. اگر ΔE کوچکتر از kT یا از مرتبه آن باشد، تعدادی از الکترونها، آخرین نوار ظرفیت را ترک می‌کنند تا حالت‌های نوار مجاز بلافاصله بالاتر را (که در صفر مطلق کاملاً خالی بود) اشغال کنند. در این صورت، بلور، هر چند به تعداد محدود، دارای الکترونهاى رسانش خواهد بود: این بلور یک نیمرساناست (چنین نیمرسانایی را نیمرسانای ذاتی می‌نامیم؛ به یادداشت انتهای صفحه ۲۹۹ مراجعه کنید). به‌عنوان مثال، الماس، که برای آن ΔE نزدیک به ۵ eV است، در دماهای معمولی، عایق باقی می‌ماند، در حالی که، سیلیسیم و ژرمانیم، اگر چه کاملاً شبیه الماس‌اند، ولی نیمرسانا هستند: پهنای ΔE نوارهای ممنوع آنها کمتر از ۱ eV است. این ملاحظات، در عین حالی که خیلی کیفی هستند، ما را قادر می‌سازند تا دریابیم که چرا رسانش الکتریکی یک نیمرسانا سریعاً با دما افزایش می‌یابد؛

با استدلالهای کمی‌تر، در واقع، یک بستگی به صورت $e^{-\Delta E/kT}$ پیدا می‌کنیم.

خواص نیمرساناها، همچنین پدیده‌ی ظاهراً باطنمایی را آشکار می‌سازند. به این ترتیب که به نظر می‌رسد، علاوه بر الکترونیایی که از نوار ممنوع ΔE در دمای T عبور کرده‌اند، به همان تعداد ذراتی با بار مخالف، در بلور وجود داشته‌اند. این ذرات نیز در جریان الکتریکی مشارکت دارند، ولی مشارکت آنها، مثلاً در اثر هال^۱، با علامت مخالف آن چیزی است که برای الکترون‌ها انتظار می‌رود. این مطلب را، که نمود جالبی از اصل پاؤلی است، می‌توان به نحو رضایت‌بخشی توسط نظریه‌ی نوار توضیح داد. برای فهم کیفی این مطلب، باید یادآور شویم که نوار ظرفیت آخر، هنگامی که در حوالی صفر مطلق کاملاً پر است، هیچ جریانی را هدایت نمی‌کند (اصل پاؤلی از شتابدار شدن الکترون‌ها ممانعت می‌کند). وقتی، بعضی از الکترون‌ها، بر اثر برانگیختگی گرمایی، به نوار رسانش می‌روند، حالتی را که در نوار ظرفیت اشغال کرده بودند، خالی می‌کنند. این حالتی خالی، در یک نوار تقریباً پر، را "حفره" می‌گویند. حفره‌ها مانند ذراتی که بار آنها مخالف بار الکترون است، رفتار می‌کنند. اگر یک میدان الکتریکی به سیستم اعمال کنیم، الکترونیایی که در نوار ظرفیت باقی مانده‌اند، بدون آنکه این نوار را ترک کنند، می‌توانند به حرکت در آیند و حالتی خالی را اشغال کنند. به این طریق، این الکترون‌ها "حفره‌ها" را پر می‌کنند، ولی حفره‌های جدیدی نیز در پشت سر خود باقی می‌گذارند^۲. از این رو، حفره‌ها در جهت مخالف حرکت الکترون‌ها حرکت می‌کنند، یعنی، گویی دارای بار مثبت‌اند. این استدلال کلی را می‌توان دقیقتر انجام داد، و در واقع می‌توان نشان داد که حفره‌ها از هر حیث معادل حاملهای بار مثبت‌اند.

یادداشت:

تا به حال فقط از بلورهای صحبت کرده‌ایم که از نظر شیمیایی خالص و از نظر هندسی کامل‌اند. اما، در عمل، تمام جامدات نقصها و ناخالصیهایی دارند که اغلب نقش مهمی ایفا می‌کنند، بخصوص، در نیمرساناها. به‌عنوان مثال، یک بلور چهار ظرفیتی سیلیسیم یا ژرمانیم را در نظر بگیرید، که در آن، بعضی اتمها توسط ناخالصی اتمهای پنج ظرفیتی نظیر فسفر، آرسنیک یا آنتیمون جایگزین شده‌اند (این امر اغلب بدون هیچ تغییر مهمی در ساختار بلور انجام می‌شود). یک اتم با چنین ناخالصی، نسبت به اتمهای سیلیسیم یا ژرمانیم مجاور خود یک الکترون در مدار خارجی خود بیشتر دارد؛ این اتم، الکترون‌دهنده نامیده می‌شود. انرژی پیوندی ΔE_d الکترون اضافی در بلور به‌طور قابل ملاحظه‌ای از انرژی پیوندی آن، در اتم آزاد بیشتر است (از مرتبه‌ی چند صد eV است)؛ این امر اساساً به ثابت بزرگ دی‌الکتریک بلور مربوط می‌شود، که نیروی کولنی را کاهش می‌دهد (مکمل ۱ از فصل ۷، بخش ۱-الف-۴). نتیجه اینک الکترونیهای اضافی که ۱. اثر هال را به یاد آورید: در یک نمونه حامل جریان که در یک میدان مغناطیسی عمود بر این جریان قرار گرفته است، بارهای متحرک تحت تأثیر نیروی لورنتس قرار می‌گیرند. در حالت پا برجا، این نیرو باعث ظاهر شدن یک میدان الکتریکی عرضی می‌شود (عمود بر جریان و میدان مغناطیسی).



شکل ۶ نیمرساناهای ذاتی: اتمهای دهنده (شکل الف) الکترونیایی را وارد می‌کند که به راحتی در نوار رسانش حرکت می‌کنند، زیرا فاصله حالت‌های پایه از آن فقط بازه انرژی ΔE_g است که بسیار کوچکتر از نوار ممنوع است. اتمهای پذیرنده (شکل ب) به راحتی الکترونیهای نوار ظرفیت را گیر می‌اندازند، زیرا برای انجام این کار الکترونها فقط به انرژی برانگیختگی ΔE_g نیاز دارند که بسیار کوچکتر از مقدار لازم برای رسیدن به نوار رسانش است. این فرایند در نوار ظرفیت حفره‌هایی را تولید می‌کند که می‌توانند جریان را هدایت کنند.

توسط اتمهای دهنده وارد شده‌اند، آسانتر از الکترونیهای "عادی" که نوار ظرفیت را اشغال کرده‌اند، به نوار رسانش می‌روند (شکل ۶-الف). به این ترتیب، بلور در دمایی خیلی پایینتر از سیلیسیم یا ژرمانیم خالص تبدیل به رسانا می‌شود. این رسانش ناشی از ناخالصیها را عارضی می‌گوییم. به طور مشابه، یک ناخالصی سه ظرفیتی (نظیر بور، آلومینیم یا گالیم) در سیلیسیم، ژرمانیم، مانند یک الکترون گیرنده رفتار می‌کند، این ناخالصی می‌تواند به آسانی یک الکترون نوار ظرفیت را گیر بیندازد (شکل ۶-ب)، و یک حفره باقی بگذارد که می‌تواند جریان را هدایت کند. در یک نیمرسانای (ذاتی) خالص، تعداد الکترونیهای رسانش همواره برابر با تعداد حفره‌ها در نوار ظرفیت است. از طرف دیگر، یک نیمرسانای عارضی، بسته به فراوانی نسبی اتمهای دهنده و گیرنده، ممکن است دارای تعداد بیشتری الکترون باشد (که در این صورت گفته می‌شود نیمرسانا از نوع n است، زیرا اکثر حاملهای بار منفی‌اند)، یا تعداد حفره‌های آن بیشتر باشد (که نیمرسانا نوع p است، و حاملهای بار اکثر مثبت‌اند). این خواص، اساس کاربردهای تکنولوژیکی بسیاری را تشکیل می‌دهند (ترازیستورها، یکسوکننده‌ها، سلولهای فوتوالکتریک و غیره). به این دلیل است که اغلب، ناخالصیها را عملاً به یک نیمرسانا می‌افزایند تا مشخصه‌های آن را تغییر دهند: این عمل را آرایش می‌گویند. ■

مراجع برای مطالعه بیشتر

بخش ۸ از کتابشناسی، مخصوصاً: Kittel (8.2) و Reif (8.4) برای قسمت فیزیک حالت جامد. رک Feynman III (1.2) فصل ۱۴ بخش ۱۳ از کتابشناسی.

مکمل ۴

تمرینات

۱. هامیلتونی یک ذره را با \hbar_0 نمایش دهید. فرض کنید عملگر \hbar_0 فقط بر روی متغیرهای مداری عمل کند، و دارای سه تراز هم فاصله با انرژیهای $0, \hbar_0\omega, 2\hbar_0\omega$ است (ω یک ثابت حقیقی مثبت است) که در فضای حالت مداری \mathcal{E}_F ناواگن اند (در فضای حالت کل، واگنی هر کدام از این ترازها برابر $1 + 2s$ است، که در آن s اسپین ذره است). از لحاظ متغیرهای مداری، ما فقط با زیر فضای \mathcal{E}_F که توسط سه ویژه حالت مربوطه \hbar_0 به وجود می آید، سروکار داریم.

الف) سیستمی از سه الکترون مستقل را در نظر بگیرید که بتوان هامیلتونی آن را به صورت زیر نوشت

$$H = \hbar_0(1) + \hbar_0(2) + \hbar_0(3)$$

ترازهای انرژی H و درجات واگنی آنها را پیدا کنید.

ب) همین سؤال را برای سیستمی از سه بوزون یکسان با اسپینهای $0, 1$ پاسخ دهید.

۲. سیستمی از دو بوزون یکسان با اسپینهای $1, s$ که در یک پتانسیل مرکزی $V(r)$ واقع است را در نظر می گیریم. جملات طیفی (مکمل ۲ از فصل ۱۴، بخش ۲-ب) مربوط به بیکر بندیهای $1s^2, 1s2p, 2p^2$ کدام اند؟

۳. فضای حالت یک الکترون را در نظر بگیرید که توسط دو بردار $|\varphi_{px}\rangle$ و $|\varphi_{py}\rangle$ که معرف دو اوربیتال اتمی، p_x و p_y متعلق به توابع موج $\varphi_{px}(r)$ و $\varphi_{py}(r)$ هستند تولید می شود (مکمل ۵ از فصل ۷، بخش ۲-ب)

$$\varphi_{px}(r) = xf(r) = \sin\theta \cos\varphi r f(r)$$

$$\varphi_{py}(r) = yf(r) = \sin\theta \sin\varphi r f(r)$$

الف) حالت $|\varphi_{px}\rangle$ را که معرف اوربیتال p_x است و p_x در صفحه xOy و در جهتی که با محور Ox زاویه α می سازد، برحسب $|\varphi_{px}\rangle$ و $|\varphi_{py}\rangle$ بنویسید.

ب) دو الکترون را در نظر بگیرید که اسپینهای آنها هر دو در حالت $|+\rangle$ ، ویژه حالت S_z با ویژه مقدار $+\hbar/2$ هستند.

بردار حالت بهنجارشده $|\psi\rangle$ را بنویسید که معرف سیستم دو الکترون است، که یکی از آنها در حالت $|\varphi_{p_x}\rangle$ و دیگری در حالت $|\varphi_{p_y}\rangle$ است.

ج) همین سؤال را برای موردی که یکی از الکترونها در حالت $|\varphi_{p_x}\rangle$ و دیگری در حالت $|\varphi_{p_y}\rangle$ است پاسخ دهید؛ α و β دو زاویه اختیاری هستند. نشان دهید که بردار حالت $|\psi\rangle$ به دست آمده، همان بردار قبل است.

د) سیستم، در حالت $|\psi\rangle$ سؤال b است. مطلوب است محاسبه چگالی احتمال $\mathcal{P}(r, \theta, \varphi; r', \theta', \varphi')$ برای اینکه یک الکترون در (r, θ, φ) و الکترون دیگر در (r', θ', φ') باشد. نشان دهید که چگالی الکترونی $\rho(r, \theta, \varphi)$ [چگالی احتمال یافتن یکی از الکترونها در (r, θ, φ)] نسبت به دوران حول محور Oz متقارن است. چگالی احتمال داشتن $\varphi - \varphi' = \varphi_0$ که در آن φ_0 معلوم است، را تعیین کنید. درباره تغییرات این چگالی احتمال نسبت به φ_0 بحث کنید.

۴. برخورد بین دو ذره یکسان

نمادگذاری که به کار می‌بریم، همان نمادگذاری بخش ۱۴-۴-۲ الف-۱ از فصل ۱۴ است. الف) دو ذره (۱) و (۲) را با جرم m در نظر می‌گیریم و فعلاً فرض می‌کنیم که دو ذره بدون اسپین و از یکدیگر قابل تمیزند. این دو ذره از طریق پتانسیل $V(r)$ که فقط به فاصله r بین آنها بستگی دارد، برهم‌کنش می‌کنند. در لحظه اولیه t_0 سیستم در حالت $(\downarrow : p_{e_z}; \uparrow : -p_{e_z})$ است. فرض کنید $U(t, t_0)$ عملگر تحول سیستم باشد. دامنه احتمال یافتن سیستم در حالت $(\downarrow : p_n; \uparrow : -p_n)$ در زمان t_1 عبارت است از

$$F(\mathbf{n}) = \langle \downarrow : p_n; \uparrow : -p_n | U(t_1, t_0) | \downarrow : p_{e_z}; \uparrow : -p_{e_z} \rangle$$

فرض کنید θ و φ زوایای قطبی بردار \mathbf{n} در دستگاه محوره‌های راست‌هنگار $Oxyz$ باشند. نشان دهید که $F(\mathbf{n})$ به φ بستگی ندارد، احتمال اینکه یکی از ذرات (نمی‌دانیم کدام یک) دارای تکانه p_n و دیگری دارای تکانه $-p_n$ باشد را برحسب $F(\mathbf{n})$ محاسبه کنید. اگر θ را به $(\pi - \theta)$ تغییر دهیم، احتمال چه تغییری می‌کند؟

ب) مسئله فوق را بار دیگر در نظر بگیرید [یا همان پتانسیل برهم‌کنش مستقل از اسپین $V(r)$ ، ولی این بار، با دو ذره یکسان، که یکی از آنها ابتدا در حالت $(\downarrow : p_{e_z}, m_s)$ و دیگری در حالت $(\downarrow : p_{e_z}, m'_s)$ است] اعداد کوانتومی m_s و m'_s نشان‌دهنده ویژه‌مقدارهای $m_s \hbar$ و $m'_s \hbar$ از مؤلفه اسپین در امتداد Oz هستند. فرض کنید $m_s \neq m'_s$ باشد. احتمال اینکه، در زمان t_1 ، یک ذره دارای تکانه p_n و اسپین m_s و دیگری دارای تکانه $-p_n$ و اسپین m'_s باشد را برحسب

$F(\mathbf{n})$ بیان کنید. اگر اسپینها را اندازه‌گیری نکنیم، احتمال یافتن یک ذره با تکانه $p\mathbf{n}$ و ذرهٔ دیگر با تکانه $-p\mathbf{n}$ چقدر است؟ اگر θ را به $(\pi - \theta)$ تغییر دهیم، در این احتمالها چه تغییری رخ می‌دهد؟ (ج) مسئلهٔ ب را برای مورد $m_s = m'_s$ بررسی کنید. در حالت خاص، جهت $\theta = \pi/2$ را، با دو امکان متمایز، بسته به اینکه ذرات بوزون یا فرمیون باشند، بررسی کنید. نشان دهید که، باز هم، احتمال پراکندگی در جهت‌های θ و $(\pi - \theta)$ یکی است.

۵. برخورد بین دو ذرهٔ یکسان قطبی نشده

دو ذرهٔ یکسان با اسپین s را، که با یکدیگر برخورد می‌کنند، در نظر بگیرید. فرض کنید که حالت‌های اولیهٔ اسپین آنها مشخص نیست. هر یک از دو ذره با احتمال مساوی در $(2s + 1)$ حالت اسپین متعامد ممکن قرار دارند. نشان دهید که، با نامادگذاری تمرین قبل؛ احتمال مشاهدهٔ پراکندگی در جهت \mathbf{n} برابر است با

$$|F(\mathbf{n})|^2 + |F(-\mathbf{n})|^2 + \frac{\varepsilon}{2s + 1} [F^*(\mathbf{n})F(-\mathbf{n}) + \text{c.c.}]$$

(ε برای بوزونها مساوی $+1$ و برای فرمیونها مساوی -1 است).

۶. مقادیر ممکن تکانهٔ زاویه‌ای نسبی دو ذرهٔ یکسان

سیستمی متشکل از دو ذرهٔ یکسان را در نظر بگیرید که توسط پتانسیلی که فقط به فاصلهٔ نسبی آنها بستگی دارد، برهم‌کنش می‌کنند، به طوری که هامیلتونی سیستم را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$H = \frac{\mathbf{P}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{P}_2^2}{2m} + V(|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|)$$

نظیر بخش ۲ از فصل ۷، قرار می‌دهیم

$$\mathbf{R}_G = \frac{1}{2}(\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2) \quad \mathbf{P}_G = \mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_2$$

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2 \quad \mathbf{P} = \frac{1}{2}(\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_2)$$

در این صورت H به صورت زیر در می‌آید

$$H = H_G + H_r$$

$$H_G = \frac{\mathbf{P}_G^2}{2m}$$

$$H_r = \frac{\mathbf{P}_r^2}{m} + V(R)$$

الف) ابتدا، فرض می‌کنیم دو ذره، بوزونهای یکسان با اسپین صفر باشند (به‌عنوان مثال، مزونهای π).

۱. پایه $\{|r_G, r\rangle\}$ متعلق به فضای حالت \mathcal{H} می‌سیستم، که از ویژه‌بردارهای مشترک مشاهده‌پذیرهای \mathbf{R}_G و \mathbf{R} تشکیل یافته است، را به‌کار می‌بریم. نشان دهید که، اگر P_{r_1} عملگر جایگشت دو ذره باشد، داریم

$$P_{r_1}|r_G, r\rangle = |r_G, -r\rangle$$

۲. حال به پایه $\{|\mathbf{p}_G; E_n, l, m\rangle\}$ از ویژه‌بردارهای مشترک $H_r, \mathbf{P}_G, \mathbf{L}^2$ و L_z می‌رویم ($\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$)، تکانه زاویه‌ای نسبی دو ذره است). نشان دهید که این بردارهای پایه جدید توسط عبارتهایی به‌صورت زیر داده می‌شوند

$$|\mathbf{p}_G; E_n, l, m\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r_G e^{i\mathbf{p}_G \cdot \mathbf{r}_G / \hbar} \\ \times \int d^3r R_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) |r_G, r\rangle$$

نشان دهید که

$$P_{r_1}|\mathbf{p}_G; E_n, l, m\rangle = (-1)^l |\mathbf{p}_G; E_n, l, m\rangle$$

۳. چه مقادیری از l براساس اصل موضوع مقارن‌سازی، مجازند؟
 ب) دو ذره تحت مطالعه، اکتون فرمیونهای یکسان با اسپین $1/2$ هستند (الکترون یا پروتون).
 ۱. در فضای حالت سیستم، ابتدا پایه $\{|r_G, r; S, M\rangle\}$ از ویژه‌حالت‌های مشترک $\mathbf{R}, \mathbf{R}_G, S_z$ و S^2 را به‌کار می‌بریم، که در آن $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$ اسپین کل سیستم است (کتهای $|S, M\rangle$ فضای حالت اسپین در بخش ۲ از فصل ۱۰ تعیین شده‌اند). نشان دهید که

$$P_{r_1}|r_G, r; S, M\rangle = (-1)^{S+1} |r_G, -r; S, M\rangle$$

۲. حال به پایه $\{|p_G; E_n, l, m; S, M\rangle\}$ از ویژه‌حالت‌های مشترک S_z, S^2, L^2, H_T و P_G می‌رویم. همانند سؤال (الف-۲) نشان دهید که

$$P_{T1}|p_G; E_n, l, m; S, M\rangle = (-1)^{S+1}(-1)^l |p_G; E_n, l, m; S, M\rangle$$

۳. مقادیری از l را که براساس اصل موضوع مقارن‌سازی مجازند، برای هر یک از مقادیر S سه‌تایی و تک‌تایی به دست آورید.

(ج) (مشکلتر)

متذکر می‌شویم که سطح مقطع پراکندگی کل در دستگاه مرکز جرم دو ذره متمایز که توسط پتانسیل $V(r)$ برهم‌کنش می‌کنند، را می‌توان به صورت زیر نوشت

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

که در آن δ_l انتقال‌های فاز وابسته به پتانسیل $V(r)$ هستند [فصل ۸، فرمول (۸-۵۸)].

۱. اگر وسیله اندازه‌گیری نسبت به هر دو ذره حساسیت یکسان داشته باشد (دو ذره دارای یک جرم هستند) این سطح مقطع چه تغییری می‌کند؟

۲. نشان دهید که در موردی که در سؤال الف ملاحظه کردیم، σ به صورت زیر در می‌آید

$$\sigma = \frac{16\pi}{k^2} \sum_{l \text{ جفت}} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

۳. ثابت کنید که برای دو فرمیون قطبی‌نشده یکسان با اسپین $1/2$ (مورد سؤال ب)، داریم

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \left\{ \sum_{l \text{ جفت}} (2l+1) \sin^2 \delta_l + 3 \sum_{l \text{ فرد}} (2l+1) \sin^2 \delta_l \right\}$$

۷. چگالی‌های احتمال مکان برای یک سیستم از دو ذره یکسان فرض کنید $|\varphi\rangle$ و $|\chi\rangle$ دو پایه متعامد بهنجارشده متعلق به فضای حالت مداری \mathcal{E}_T یک الکترون، و $|+\rangle$ و $|-\rangle$ دو ویژه‌بردار مؤلفه S_z اسپین آن، در فضای حالت اسپین \mathcal{E}_s باشند.

الف) سیستمی از دو الکترون را در نظر بگیرید که یکی در حالت $|\varphi, +\rangle$ و دیگری در حالت $|\chi, -\rangle$ باشد. فرض کنید، $\rho_{11}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d^3r d^3r'$ احتمال یافتن یکی از آنها در حجم d^3r متمرکز

در نقطه \mathbf{r} و دیگری در حجم d^3r' متمرکز در \mathbf{r}' باشد (تابع چگالی دوزره‌ای). همچنین، فرض کنید $\rho_1(\mathbf{r})d^3r$ احتمال یافتن یکی از الکترونها در حجم d^3r متمرکز در نقطه \mathbf{r} باشد (تابع چگالی یک ذره‌ای). نشان دهید که

$$\rho_{II}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = |\varphi(\mathbf{r})|^2 |\chi(\mathbf{r}')|^2 + |\varphi(\mathbf{r}')|^2 |\chi(\mathbf{r})|^2$$

$$\varphi_I(\mathbf{r}) = |\varphi(\mathbf{r})|^2 + |\chi(\mathbf{r})|^2$$

نشان دهید که، حتی اگر $|\varphi\rangle$ و $|\chi\rangle$ در \mathcal{E}_I متعامد نباشند، این روابط معتبرند. انتگرالهای $\rho_{II}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ و $\rho_I(\mathbf{r})$ را روی تمام فضا محاسبه کنید. آیا این انتگرالها برابر یک هستند؟ این نتایج را با نتایجی مقایسه کنید که برای یک سیستم از دو ذره قابل تشخیص از یکدیگر (هر دو اسپین $1/2$)، که یکی در حالت $|\varphi, +\rangle$ و دیگری در حالت $|\chi, -\rangle$ است، به دست می‌آید. فرض کنید وسیله‌ای که مکانهای ذرات را اندازه می‌گیرد قادر به تمیز بین دو ذره نیست. ب) حال فرض می‌کنیم که یک الکترون در حالت $|\varphi, +\rangle$ و الکترون دیگر در حالت $|\chi, +\rangle$ باشد. نشان دهید که در این صورت داریم

$$\rho_{II}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = |\varphi(\mathbf{r})\chi(\mathbf{r}') - \varphi(\mathbf{r}')\chi(\mathbf{r})|^2$$

$$\rho_I(\mathbf{r}) = |\varphi(\mathbf{r})|^2 + |\chi(\mathbf{r})|^2$$

مطلوب است محاسبه انتگرالهای $\rho_{II}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ و $\rho_I(\mathbf{r})$ در تمام فضا. اگر $|\varphi\rangle$ و $|\chi\rangle$ در \mathcal{E}_I متعامد نباشند، ρ_I و ρ_{II} چه تغییری می‌کنند؟ (ج) همین سوالات را برای دو بوزون یکسان، در یک حالت اسپین یکسان یا در دو حالت اسپین متعامد، پاسخ دهید.

۸. مقصود از این تمرین نشان دادن نکته زیر است: وقتی بردار حالت یک سیستم از N بوزون (یا فرمیون) یکسان به طور مناسبی متقارن (یا پادمقارن) شده باشد، لازم نیست، برای محاسبه احتمال هر نتیجه اندازه‌گیری، متقارن‌سازی (یا پادمقارن‌سازی) دیگری بر روی کتهای وابسته به آن اندازه‌گیری انجام دهیم. به عبارت دقیقتر، به شرط اینکه بردار حالت، متعلق به \mathcal{E}_S (یا \mathcal{E}_A) باشد، پیش‌بینیهای فیزیکی را می‌توانیم طوری محاسبه کنیم که گویی با سیستمی از ذرات قابل تمیز از یکدیگر سروکار داریم؛ این ذرات با وسایل اندازه‌گیری ناکاملی مطالعه می‌شوند که آنها را از یکدیگر تمیز نمی‌دهند. فرض کنید $|\psi\rangle$ بردار حالت سیستم N بوزون یکسان باشد (تمام بحث زیر برای فرمیونها نیز

صادق است) داریم

$$S|\psi\rangle = |\psi\rangle \quad (۱)$$

۱.

الف) فرض کنید $|\chi\rangle$ کت فیزیکی بهنجارشده وابسته به یک اندازه‌گیری باشد که در آن N بوزون در حالت‌های منفرد راست‌هنجار متفاوت $|u_\alpha\rangle, |u_\beta\rangle, \dots, |u_\nu\rangle$ باشند. نشان دهید که

$$|\chi\rangle = \sqrt{N!} S|1 : u_\alpha; 2 : u_\beta; \dots; N : u_\nu\rangle \quad (۲)$$

ب) نشان دهید که به علت خواص تقارنی $|\psi\rangle$ داریم

$$|\langle 1 : u_\alpha; 2 : u_\beta; \dots; N : u_\nu | \psi \rangle|^2 = |\langle i : u_\alpha; j : u_\beta; \dots; l : u_\nu | \psi \rangle|^2$$

که در آن i, j, \dots, l یک جایگشت اختیاری از اعداد $1, 2, \dots, N$ است.

ج) نشان دهید که احتمال یافتن سیستم در حالت $|\chi\rangle$ را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned} |\langle \chi | \psi \rangle|^2 &= N! |\langle 1 : u_\alpha; 2 : u_\beta; \dots; N : u_\nu | \psi \rangle|^2 \\ &= \sum_{\{i, j, \dots, l\}} |\langle i : u_\alpha; j : u_\beta; \dots; l : u_\nu | \psi \rangle|^2 \end{aligned}$$

که در آن، جمع‌بندی، بر روی تمام جایگشتهای اعداد $1, 2, \dots, N$ انجام می‌شود.

د) اکنون فرض کنید که ذرات، از یکدیگر قابل تمیزند، و حالت آنها توسط کت $|\psi\rangle$ توصیف می‌شود. احتمال اینکه یکی از آنها در حالت $|u_\alpha\rangle$ ، دیگری در حالت $|u_\beta\rangle, \dots$ ، آخری در حالت $|u_\nu\rangle$ باشد، چقدر است؟

از مقایسه با نتایج (ج)، نتیجه بگیرید که، برای ذرات یکسان، کافی است اصل موضوع مقارن‌سازی را بر بردار حالت $|\psi\rangle$ سیستم اعمال کنیم.

ه) اگر چند تا از حالت‌های منفرد تشکیل‌دهنده حالت $|\chi\rangle$ یکسان می‌بودند، بحث قبل چگونه تغییر می‌کرد؟ (برای سهولت، فقط موردی را در نظر بگیرید که در آن $N = 3$ است).

۲. (مشکلترا)

حال، مورد عامی را در نظر می‌گیریم، که در آن نتیجه اندازه‌گیری مورد نظر لزوماً با مشخص کردن حالت‌های منفرد تعریف نمی‌شود، زیرا ممکن است دیگر اندازه‌گیری کامل نباشد.

بر طبق اصول موضوع فصل ۱۴، برای محاسبه احتمال مربوط باید به طریق زیر عمل کنیم:

— قبل از هر چیز، ذرات را قابل تمیز از یکدیگر تلقی، و آنها را شماره‌گذاری می‌کنیم؛ در این صورت فضای حالت آنها \mathcal{E} است. سپس فرض می‌کنیم که \mathcal{E}_m ، زیرفضای \mathcal{E} ی وابسته به نتیجه اندازه‌گیری مورد نظر باشد، و اندازه‌گیری با وسایلی انجام شود که ذرات را از یکدیگر تمیز ندهد.

— با $|\psi_m\rangle$ که معرف یک کت اختیاری از \mathcal{E}_m است، مجموعه کتهای $S|\psi_m\rangle$ را می‌سازیم که یک فضای برداری \mathcal{E}_m^S تشکیل می‌دهند (\mathcal{E}_m^S تصویر \mathcal{E}_m روی \mathcal{E}^S است): اگر بُعد \mathcal{E}_m^S بیشتر از یک باشد، اندازه‌گیری کامل نیست.

— در این صورت، احتمال مورد نظر برابر است با مربع نرم تصویر متعامد کت $|\psi\rangle$ بر \mathcal{E}_m^S که حالت N ذره یکسان را توصیف می‌کند.

الف) اگر P_α یک عملگر جایگشت اختیاری از N ذره باشد، نشان دهید که با ساختن \mathcal{E}_m داریم

$$P_\alpha|\psi_m\rangle \in \mathcal{E}_m$$

نشان دهید که \mathcal{E}_m تحت عمل S کلاً ناورداست و \mathcal{E}_m محل تقاطع \mathcal{E}_m و \mathcal{E}^S است. (ب) یک پایه راست‌هتجار در \mathcal{E}_m می‌سازیم

$$\{|\varphi_m^1\rangle, |\varphi_m^2\rangle, \dots, |\varphi_m^k\rangle, |\varphi_m^{k+1}\rangle, \dots, |\varphi_m^p\rangle\}$$

که k بردار اول آن پایه‌ای از \mathcal{E}_m^S تشکیل می‌دهند. نشان دهید که کتهای $S|\varphi_m^n\rangle$ ، که در آن $k+1 \leq n \leq p$ است، باید ترکیبهای خطی k بردار اول این پایه باشند. با انجام حاصلضرب نرده‌ای آنها با براهای $\langle\varphi_m^k|, \dots, \langle\varphi_m^2|, \langle\varphi_m^1|$ ، نشان دهید که این کتهای $S|\varphi_m^n\rangle$ (با $n \geq k+1$) الزاماً صفرند.

ج) از نتایج قبلی نشان دهید که طبیعت تقارنی $|\psi\rangle$ ایجاب می‌کند که

$$\sum_{n=1}^p |\langle\varphi_m^n|\psi\rangle|^2 = \sum_{n=1}^k |\langle\varphi_m^n|\psi\rangle|^2$$

یعنی

$$\langle\psi|P_m^S|\psi\rangle = \langle\psi|P_m|\psi\rangle$$

که در آن P_m^S و P_m به ترتیب معرف تصویرکننده‌ها بر \mathcal{E}_m^S و \mathcal{E}_m هستند.

نتیجه: احتمالات نتایج اندازه‌گیری را می‌توان از تصویر کت $|\psi\rangle$ (متعلق به \mathcal{E}_S) بر یک ویژه زیرفضای \mathcal{E}_m که کتهای آن همگی به \mathcal{E}_S تعلق ندارند، ولی، در آن تمام ذرات نقشه‌های یکسان دارند، محاسبه کرد.

۹. توابع چگالی یک و دودزهای در یک گاز الکترونی در صفر مطلق

الف) سیستمی از N ذره $(1, 2, \dots, i, \dots, N)$ با اسپین یکسان s در نظر می‌گیریم. در آغاز، فرض می‌کنیم که ذرات یکسان نیستند. در فضای حالت $\mathcal{E}(i)$ ذره (i) ، کت $|i: \mathbf{r}_0, m\rangle$ نماینده حالتی است که در آن ذره (i) در نقطه \mathbf{r}_0 ، در حالت اسپین $|m\rangle$ ($m\hbar$: ویژه‌مقدار S_z)، جایگزیده است. عملگر زیر را در نظر می‌گیریم

$$F_m(\mathbf{r}_0) = \sum_{i=1}^N \left\{ |i: \mathbf{r}_0, m\rangle \langle i: \mathbf{r}_0, m| \otimes \prod_{j \neq i} I(j) \right\}$$

که در آن $I(j)$ عملگر همانی در فضای $\mathcal{E}(j)$ است.

فرض می‌کنیم $|\psi\rangle$ حالت سیستم N ذره‌ای باشد. نشان دهید که $\langle \psi | F_m(\mathbf{r}_0) | \psi \rangle d\tau$ مبین احتمال یافتن هر یک از ذرات در عنصر حجم بینهایت کوچک $d\tau$ ، متمرکز در \mathbf{r}_0 است، که مؤلفه اسپین آن برابر $m\hbar$ است. (ب) عملگر زیر را در نظر می‌گیریم

$$G_{mm'}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}'_0) = \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} \left\{ |i: \mathbf{r}_0, m; j: \mathbf{r}'_0, m'\rangle \langle i: \mathbf{r}_0, m; j: \mathbf{r}'_0, m'| \otimes \prod_{k \neq i, j} I(k) \right\}$$

معنی فیزیکی کمیت $\langle \psi | G_{mm'}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}'_0) | \psi \rangle d\tau d\tau'$ و $d\tau'$ حجمهای بینهایت کوچکی هستند، چیست؟

مقادیر متوسط $\langle \psi | F_m(\mathbf{r}_0) | \psi \rangle$ و $\langle \psi | G_{mm'}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}'_0) | \psi \rangle$ ، را به ترتیب، به صورت $\rho_m^I(\mathbf{r}_0)$ و $\rho_m^{II}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}'_0)$ می‌نویسیم و آنها را توابع چگالی یک و دودزهای سیستم N ذره‌ای می‌نامیم.

عبارتهای پیش، وقتی ذرات یکسان هستند، به شرط اینکه $|\psi\rangle$ بردار حالت سیستم باشد که به‌طور مناسب متقارن یا پادمتقارن شده است، معتبرند (تمرین پیش را ببینید).

۲.

سیستمی متشکل از N ذره را در حالت‌های منفرد بهنجارشده و متعامد $|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_N\rangle$ در نظر بگیرید.

بردار حالت بهنجارشده سیستم عبارت است از

$$|\psi\rangle = \sqrt{N!} T |1 : u_1; 2 : u_2; \dots; N : u_N\rangle$$

که در آن، T برای بوزونها متقارن ساز و برای فرمیونها پادمقارن ساز است. در این قسمت، می‌خواهیم مقادیر متوسط عملگرهای متقارن تک‌ذره‌ای از نوع

$$F = \sum_{i=1}^N \left\{ f(i) \otimes \prod_{j \neq i} I(j) \right\}$$

یا عملگرهای متقارن دودزده‌ای از نوع

$$G = \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} \left\{ g(i, j) \otimes \sum_{k \neq i, j} I(k) \right\}$$

را در حالت $|\psi\rangle$ محاسبه کنیم.

الف) نشان دهید که

$$\langle \psi | F | \psi \rangle = \langle 1 : u_1; 2 : u_2; \dots; N : u_N | \left[\sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} P_{\alpha} \right]$$

$$F | 1 : u_1; 2 : u_2; \dots; N : u_N \rangle$$

که در آن برای بوزونها $\varepsilon_{\alpha} = +1$ و برای فرمیونها، بسته به اینکه جایگشت P_{α} زوج یا فرد باشد، $\varepsilon_{\alpha} = +1$ یا $\varepsilon_{\alpha} = -1$ است.

نشان دهید که همین رابطه برای عملگر G نیز معتبر است.

ب) روابط زیر را به دست آورید

$$\langle \psi | F | \psi \rangle = \sum_{i=1}^N \langle i : u_i | f(i) | i : u_i \rangle$$

$$\langle \psi | G | \psi \rangle = \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} \{ \langle i : u_i ; j : u_j | g(i, j) | i : u_i ; j : u_j \rangle + \varepsilon \langle i : u_j ; j : u_i | g(i, j) | i : u_i ; j : u_j \rangle \}$$

که در آن، برای بوزنها $\varepsilon = +1$ و برای فرمیونها $\varepsilon = -1$ است.

۳.

حال می‌خواهیم نتایج قسمت II را بر عملگرهای $F_m(\mathbf{r}_o)$ و $G_{mm'}(\mathbf{r}_o, \mathbf{r}'_o)$ که در قسمت I معرفی کردیم، اعمال کنیم. سیستم فیزیکی تحت مطالعه، یک گاز از N الکترون آزاد و محبوس در جعبه‌ای مکعبی به ضلع L ، در صفر مطلق است (مکمل ۳ از فصل ۱۴، بخش ۱). با اعمال شرایط مرزی تناوبی، حالت‌های منفردی به شکل $|\varphi_{\mathbf{k}}|\pm\rangle$ به دست می‌آوریم، که در آن تابع موج وابسته به $(\varphi_{\mathbf{k}})$ ، یک موج تخت به صورت $1/L^{3/2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ است، و مؤلفه‌های \mathbf{k} در روابط (۲۶) از مکمل ۳ از فصل ۱۴ صدق می‌کنند. $E_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$ را انرژی فرمی سیستم و $\lambda_F = 2\pi / k_F$ را طول موج فرمی می‌نامیم.

الف) نشان دهید که دو تابع چگالی یک ذره‌ای $\rho_+^I(\mathbf{r}_o)$ و $\rho_-^I(\mathbf{r}_o)$ هر دو برابرند با

$$\rho_+^I(\mathbf{r}_o) = \rho_-^I(\mathbf{r}_o) = \sum_{\mathbf{k}} |\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_o)|^2$$

که در آن جمع‌بندی بر روی \mathbf{k} ، بر روی تمام مقادیر \mathbf{k} که دارای قدرمطلق کمتر از k_F هستند، و در شرایط مرزی تناوبی صدق می‌کنند، انجام می‌شود. با استفاده از بخش ۱ از مکمل ۳ فصل ۱۴، نشان دهید که

$$\rho_+^I(\mathbf{r}_o) = \rho_-^I(\mathbf{r}_o) = k_F^3 / 6\pi^2 = N / 2L^3$$

آیا این نتیجه می‌توانست به سادگی پیش‌بینی شود؟

ب) نشان دهید که دو تابع چگالی دوزره‌ای $\rho_{+-}^{II}(\mathbf{r}_o, \mathbf{r}'_o)$ و $\rho_{-+}^{II}(\mathbf{r}_o, \mathbf{r}'_o)$ هر دو برابرند با

$$\sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} |\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_o) \varphi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}'_o)|^2 = N^2 / 4L^6$$

که در آن جمع‌بندیهای بر روی \mathbf{k} و \mathbf{k}' مانند بالا تعریف می‌شوند. یک تعبیر فیزیکی بیان کنید.

ج) بالاخره، دو تابع چگالی دوزره‌ای $\rho_{++}^{\text{II}}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}'_0)$ و $\rho_{--}^{\text{II}}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}'_0)$ را در نظر بگیرید. ثابت کنید هر دو برابرند با

$$\sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}} \{ |\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_0) \varphi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}'_0)|^2 - \varphi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}'_0) \varphi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}_0) \varphi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}_0) \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}'_0) \}$$

نشان دهید که محدودیت $\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}$ را می‌توان حذف کرد، و اینکه دو تابع چگالی دوزره‌ای برابرند با

$$\frac{N^2}{4L^6} - \left| \sum_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}_0) \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}'_0) \right|^2 = \frac{N^2}{4L^6} [1 - C^2(k_F d)]$$

که در آن $d = |\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}'_0|$ ، و تابع $C(x)$ توسط رابطه زیر تعریف می‌شود

$$C(x) = \frac{3}{x^2} [\sin x - x \cos x]$$

($\sum_{\mathbf{k}}$ را می‌توان با یک انتگرال بر روی \mathbf{k} جانشین کرد).

توابع چگالی دوزره‌ای $\rho_{++}^{\text{II}}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}'_0)$ و $\rho_{--}^{\text{II}}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}'_0)$ نسبت به فاصله d بین \mathbf{r}'_0 و \mathbf{r}_0 چگونه تغییر می‌کنند؟ نشان دهید که عملاً نمی‌توان دو الکترون با یک اسپین را به فاصله‌ای خیلی کمتر از λ_F از یکدیگر، پیدا کرد.

پیوست الف

سری فوریه و تبدیلات فوریه

۱. سری فوریه

الف. توابع تناوبی

ب. بسط یک تابع تناوبی به سری فوریه

ج. رابطهٔ پسل-پارسوال

۲. تبدیلات فوریه

الف. تعاریف

ب. خواص ساده

ج. فرمول پارسوال-پلانشرل

د. مثالها

ه. تبدیلات فوریه در فضای سه‌بعدی

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 می‌گوییم در صورتی که یک عدد حقیقی غیر صفر مانند L وجود داشته باشد که به‌ازاء تمام x ها:

$$\boxed{f(x+L) = f(x)} \quad (۱)$$

L را دوره تناوب تابع $f(x)$ می‌نامند.

اگر $f(x)$ تابعی تناوبی با دوره تناوب L باشد، تمام اعداد nL ، که n عددی صحیح مثبت یا منفی است، نیز دوره تناوبهای $f(x)$ خواهند بود. دوره تناوب اصلی L_0 چنین تابعی، بنابر تعریف کوچکترین دوره تناوب مثبت آن است (اصطلاح "دوره تناوب" در فیزیک اغلب به همان دوره تناوب اصلی تابع اطلاق می‌شود).

یادداشت:

می‌توانیم تابعی مانند $f(x)$ را که فقط در فاصله متناهی $[a, b]$ از محور حقیقی تعریف شده است در نظر بگیریم و تابعی مانند $f_p(x)$ بسازیم که در داخل $[a, b]$ برابر با $f(x)$ و با دوره تناوب $(b-a)$ ، تناوبی باشد $f_p(x)$ در صورتی پیوسته است که $f(x)$ پیوسته باشد و داشته باشیم

$$f(b) = f(a) \quad (۲)$$

می‌دانیم که توابع مثلثاتی تناوبی‌اند. بخصوص:

$$\cos 2\pi \frac{x}{L} \quad \text{و} \quad \sin 2\pi \frac{x}{L} \quad (۳)$$

دارای دوره تناوبهای اصلی برابر با L هستند.

از جمله مثالهای مخصوصاً مهم توابع تناوبی، توابع نمایی تناوبی‌اند. شرط لازم و کافی برای اینکه تابع نمایی $e^{\alpha x}$ دارای دوره تناوب L باشد، بنابر تعریف (۱)، این است که:

$$e^{\alpha L} = ۱ \quad (۴)$$

یعنی:

$$\alpha L = 2in\pi \quad (۵)$$

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 $n \neq p$ برابر صفر و به‌ازاء $n = p$ برابر L است. از این‌رو همان فرمول (۱۰) به‌دست می‌آید. به‌آسانی می‌توان نشان داد که مقدار به‌دست آمده برای c_n مستقل از عدد 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:

$$\left. \begin{aligned} a_0 &= c_0 \\ a_n &= c_n + c_{-n} \\ b_n &= i(c_n - c_{-n}) \end{aligned} \right\} n > 0 \quad (15)$$

بنابراین فرمولهایی را که ضرایب a_n و b_n را می دهند می توان از فرمول (۱۰) به دست آورد:

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{1}{L} \int_{x_0}^{x_0+L} dx f(x) \\ a_n &= \frac{2}{L} \int_{x_0}^{x_0+L} dx f(x) \cos k_n x \\ b_n &= \frac{2}{L} \int_{x_0}^{x_0+L} dx f(x) \sin k_n x \end{aligned} \quad (۱۶)$$

اگر $f(x)$ پاریته معینی داشته باشد. بسط (۱۴) مخصوصاً راحت است، زیرا:

$$\begin{aligned} b_n &= 0 \quad \text{اگر } f(x) \text{ زوج باشد} \\ a_n &= 0 \quad \text{اگر } f(x) \text{ فرد باشد} \end{aligned} \quad (۱۷)$$

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 می توان نشان داد که:

$$\frac{1}{L} \int_{x_0}^{x_0+L} dx |f(x)|^2 = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |c_n|^2 \quad (۱۸)$$

این مطلب را می توان با استفاده از معادله (۸) نشان داد:

$$\frac{1}{L} \int_{x_0}^{x_0+L} dx |f(x)|^2 = \sum_{n,p} c_p^* c_n \frac{1}{L} \int_{x_0}^{x_0+L} dx e^{i(k_n - k_p)x} \quad (۱۹)$$

نظیر (۱)، انتگرال طرف راست برابر است با $L \delta_{np}$ ، که رابطه (۱۸) را اثبات می کند.

وقتی بسط (۱۴) را به کار می بریم، رابطه بسل-پارسوال (۱۸) را می توانیم به صورت زیر نیز

بنویسیم:

$$\frac{1}{L} \int_{x_0}^{x_0+L} dx |f(x)|^2 = |a_0|^2 + \frac{1}{4} \sum_{n=1}^{\infty} [|a_n|^2 + |b_n|^2] \quad (۲۰)$$

اگر دو تابع $f(x)$ و $g(x)$ با دوره تناوبهای یکسان L داشته باشیم، که ضرایب فوریه آنها به ترتیب c_n و d_n باشد، رابطه (۱۸) را می‌توانیم به صورت زیر تعمیم دهیم:

$$\frac{1}{L} \int_{x_0}^{x_0+L} dx g^*(x) f(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} d_n^* c_n \quad (21)$$

۲. تبدیلات فوریه

الف. تعاریف

۱. انتگرال فوریه به عنوان حد یک سری فوریه

حال، یک تابع $f(x)$ را که الزاماً تناوبی نیست، در نظر بگیرید. تابع تناوبی $f_L(x)$ با دوره تناوب L را طوری تعریف می‌کنیم که در فاصله $[-L/2, L/2]$ برابر $f(x)$ باشد. $f_L(x)$ را می‌توان به یک سری فوریه بسط داد:

$$f_L(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n e^{ik_n x} \quad (22)$$

که، k_n با فرمول (۹) تعریف می‌شود، و:

$$c_n = \frac{1}{L} \int_{x_0}^{x_0+L} dx e^{-ik_n x} f_L(x) = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{+L/2} dx e^{-ik_n x} f(x) \quad (23)$$

وقتی L به بینهایت می‌گراید، $f_L(x)$ به $f(x)$ تبدیل می‌شود. از این رو در عبارات فوق، L را به بینهایت میل می‌دهیم.

به این ترتیب، بنابر تعریف (۹) برای k_n داریم:

$$k_{n+1} - k_n = \frac{2\pi}{L} \quad (24)$$

حال در رابطه (۲۳) به جای $1/L$ عبارت آن را 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، همان‌طور که در مکانیک کوانتومی متداول است، به جای تعریف مرسوم (۲۶)، تعریف (۲۸) تبدیل فوری را به کار خواهیم برد. علاوه بر این، برای اینکه به تعریف اخیر برگردیم کافی است که در تمامی روابط بعدی، \hbar را با \hbar و p را با \hbar جایگزین کنیم.

ب. خواص ساده

روابط (۲۸) و (۲۹) را در نمادگذاری فشرده به صورت زیر بیان می‌کنیم:

$$\bar{\psi}(p) = \mathcal{F}[\psi(x)] \quad (\text{الف-۳۲})$$

$$\psi(p) = \overline{\mathcal{F}[\bar{\psi}(p)]} \quad (\text{ب-۳۲})$$

خواص زیر را می‌توان به سهولت ثابت کرد:

$$(I) \quad \bar{\psi}(p) = \mathcal{F}[\psi(x)] \implies \bar{\psi}(p - p_0) = \mathcal{F}[e^{ip_0 x/\hbar} \psi(x)] \quad (33)$$

$$e^{-ip_0 x/\hbar} \bar{\psi}(p) = \mathcal{F}[\psi(x - x_0)]$$

این مطلب، مستقیماً از تعریف (۲۸) نتیجه می‌شود.

$$(II) \quad \bar{\psi}(p) = \mathcal{F}[\psi(x)] \implies \mathcal{F}[\psi(cx)] = \frac{1}{|c|} \bar{\psi}\left(\frac{p}{c}\right) \quad (34)$$

برای پی بردن به این خاصیت، کافی است متغیر انتگرال‌گیری را به صورت زیر تغییر دهیم:

$$u = cx \quad (35)$$

بخصوص

$$\mathcal{F}[\psi(-x)] = \bar{\psi}(-p) \quad (36)$$

بنابراین، اگر تابع $\psi(x)$ پاریته معینی داشته باشد، تبدیل فوری آن نیز همان پاریته را خواهد داشت.

$$(III) \quad \psi(x) \quad \text{حقیقی} \quad \leftrightarrow \quad \overline{[\bar{\psi}(p)]^*} = \bar{\psi}(-p) \quad (\text{الف-۳۷})$$

$$\psi(x) \quad \text{موهومی محض} \quad \leftrightarrow \quad \overline{[\bar{\psi}(p)]^*} = -\bar{\psi}(-p) \quad (\text{ب-۳۷})$$

این عبارتها در صورت جابه‌جایی ψ و $\bar{\psi}$ نیز معتبرند.

(IV) اگر $f^{(n)}$ معرف مشتق مرتبه n تابع f باشد، مشتق‌گیرهای متوالی در داخل جمع‌بندی، بنا بر (۲۸) و (۲۹)، نتیجه می‌دهد:

$$\mathcal{F}[\psi^{(n)}(x)] = \left(\frac{ip}{\hbar}\right)^n \bar{\psi}(p) \quad (\text{الف-۳۸})$$

$$\bar{\psi}^{(n)}(p) = \mathcal{F}\left[\left(-\frac{ix}{\hbar}\right)^n \psi(x)\right] \quad (\text{ب-۳۸})$$

پیش از 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 قله‌ای با پهنای Δx باشد، پهنای Δp ی $\bar{\psi}(p)$ در رابطه زیر صدق

می‌کند:

$$\Delta x \cdot \Delta p \gtrsim \hbar \quad (۴۴)$$

تحلیل این نامساوی را در بخش ۲ فصل ۱ و مکمل C_{III} را ببینید.

ج. فرمول پارسوال-پلانشرل

هنجار یک تابع و تبدیل فوریه آن یکسان است:

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x)|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dp |\bar{\psi}(p)|^2} \quad (45)$$

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:

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} dx \varphi^*(x) \psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \bar{\varphi}^*(p) \bar{\psi}(p)} \quad (47)$$

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، پهنای Δx و Δp را می‌توان به ترتیب برای $\psi(x)$ و $\bar{\psi}(p)$ تعریف کرد، و اینها، نامساوی (۴۴) را تأیید می‌کنند.

۵. تبدیلات فوریه در فضای سه‌بعدی

برای توابع موج $\psi(\mathbf{r})$ که به سه متغیر فضایی x, y, z بستگی دارند. (۲۸) و (۲۹) توسط روابط زیر جایگزین می‌شوند:

$$\bar{\psi}(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \psi(\mathbf{r}) \quad (51\text{-الف})$$

$$\bar{\psi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \bar{\psi}(\mathbf{p}) \quad (51\text{-ب})$$

خواص مذکور در بالا (بخشهای ۲-b و ۲-c در جلد اول فارسی) را می‌توان به آسانی به سه بعد تعمیم داد.

اگر ψ فقط به مدول بردار شعاع \mathbf{r} ، یعنی به r ، بستگی داشته باشد، $\bar{\psi}$ فقط به مدول p تکانه \mathbf{p} بستگی خواهد داشت و می‌توان آن را از رابطه زیر محاسبه کرد:

$$\bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{2}{p} \int_0^\infty r dr \sin \frac{pr}{\hbar} \psi(r) \quad (52)$$

ابتدا، با استفاده از (۵۱-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 ψ بدون تغییر می ماند، زیرا مدول \mathbf{r}' با r برابر می ماند؛ بالاخره:

$$\mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}' = \mathbf{p} \cdot \mathbf{r} \quad (57)$$

زیرا حاصلضرب اسکالر بر اثر دوران ناورداست. به این ترتیب به دست می آوریم:

$$\bar{\psi}(\mathbf{p}') = \bar{\psi}(\mathbf{p}) \quad (58)$$

یعنی، $\bar{\psi}$ فقط به مدول \mathbf{p} بستگی دارد و مستقل از جهت آن است. پس می توانیم \mathbf{p} را در امتداد Oz انتخاب، و $\bar{\psi}(\mathbf{p})$ را محاسبه کنیم:

$$\begin{aligned} \bar{\psi}(\mathbf{p}) &= \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^{3/2}} \int d^3 r e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \psi(r) \\ &= \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^{3/2}} \int_0^\infty r^2 dr \psi(r) \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin\theta e^{-ipr \cos\theta/\hbar} \\ &= \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^{3/2}} \int_0^\infty r^2 dr \psi(r) 2\pi \frac{\sqrt{\hbar}}{pr} \sin \frac{pr}{\hbar} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{2}{p} \int_0^\infty r dr \psi(r) \sin \frac{pr}{\hbar} \end{aligned} \quad (59)$$

که (۲۵) را اثبات می کند.

مراجع برای مطالعه بیشتر

See, for example, Arfken (10.4), chaps.14 and 15, or Butkov (10.8), chaps. 4 and 7; Bass (10.1), vol. I, chaps. XVIII through XX; section 10 of the bibliography, especially the subsection "Fourier transforms; distributions".

پیوست ب

”تابع“ δ ی دیراک

۱. مقدمه: خواص اصلی
الف. آشنایی با ”تابع“ δ
ب. توابعی که به δ میل می‌کنند
ج. خواص δ
۲. ”تابع“ δ و تبدیل فوریه
الف. تبدیل فوریه δ
ب. کاربردها
۳. انتگرال و مشتقهای ”تابع“ δ
الف. δ به عنوان مشتق ”تابع پله‌ای واحد“
ب. مشتقهای δ
۴. ”تابع“ δ در فضای سه‌بعدی

تابع δ ، در واقع، یک توزیع است. معذک، مانند اغلب فیزیکدانها، آن را مانند یک تابع معمولی در نظر خواهیم گرفت. این روش، هر چند از نظر ریاضی دقیق نیست، ولی برای کاربردهای کوانتوم مکانیکی کافی است.

۱. مقدمه: خواص اصلی

الف. آشنایی با "تابع" δ تابع $\delta^{(\varepsilon)}(x)$ را که به صورت زیر داده می شود در نظر بگیرید (شکل ۱):

$$\delta^{(\varepsilon)}(x) = \frac{1}{\varepsilon} \quad \text{برای} \quad -\frac{\varepsilon}{2} < x < \frac{\varepsilon}{2}$$

$$= 0 \quad \text{برای} \quad |x| > \frac{\varepsilon}{2} \quad (1)$$

که ε عددی مثبت است. انتگرال زیر را برآورد می کنیم:

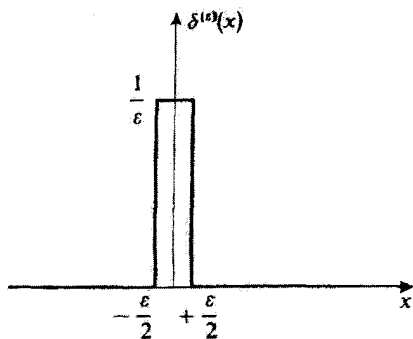
$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta^{(\varepsilon)}(x) f(x) \quad (2)$$

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 $[-\varepsilon/2, \varepsilon/2]$ ناچیز است و $f(x)$ عملاً برابر $f(0)$ می ماند. از این رو:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta^{(\varepsilon)}(x) f(x) \simeq f(0) \int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta^{(\varepsilon)}(x) = f(0) \quad (3)$$

هر چه ε کوچکتر باشد، این تقریب بهتر است. از این رو حد $\varepsilon = 0$ 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 $\delta^{(\varepsilon)}(x)$: تابعی مربعی با پهنای ε و ارتفاع $1/\varepsilon$ ، متمرکز در $x = 0$.

که برای هر تابع $f(x)$ که در مبدأ تعریف شده باشد معتبر است. به طور عامتر، $\delta(x - x_0)$ را به این صورت تعریف می‌کنیم:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x - x_0) f(x) = f(x_0) \quad (5)$$

یادداشت:

۱. در واقع، نمادگذاری انتگرالی در (۵) از نظر ریاضی موجه نیست. δ دقیقاً به صورت یک توزیع تعریف شده است نه به صورت یک تابع. از نظر فیزیکی، این تمایز، اساسی نیست چون به محض اینکه ε در مقایسه با تمام فواصل دخیل در یک مسئله فیزیکی مفروض، قابل اغماض شود، غیرممکن است که بتوان بین $\delta(x)$ و $\delta^{(\varepsilon)}(x)$ فرض گذاشت*: هر تابع $f(x)$ که در نظر بگیریم، در فاصله طولی ε تغییر عمده‌ای نمی‌کند. در صورت بروز اشکال ریاضی، کافی است فرض کنیم که $\delta(x)$ در واقع همان $\delta^{(\varepsilon)}(x)$ [یا تابعی مشابه ولی منظمتر، مثلاً یکی از توابع داده شده در (۷)، (۸)، (۹)، (۱۰)، (۱۱)] است، که در آن ε فوق‌العاده کوچک است ولی دقیقاً صفر نیست.
۲. برای حدود انتگرال‌گیری دلخواه a و b ، داریم:

$$\int_a^b dx \delta(x) f(x) = f(\circ) \quad \text{اگر } \circ \in [a, b]$$

$$= 0 \quad \text{اگر } \circ \notin [a, b] \quad (6)$$

ب. توابعی که به δ میل می‌کنند

به آسانی می‌توان نشان داد که، علاوه بر $\delta^{(\varepsilon)}(x)$ که توسط (۱) تعریف کردیم، توابع زیر نیز، وقتی پارامتر ε از طرف مثبت به سمت صفر میل کند، به $\delta(x)$ میل می‌کنند، یعنی در (۵) صدق می‌کنند:

$$(i) \quad \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} e^{-|x|/\varepsilon} \quad (7)$$

$$(ii) \quad \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} \quad (8)$$

$$(iii) \quad \frac{1}{\varepsilon\sqrt{\pi}} e^{-a^2/\varepsilon^2} \quad (9)$$

* 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.

$$(iv) \quad \frac{1}{\pi} \frac{\sin\left(\frac{x}{\varepsilon}\right)}{x} \quad (10)$$

$$(v) \quad \frac{\varepsilon}{\pi} \frac{\sin^{\gamma}\left(\frac{x}{\varepsilon}\right)}{x^{\gamma}} \quad (11)$$

همچنین اتحادی را ذکر می‌کنیم که اغلب در مکانیک کوانتومی (بخصوص در نظریه برخورد) مفید است:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \mathcal{P} \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x) \quad (12)$$

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:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x dx}{x^2 + \varepsilon^2} f(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left[\int_{-\infty}^{-\eta} + \int_{-\eta}^{+\eta} + \int_{+\eta}^{+\infty} \right] \frac{x dx}{x^2 + \varepsilon^2} f(x) \quad (16)$$

انتگرال دوم صفر است:

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\eta}^{+\eta} \frac{x dx}{x^2 + \varepsilon^2} f(x) = f(0) \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\eta} [\text{Log}(x^2 + \varepsilon^2)]_{-\eta}^{+\eta} = 0 \quad (17)$$

حال اگر ترتیب محاسبه حدها را در (۱۶) عوض کنیم، حد $\varepsilon \rightarrow 0$ هیچ اشکالی در دو انتگرال دیگر به وجود نمی‌آورد. بنابراین:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x dx}{x^2 + \varepsilon^2} f(x) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left[\int_{-\infty}^{-\eta} + \int_{+\eta}^{+\infty} \right] \frac{dx}{x} f(x) \quad (18)$$

که اتحاد (۱۲) را برقرار می‌سازد.

ج. خواص δ

خواصی را که اکنون بیان خواهیم کرد می‌توان با استفاده از (δ) 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.

$$(i) \quad \delta(-x) = \delta(x) \quad (19)$$

$$(ii) \quad \delta(cx) = \frac{1}{|c|} \delta(x) \quad (20)$$

و به طور کلیتر:

$$\delta[g(x)] = \sum_j \frac{1}{|g'(x_j)|} \delta(x - x_j) \quad (21)$$

که $g'(x)$ ، مشتق $g(x)$ است و x_j ها صفرهای ساده تابع $g(x)$ هستند:

$$\begin{aligned} g(x_j) &= 0 \\ g'(x_j) &\neq 0 \end{aligned} \quad (22)$$

جمع‌بندی، روی تمام صفرهای ساده $g(x)$ انجام می‌گیرد. اگر $g(x)$ دارای چندین صفر باشد [که، برای آنها $g'(x_j)$ نیز صفر است]، عبارت $\delta[g(x)]$ بی‌معناست.

$$(iii) \quad x\delta(x - x_0) = x_0\delta(x - x_0) \quad (23)$$

و بخصوص:

$$x\delta(x) = 0 \quad (24)$$

عکس آن نیز درست است و می‌توان نشان داد که معادله:

$$x u(x) = 0 \quad (25)$$

دارای جواب عمومی زیر است:

$$u(x) = c\delta(x) \quad (26)$$

که در آن c یک ثابت دلخواه است.

به‌طور عمومیتر:

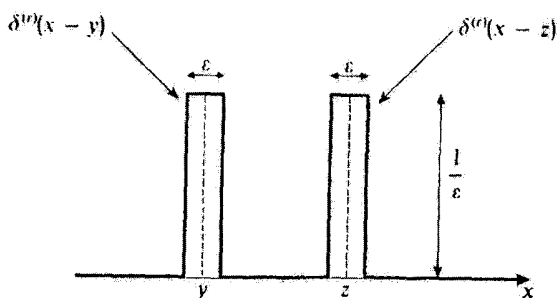
$$g(x)\delta(x - x_0) = g(x_0)\delta(x - x_0) \quad (27)$$

$$(iv) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x - y)\delta(x - z) = \delta(y - z) \quad (28)$$

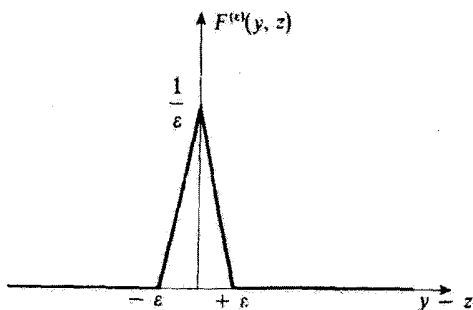
معادله (28) را می‌توان با بررسی توابع $\delta^{(\epsilon)}(x)$ مانند تابع نشان داده شده در شکل ۱، درک کرد.

انتگرال:

$$F^{(\epsilon)}(y, z) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta^{(\epsilon)}(x - y)\delta^{(\epsilon)}(x - z) \quad (29)$$



شکل ۲. توابع $\delta^{(\epsilon)}(x-y)$ و $\delta^{(\epsilon)}(x-z)$: دو تابع مربعی با پهنای ϵ و ارتفاع $1/\epsilon$ ، که به ترتیب در $x=y$ و $x=z$ متمرکزند.



شکل ۳. تغییرات حاصلضرب اسکالر $F^{(\epsilon)}(y, z)$ دو تابع مربعی نمایش یافته در شکل ۲، نسبت به $y-z$. این حاصلضرب وقتی دو تابع همپوشی نکنند ($|y-z| \geq \epsilon$)، صفر و وقتی بر هم منطبق باشند ماکزیمم است. وقتی $\epsilon \rightarrow 0$ ، $F^{(\epsilon)}(y, z)$ به $\delta(y-z)$ میل می‌کند.

مادامی که $|y-z| < \epsilon$ ، یعنی، مادامی که دو تابع مربعی همپوشی نکنند (شکل ۲)، صفر است. ماکزیمم مقدار انتگرال، که به ازاء $y=z$ به دست می‌آید، برابر است با $1/\epsilon$. تغییرات $F^{(\epsilon)}(y, z)$ نسبت به $y-z$ بین این مقدار ماکزیمم و صفر، خطی است (شکل ۳). بلافاصله می‌بینیم که وقتی $\epsilon \rightarrow 0$ ، $F^{(\epsilon)}(y, z)$ به $\delta(y-z)$ میل می‌کند.

یادداشت:

مجموع توابع δ یی که به فواصل منظم از یکدیگر قرار دارند:

$$\sum_{q=-\infty}^{+\infty} \delta(x - qL) \quad (30)$$

می‌توان به‌عنوان یک "تابع" تناوبی با دوره تناوب L در نظر گرفت. با به‌کار بردن فرمولهای (۸) و (۹) و (۱۰) پیوست I، می‌توانیم این مجموع را به‌صورت زیر بنویسیم:

$$\sum_{q=-\infty}^{+\infty} \delta(x - qL) = \frac{1}{L} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{i2\pi nx/L} \quad (۳۱)$$

۲. "تابع" δ و تبدیل فوریه

الف. تبدیل فوریه δ

تعریف (۲۸) پیوست I و معادله (۵) ما را قادر می‌سازند تا مستقیماً تبدیل فوریه $\bar{\delta}_{x_0}(p)$ $\delta(x - x_0)$ را محاسبه کنیم:

$$\bar{\delta}_{x_0}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ipx/\hbar} \delta(x - x_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx_0/\hbar} \quad (۳۲)$$

بخصوص، تبدیل فوریه $\delta(x)$ یک مقدار ثابت است:

$$\bar{\delta}_{x_0}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad (۳۳)$$

سپس تبدیل فوریه عکس [فرمول (۲۹) پیوست I] می‌دهد:

$$\delta(x - x_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{ip(x-x_0)/\hbar} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{ik(x-x_0)} \quad (۳۴)$$

این نتیجه را می‌توان با به‌کار 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، به‌دست آورد. مثلاً رابطه (۴۸) پیوست I ما را قادر می‌سازد تا بنویسیم:

$$\delta^{(\epsilon)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{ipx/\hbar} \frac{\sin\left(\frac{p\epsilon}{\sqrt{2}\hbar}\right)}{\frac{p\epsilon}{\sqrt{2}\hbar}} \quad (۳۵)$$

اگر ϵ را به سمت صفر میل دهیم، یقیناً به رابطه (۳۴) می‌رسیم.

ب. کاربردها

عبارت (۳۴) برای تابع δ ، اغلب اوقات بسیار مناسب است. مثلاً نشان خواهیم داد که این عبارت

چگونه یافتن تبدیل فوریه عکس و رابطه پارسوال-پلانشرل [فرمولهای (۲۹) و (۴۵) پیوست I] را ساده 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:

$$|\bar{\psi}(p)|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{ipx/\hbar} \psi^*(x) \int_{-\infty}^{+\infty} dx' e^{-ipx'/\hbar} \psi(x') \quad (۳۹)$$

اگر از این عبارت روی p انتگرال بگیریم، خواهیم داشت:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp |\bar{\psi}(p)|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \psi(x') \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{ip(x-x')/\hbar} \quad (۴۰)$$

یعنی، 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 پیشی [فرمولهای (۳۹) و (۴۰)]

پیوست I] را به‌دست آورد.

۳. انتگرال و مشتقهای "تابع" δ الف. δ ، به عنوان مشتق "تابع پله‌ای واحد"

انتگرال زیر را برآورد می‌کنیم:

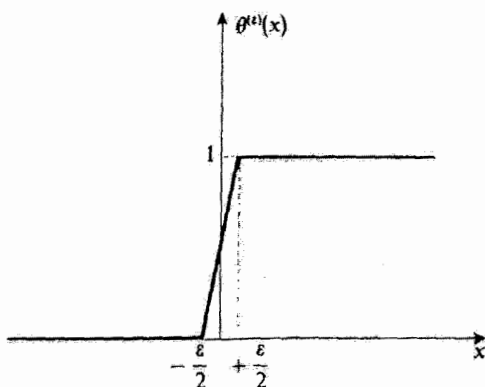
$$\theta^{(\varepsilon)}(x) = \int_{-\infty}^x \delta^{(\varepsilon)}(x') dx' \quad (42)$$

که تابع $\delta^{(\varepsilon)}(x)$ در (۱) تعریف شده است. به آسانی می‌توان دید که $\theta^{(\varepsilon)}(x)$ ، به ازاء $x \leq -\varepsilon/2$ برابر صفر به ازاء $x \geq \varepsilon/2$ برابر ۱، و به ازاء $-\varepsilon/2 \leq x \leq \varepsilon/2$ برابر $1/\varepsilon(x + \varepsilon/2)$ است. تغییرات $\theta^{(\varepsilon)}(x)$ را نسبت به x در شکل ۴ نشان داده‌ایم. وقتی $\varepsilon \rightarrow 0$ ، $\theta^{(\varepsilon)}(x)$ به سمت "تابع پله‌ای" هویساید $\theta(x)$ میل می‌کند، که 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 $\delta(x)$ مشتق $\theta(x)$ است:

$$\frac{d}{dx} \theta(x) = \delta(x) \quad (44)$$



شکل ۴. تغییرات تابع $\theta^{(\varepsilon)}(x)$ ، که مشتق آن، $\delta^{(\varepsilon)}(x)$ ، در شکل ۱ نشان داده شده است. وقتی $\varepsilon \rightarrow 0$ ، $\theta^{(\varepsilon)}(x)$ به سمت تابع پله‌ای هویساید $\theta(x)$ میل می‌کند.

حال، یک تابع $g(x)$ را در نظر بگیرید که در $x = 0$ دارای ناپیوستگی σ_0 باشد:

$$\lim_{x \rightarrow 0^+} g(x) - \lim_{x \rightarrow 0^-} g(x) = \sigma_0 \quad (45)$$

چنین تابعی را می توان 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 پیوسته ای هستند که در رابطه $g_1(0) - g_2(0) = \sigma_0$ صدق می کنند. اگر با استفاده از (۴۴)، از این عبارت مشتق بگیریم، بنابر خواص (۱۹) و (۲۷) از δ ، به دست می آوریم:

$$\begin{aligned} g'(x) &= g'_1(x)\theta(x) + g'_2(x)\theta(-x) + g_1(x)\delta(x) - g_2(x)\delta(-x) \\ &= g'_1(x)\theta(x) + g'_2(x)\theta(-x) + \sigma_0 \delta(x) \end{aligned} \quad (46)$$

یعنی، برای یک تابع ناپیوسته، به مشتق معمولی [دو جمله اول (۴۶)]، جمله ای متناسب با تابع δ افزوده می شود، که ضریب تناسب، عبارت از مقدار ناپیوستگی تابع است.*

یادداشت:

تبدیل فوریه تابع پله ای $\theta(k)$ را می توان به آسانی از (۱۲) به دست آورد. خواهیم داشت:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \theta(k) e^{ikx} dk = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_0^{\infty} dk e^{ik(x+i\epsilon)} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{i}{x+i\epsilon} = i \mathcal{P} \frac{1}{x} + \pi \delta(x) \quad (47)$$

ب. مشتقهای δ

با مقایسه با عبارت انتگرال گیری جزء به جزء، مشتق تابع δ ، $\delta'(x)$ ، توسط رابطه زیر تعریف می شود**

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta'(x) f(x) = - \int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x) f'(x) = -f'(0) \quad (48)$$

* البته، اگر تابع در $x = x_0$ ناپیوسته باشد، جمله اضافی به صورت زیر است:

$$[g_1(x_0) - g_2(x_0)] \delta(x - x_0)$$

** $\delta'(x)$ را می توان به عنوان حد مشتق یکی از توابع داده شده در بخش ۱-b، در جلد اول فارسی به ازاء $\epsilon \rightarrow 0$ ، در نظر گرفت.

از این تعریف، بلافاصله داریم:

$$\delta'(-x) = -\delta'(x) \quad (۴۹)$$

و

$$x\delta'(x) = -\delta(x) \quad (۵۰)$$

برعکس، می‌توان نشان داد که جواب عمومی معادله:

$$xu(x) = \delta(x) \quad (۵۱)$$

را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$u(x) = -\delta'(x) + c\delta(x) \quad (۵۲)$$

که در آن جمله دوم، از معادله همگن حاصل می‌شود [فرمولهای (۲۵) و (۲۶)]. معادله (۳۴) به ما امکان می‌دهد که $\delta'(x)$ را به صورت زیر بنویسیم:

$$\delta'(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \left(\frac{ip}{\hbar} \right) e^{ipx/\hbar} = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} k dk e^{ikx} \quad (۵۳)$$

مشتق مرتبه n ام، $\delta^{(n)}(x)$ ، را می‌توان به همین طریق تعریف کرد:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta^{(n)}(x) f(x) = (-1)^n f^{(n)}(0) \quad (۵۴)$$

روابط (۴۹) و (۵۰) را می‌توانیم به شکل‌های زیر تعمیم دهیم:

$$\delta^{(n)}(-x) = (-1)^n \delta^{(n)}(x) \quad (۵۵)$$

و

$$x\delta^{(n)}(x) = -n\delta^{(n-1)}(x) \quad (۵۶)$$

۴. "تابع" δ در فضای سه بعدی

"تابع" δ در فضای سه بعدی، که آن را به صورت δ(r) می نویسیم توسط عبارتی مشابه با (۴) تعریف می شود:

$$\int d^3r \delta(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{0}) \quad (57)$$

و به طور عمومیتر:

$$\int d^3r \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}_0) \quad (58)$$

δ(r - r₀) را می توان به حاصلضرب سه تابع یک بعدی تجزیه کرد:

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(z - z_0) \quad (59)$$

یا، اگر از مختصات قطبی استفاده کنیم:

$$\begin{aligned} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) &= \frac{1}{r^2 \sin \theta} \delta(r - r_0) \delta(\theta - \theta_0) \delta(\varphi - \varphi_0) \\ &= \frac{1}{r^2} \delta(r - r_0) \delta(\cos \theta - \cos \theta_0) \delta(\varphi - \varphi_0) \end{aligned} \quad (60)$$

از این رو خواصی که در بالا برای δ(x) بیان کردیم، به آسانی برای δ(r) نیز قابل تعمیم اند. علاوه بر این، رابطه مهم زیر را ذکر می کنیم:

$$\Delta \left(\frac{1}{r} \right) = -4\pi \delta(\mathbf{r}) \quad (61)$$

که در آن Δ، عملگر لاپلاسی است.

اگر به خاطر آوریم که در الکتروستاتیک، بار الکتریکی نقطه‌ای q واقع در مبدأ را می توان توسط یک چگالی حجمی ρ(r) به صورت

$$\rho(\mathbf{r}) = q\delta(\mathbf{r}) \quad (62)$$

توصیف کرد، معادله (61) را می توان به آسانی فهمید می دانیم که پتانسیل الکتروستاتیکی ایجاد شده توسط این بار عبارت است از:

$$U(\mathbf{r}) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \quad (63)$$

بنابراین، معادله (۶۱) همان معادله پواسن، برای این مورد خاص، است:

$$\Delta U(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\epsilon_0} \rho(\mathbf{r}) \quad (۶۴)$$

برای اثبات دقیق (۶۱)، لازم است که از نظریهٔ توزیع ریاضی استفاده کنیم. در اینجا مطالعهٔ خود را به یک "اثبات" مقدماتی محدود خواهیم ساخت.

قبل از هر چیز توجه کنید که لاپلاسی $1/r$ همه جا به جز، شاید در مبدأ، که نقطه‌ای تکیه است، صفر است:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) \frac{1}{r} = 0 \quad \text{برای} \quad r \neq 0 \quad (۶۵)$$

فرض کنید $g_\epsilon(\mathbf{r})$ تابعی باشد که وقتی \mathbf{r} در خارج کرهٔ S_ϵ ، به مرکز O و شعاع ϵ ، است، برابر $1/r$ ، و وقتی \mathbf{r} در داخل این کره است، دارای مقادیری (از مرتبهٔ $1/\epsilon$) 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:

$$I(\epsilon) = \int d^3r f(\mathbf{r}) \Delta g_\epsilon(\mathbf{r}) \quad (۶۶)$$

را به‌ازاء $\epsilon \rightarrow 0$ ، پیدا می‌کنیم. بنابر (۶۵)، این انتگرال می‌تواند فقط سهمهایی از داخل کرهٔ S_ϵ دریافت دارد، و:

$$I(\epsilon) = \int_{r \leq \epsilon} d^3r f(\mathbf{r}) \Delta g_\epsilon(\mathbf{r}) \quad (۶۷)$$

ϵ را آن قدر کوچک انتخاب می‌کنیم که تغییرات $f(\mathbf{r})$ در داخل S_ϵ ناچیز باشد. در این صورت:

$$I(\epsilon) \simeq f(0) \int_{r \leq \epsilon} d^3r \Delta g_\epsilon(\mathbf{r}) \quad (۶۸)$$

با تبدیل انتگرالی که به این ترتیب به‌دست می‌آید، به انتگرالی روی سطح \mathcal{S}_ϵ کرهٔ S_ϵ ، به‌دست می‌آوریم:

$$I(\epsilon) \simeq f(0) \int_{\mathcal{S}_\epsilon} \nabla g_\epsilon(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{n} \quad (۶۹)$$

حال، چون $g_\epsilon(\mathbf{r})$ روی سطح \mathcal{S}_ϵ پیوسته است، داریم:

$$[\nabla g_\epsilon(\mathbf{r})]_{r=\epsilon} = \left[-\frac{1}{r^2} \right]_{r=\epsilon} \mathbf{e}_r = -\frac{1}{\epsilon^2} \mathbf{e}_r \quad (۷۰)$$

(که \mathbf{e}_r بردار یکهٔ \mathbf{r}/r است). از اینجا حاصل می‌شود:

$$\begin{aligned} I(\epsilon) &\simeq f(0) \times 4\pi\epsilon^2 \times \left[-\frac{1}{\epsilon^2} \right] \\ &\simeq -4\pi f(0) \end{aligned} \quad (۷۱)$$

یعنی:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int d^3r \Delta g_\epsilon(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) = -4\pi f(0) \quad (۷۲)$$

مطابق تعریف (۵۷)، این رابطه، همان (۶۱) است.

معادله (۶۱) را می‌توان، به‌عنوان مثال، برای به‌دست آوردن عبارتی که در نظریه برخورد مفید است، مورد استفاده قرار داد (فصل ۸ را ببینید):

$$(\Delta + k^2) \frac{e^{\pm ikr}}{r} = -4\pi \delta(\mathbf{r}) \quad (۷۳)$$

برای این منظور، کافی است $e^{\pm ikr}/r$ را به‌صورت یک حاصلضرب در نظر بگیریم:

$$\Delta \left[\frac{e^{\pm ikr}}{r} \right] = \frac{1}{r} \Delta(e^{\pm ikr}) + e^{\pm ikr} \Delta \left(\frac{1}{r} \right) + 2\nabla \left(\frac{1}{r} \right) \cdot \nabla(e^{\pm ikr}) \quad (۷۴)$$

حال

$$\begin{aligned} \nabla(e^{\pm ikr}) &= \pm ik e^{\pm ikr} \mathbf{r}/r \\ \Delta(e^{\pm ikr}) &= -k^2 e^{\pm ikr} \pm \frac{2ik}{r} e^{\pm ikr} \end{aligned} \quad (۷۵)$$

بنابراین، نهایتاً، بر طبق (۷۴)، خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} (\Delta + k^2) \frac{e^{\pm ikr}}{r} &= \left[-\frac{k^2}{r} \pm \frac{2ik}{r^2} - 4\pi \delta(\mathbf{r}) - \frac{2}{r^2} \times (\pm ik) + \frac{k^2}{r} \right] e^{\pm ikr} \\ &= -4\pi e^{\pm ikr} \delta(\mathbf{r}) \\ &= -4\pi \delta(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (۷۶)$$

به‌علاوه، معادله (۶۱) را می‌توان تعمیم داد: لاپلاسی تابع $Y_l^m(\theta, \varphi)/r^{l+1}$ شامل مشتقات مرتبه l ام $\delta(\mathbf{r})$ است. مثلاً $\cos\theta/r^2$ را در نظر بگیرید. می‌دانیم که پتانسیل الکتروستاتیکی ناشی از یک دوقطبی الکتریکی که گشتاور \mathbf{D} ی آن در امتداد Oz است، در یک نقطه دور عبارت است از: $\cos\theta/r^2$. $D/4\pi\epsilon_0$. 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 می‌توان به‌صورت 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 e_z معرف بردار یکه محور Oz است). اگر a را به سمت صفر میل دهیم، و در عین حال $D = qa$ را متناهی نگه داریم، این چگالی بار، می‌شود:

$$\rho(\mathbf{r}) \xrightarrow{a \rightarrow 0} D \frac{\partial}{\partial z} \delta(\mathbf{r}) \quad (78)$$

از این رو، در حدی که $a \rightarrow 0$ ، معادله پواسن (۶۴)، می‌دهد:

$$\Delta \left(\frac{\cos \theta}{r^2} \right) = -4\pi \frac{\partial}{\partial z} \delta(\mathbf{r}) \quad (79)$$

البته، این فرمول را می‌توانیم، به همان طریقی که (۶۱) را توجیه کردیم، توجیه، یا توسط نظریه توزیع، ثابت کنیم. استدلال مشابهی را می‌توانیم برای تابع $Y_l^m(\theta, \varphi)/r^{l+1}$ ، که پتانسیل حاصل از یک گشتاور چندقطبی الکتریکی \mathcal{Q}_l^m واقع در مبدأ را به دست می‌دهد، (مکمل E_x)، به کار ببریم.

مراجع برای مطالعه بیشتر

مرجعهای زیر را ببینید.

Dirac (1.13) §15, and, for example, Butkov (10.8), chap. 6, or Bass (10.1), vol.I, §§21.7 and 21.8; section 10 of the bibliography, especially the subsection "Fourier transforms; distributions".

پیوست ج

لاگرانژی و هامیلتونی در مکانیک کلاسیک

۱. مروری بر قوانین نیوتون
 - الف. دینامیک ذره نقطه‌ای
 - ب. سیستمهای ذرات نقطه‌ای
 - ج. قضایای بنیادی
۲. لاگرانژی و معادلات لاگرانژ
۳. هامیلتونی و معادلات بندادی
 - الف. تکانه‌های همیوچ مختصات
 - ب. معادلات بندادی هامیلتون-ژاکوبی
۴. مثالهایی از کاربرد صورتبندی هامیلتونی
 - الف. 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 لاگرانژ به عنوان نتیجه‌ای از اصل کمترین کنش

در اینجا تعریف و خواص اصلی لاگرانژی و هامیلتونی را در مکانیک کلاسیک یادآور می‌شویم. منظور از این پیوست مسلماً تدریس مکانیک تحلیلی نیست، بلکه مقصود نشان دادن پایه‌های کلاسیکی است که از روی آن بتوان قواعد کوانتس (فصل III) را در مورد یک سیستم فیزیکی به‌کار برد. بخصوص، توجه خود را به سیستمهای ذرات نقطه‌ای معطوف خواهیم داشت.

۱. مروری بر قوانین نیوتون

الف. دینامیک ذره نقطه‌ای

مکانیک کلاسیک غیرنسبیتی بر این فرضیه مبتنی است که لافل 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 γ است که با برآیند F نیروهای وارد بر آن متناسب است:

$$F = m\gamma \quad (1)$$

ثابت m یک خاصیت ذاتی ذره است و جرم لختی نامیده می‌شود.

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 ∇ گرادیان نسبت به مختصات \mathbf{r}_i ، و انرژی پتانسیل V به شکل زیر است:

$$V = \sum_{i=1}^n V_i(\mathbf{r}_i) + \sum_{i < j} V_{ij}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \quad (4)$$

(جمله اول در این عبارت مربوط به نیروهای خارجی و جمله دوم، مربوط به نیروهای داخلی است). بنابراین، حرکت سیستم در مختصات دکارتی با $3n$ معادله دیفرانسیل زیر توصیف می‌شود:

$$\left. \begin{aligned} m_i \ddot{x}_i &= -\frac{\partial V}{\partial x_i} \\ m_i \ddot{y}_i &= -\frac{\partial V}{\partial y_i} \\ m_i \ddot{z}_i &= -\frac{\partial V}{\partial z_i} \end{aligned} \right\} i = 1, 2, \dots, n \quad (5)$$

* معمولاً در مکانیک، برای مشتق‌گیری نسبت به زمان، از نمادهای ساده‌شده استفاده می‌کنند: بنا بر تعریف:

$$\dot{u} = \frac{du}{dt}, \ddot{u} = \frac{d^2u}{dt^2}, \dots$$

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:

$$\mathbf{r}_G = \frac{\sum_{i=1}^n m_i \mathbf{r}_i}{\sum_{i=1}^n m_i} \quad (6)$$

انرژی جنبشی کل این سیستم برابر است با:

$$T = \sum_{i=1}^n \frac{1}{2} m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2 \quad (7)$$

که $\dot{\mathbf{r}}_i$ سرعت ذره (i) است. تکانه زاویه‌ای نسبت به مبدأ عبارت است از بردار:

$$\mathcal{L} = \sum_{i=1}^n \mathbf{r}_i \times m_i \dot{\mathbf{r}}_i \quad (8)$$

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:

$$\left[\sum_{i=1}^n m_i \right] \ddot{\mathbf{r}}_G = \sum_{i=1}^n \mathbf{F}_i \quad (9)$$

۲. مشتق نسبت به زمان تکانه زاویه‌ای در یک نقطه ثابت برابر است با گشتاور نیروها نسبت به این نقطه:

$$\dot{\mathcal{L}} = \sum_{i=1}^n \mathbf{r}_i \times \mathbf{F}_i \quad (10)$$

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:

$$T(t_2) - T(t_1) = \int_{t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^n \mathbf{F}_i \cdot \dot{\mathbf{r}}_i dt \quad (11)$$

اگر نیروهای داخلی، اصل کنش و واکنش را برقرار سازند، و اگر این نیروها در امتداد خطوط مستقیم و اصل بین ذرات برهم‌کنشی باشند، سهمشان در برآیند [معادله (۹)] و در گشتاور نسبت به مبدأ [معادله (۱۰)] صفر است. به علاوه، اگر سیستم مورد مطالعه منزوی باشد (یعنی هیچ نیروی خارجی بر آن وارد نیاید)، تکانه زاویه‌ای کل \mathcal{L} ثابت است و مرکز جرم دارای یک حرکت مستقیم‌الخط بکنواخت 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. لاکرانژی و معادلات لاکرانژ

سیستمی متشکل از n ذره را در نظر بگیرید که در آن نیروها مشتق از یک پتانسیل [فرمول (۴)] باشند، که آن را به $V(\mathbf{r}_i)$ نمایش می‌دهیم. لاکرانژی، یا تابع لاکرانژ 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 لاکرانژ 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:

$$\boxed{\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = 0} \quad (15)$$

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 پکتا نیست: دو تابع $\mathcal{L}(q_i, \dot{q}_i; t)$ و $\mathcal{L}'(q_i, \dot{q}_i; t)$ ممکن است، با استفاده از (15)، به یک معادله منتهی شوند. این وضع، بخصوص، وقتی بیش 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 بندادی

برای یک سیستم فیزیکی که با N مختصه تعمیم یافته توصیف می‌شود، معادلات لاگرانژ، (۱۵)، از N معادله دیفرانسیل مرتبه دوم جفتیده را با N تابع مجهول $q_i(t)$ تشکیل می‌دهند. خواهیم دید که می‌توان این سیستم را با سیستمی از $2N$ معادله دیفرانسیل مرتبه اول با $2N$ تابع مجهول، جایگزین کرد.

الف. تکانه‌های همیوخ مختصات

تکانه همیوخ p_i مختصه تعمیم یافته q_i ، با فرمول زیر تعریف می‌شود:

$$p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \quad (18)$$

p_i را تکانه تعمیم یافته هم می‌گویند. در مورد سیستم ذراتی که برای آن نیروها مشتق از یک انرژی پتانسیل هستند، تکانه‌های همیوخ متغیرهای مکانی $\mathbf{r}_i(x_i, y_i, z_i)$ [رابطه (۱۳)]، همان تکانه‌های مکانیکی‌اند:

$$\mathbf{p}_i = m_i \dot{\mathbf{r}}_i \quad (19)$$

اما، در بخش (۴-ب-۳) خواهیم دید که در حضور یک میدان مغناطیسی این مطلب درست نیست.

از این پس، به جای تعریف حالت سیستم در یک لحظه معین t با N مختصه $q_i(t)$ و N سرعت $\dot{q}_i(t)$ آن را با $2N$ تغییر

$$\{q_i(t), p_i(t); i = 1, 2, \dots, N\} \quad (20)$$

مشخص خواهیم کرد. این 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 بندادی هامیلتون-ژاکوبی

هامیلتونی کلاسیک یا تابع هامیلتون سیستم، بنا بر تعریف عبارت است از:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N p_i \dot{q}_i - \mathcal{L} \quad (21)$$

برطبق قرارداد (۲۰)، \dot{q}_i ها را حذف می کنیم و هامیلتونی را به صورت تابعی از مختصات و تکانه های همیوگ آنها در نظر می گیریم. \mathcal{H} نیز مانند \mathcal{L} می تواند صریحاً به زمان بستگی داشته باشد:

$$\mathcal{H}(q_i, p_i; t) \quad (22)$$

دیفرانسیل کامل تابع \mathcal{H} :

$$d\mathcal{H} = \sum_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} dq_i + \sum_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} dt \quad (23)$$

با استفاده از تعاریف (۲۱) و (۱۸) برابر است با:

$$\begin{aligned} d\mathcal{H} &= \sum_i [p_i d\dot{q}_i + \dot{q}_i dp_i] - \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} dq_i - \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt \\ &= \sum_i \dot{q}_i dp_i - \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} dp_i - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt \end{aligned} \quad (24)$$

با مساوی قراردادن (۲۳) و (۲۴)، ملاحظه می کنیم که از تبدیل متغیرهای $\{q_i, \dot{q}_i\}$ به متغیرهای

{q_i, p_i} داریم:

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} \quad (۲۵-الف)$$

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} = \dot{q}_i \quad (۲۵-ب)$$

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} \quad (۲۵-ج)$$

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 بنیادی هامیلتون-ژاکوبی نامیده می‌شوند. همان‌طور که گفتیم، (۲۷) دستگاهی با $2N$ معادلهٔ 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 بندادی:

$$\begin{aligned}\frac{dr_i}{dt} &= \frac{p_i}{m_i} \\ \frac{dp_i}{dt} &= -\nabla_i V\end{aligned}\quad (30)$$

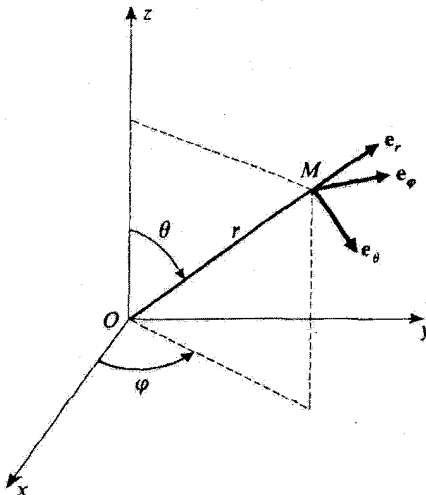
با معادلات نیوتون (۳) هم‌ارزند.

۴. مثالهایی از کاربرد صورتبندی هامیلتونی

الف. 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, θ, φ) ، مؤلفه‌های سرعت ذره روی محورهای موضعی (شکل ۱) عبارت‌اند از:

$$\begin{aligned}v_r &= \dot{r} \\ v_\theta &= r\dot{\theta} \\ v_\varphi &= r \sin \theta \dot{\varphi}\end{aligned}\quad (31)$$



شکل ۱. بردارهای یک e_r ، e_θ ، e_φ محوره‌های موضعی وابسته به نقطه M ، که M با مختصات کروی (r, θ, φ) آن مشخص می‌شود.

به طوری که لاگرانژی (۱۳)، را می توان به صورت زیر نوشت:

$$\mathcal{L}(r, \theta, \varphi; \dot{r}, \dot{\theta}, \dot{\varphi}) = \frac{1}{2} m [\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2 + r^2 \sin^2 \theta \dot{\varphi}^2] - V(r) \quad (۳۲)$$

به این ترتیب، تکانه های همیوگ سه متغیر r, θ, φ را می توان به صورت زیر محاسبه کرد:

$$p_r = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} = m\dot{r} \quad (\text{الف-۳۳})$$

$$p_\theta = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\theta}} = mr^2 \dot{\theta} \quad (\text{ب-۳۳})$$

$$p_\varphi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}} = mr^2 \sin^2 \theta \dot{\varphi} \quad (\text{ج-۳۳})$$

برای به دست آوردن هامیلتونی ذره، کافی است $V(r)$ را به انرژی جنبشی که بر حسب r, θ, φ و p_r, p_θ, p_φ بیان می شود، اضافه کنیم. خواهیم داشت:

$$\mathcal{H}(r, \theta, \varphi; p_r, p_\theta, p_\varphi) = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{1}{2mr^2} \left(p_\theta^2 + \frac{p_\varphi^2}{\sin^2 \theta} \right) + V(r) \quad (۳۴)$$

دستگاه معادلات بندادی [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:

$$\mathcal{L} = \mathbf{r} \times m\mathbf{v} \quad (۳۶)$$

مؤلفه‌های موضعی \mathcal{L} را می توان به آسانی از (۳۱) محاسبه کرد:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_r &= 0 \\ \mathcal{L}_\theta &= -mrv_\varphi = -mr^2 \sin\theta \dot{\varphi} = -\frac{p_\varphi}{\sin\theta} \\ \mathcal{L}_\varphi &= mrv_\theta = mr^2 \dot{\theta} = p_\theta \end{aligned} \quad (۳۷)$$

به طوری که:

$$\mathcal{L}^2 = p_\theta^2 + \frac{p_\varphi^2}{\sin^2\theta} \quad (۳۸)$$

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:

$$\mathcal{H}(r, \theta, \varphi; p_r, p_\theta, p_\varphi) = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{1}{2mr^2} \mathcal{L}^2(\theta, p_\theta, p_\varphi) + V(r) \quad (۳۹)$$

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

$$V_{\text{مؤثر}}(r) = V(r) + \frac{\mathcal{L}_0^2}{2mr^2} \quad (۴۰)$$

قرار گرفته است، خواهند بود.

* این نتیجه را می توان از (۳۵-ا) و (۳۵-ب)، با محاسبه مشتق زمانی مؤلفه‌های \mathcal{L} بر روی محورهای ثابت 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.

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (\text{الف-۴۱})$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (\text{ب-۴۱})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (\text{ج-۴۱})$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j} + \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (\text{د-۴۱})$$

که $\rho(\mathbf{r}, t)$ و $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ چگالی بار حجمی و چگالی جریان‌اند که میدان الکترومغناطیسی را ایجاد می‌کنند. میدانهای \mathbf{E} و \mathbf{B} را می‌توان با یک پتانسیل اسکالر $U(\mathbf{r}, t)$ و یک پتانسیل برداری $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ توصیف کرد، زیرا معادلهٔ (ج-۴۱) حاکی از آن است که یک میدان برداری $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ وجود دارد که:

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (۴۲)$$

لذا (ب-۴۱) را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\nabla \times \left[\mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right] = 0 \quad (۴۳)$$

در نتیجه، تابع اسکالری مانند $U(\mathbf{r}, t)$ وجود دارد، به طوری که:

$$\mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\nabla U(\mathbf{r}, t) \quad (۴۴)$$

پتانسیلهای $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ و $U(\mathbf{r}, t)$ مجموعه‌ای را تشکیل می‌دهند که آن را پیمانه توصیف میدان الکترومغناطیسی، می‌نامیم. میدانهای الکتریکی و مغناطیسی را می‌توان از پیمانه $\{\mathbf{A}, U\}$ ، توسط

روابط زیر محاسبه کرد:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (۴۵-الف)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla U(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (۴۵-ب)$$

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 $\mathbf{A}' - \mathbf{A}$ ، گرادیان یک تابع اسکالر است:

$$\mathbf{A}' - \mathbf{A} = \nabla \chi(\mathbf{r}, t) \quad (۵۰)$$

$\chi(\mathbf{r}, t)$ ، فعلاً فقط با تقریب تابعی دلخواه از t ، $f(t)$ ، تعیین شده است. به علاوه، این واقعیت که دو پیمانه معادلند، بدین معنی است که:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla U(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = -\nabla U'(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) \quad (51)$$

یعنی:

$$\nabla(U' - U) + \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{A}' - \mathbf{A}) = 0 \quad (52)$$

بنابر (۵۰)، باید داشته باشیم

$$\nabla(U' - U) = -\nabla \frac{\partial}{\partial t} \chi(\mathbf{r}, t) \quad (53)$$

در نتیجه، توابع $U' - U$ و $-\partial/\partial t \chi(\mathbf{r}, t)$ می‌توانند فقط در تابعی از t اختلاف داشته باشند؛ بنابراین، $f(t)$ را می‌توانیم طوری انتخاب کنیم که آنها را برابر سازد:

$$U' - U = -\frac{\partial}{\partial t} \chi(\mathbf{r}, t) \quad (54)$$

این امر، تعیین تابع $\chi(\mathbf{r}, t)$ را (با تقریب یک ثابت جمع‌پذیر) کامل می‌کند. از این رو دو پیمانه معادل، باید در روابطی به شکل (۴۶) صدق کنند.

۲. معادلات حرکت و لاگراژی

ذره باردار، در میدان الکترومغناطیسی، تحت تأثیر نیروی لورنتس:

$$\mathbf{F} = q[\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}] \quad (55)$$

قرار داد (که در آن سرعت ذره در زمان t است). بنابراین، قانون نیوتون معادلات حرکت را به صورت زیر به دست می‌دهد:

$$m\ddot{\mathbf{r}} = q[\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)] \quad (56)$$

با تصویر کردن این معادله روی محور Ox و استفاده از (۴۵)، به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} m\ddot{x} &= q[E_x + \dot{y}B_z - \dot{z}B_y] \\ &= q \left[-\frac{\partial U}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial t} + \dot{y} \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) - \dot{z} \left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) \right] \quad (57) \end{aligned}$$

به آسانی می‌توان نشان داد که این معادلات را می‌توان، با به‌کار بردن (۱۵)، از لاگرانژی زیر به‌دست آورد:

$$\mathcal{L}(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t) = \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{r}}^2 + q \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) - qU(\mathbf{r}, t) \quad (58)$$

بنابراین، با وجود اینکه نیروی لورنتس از یک انرژی پتانسیل مشتق نشده است، می‌توانیم یک لاگرانژی برای این مسأله بیابیم.

حال نشان می‌دهیم که معادلات لاگرانژ (۱۵)، با استفاده از لاگرانژی (۵۸)، همان معادلات حرکت (۵۶) را به‌دست می‌دهند. برای این منظور، ابتدا محاسبهٔ زیر را انجام می‌دهیم:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} &= m\dot{x} + qA_x(\mathbf{r}, t) \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} &= q\dot{\mathbf{r}} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) - q \frac{\partial}{\partial x} U(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (59)$$

بنابراین، معادلهٔ لاگرانژ برای مختصهٔ x را می‌توان به‌صورت زیر نوشت:

$$\frac{d}{dt} [m\dot{x} + qA_x(\mathbf{r}, t)] - q\dot{\mathbf{r}} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + q \frac{\partial}{\partial x} U(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (60)$$

با نوشتن این معادله به‌طور صریح، و بهره‌گیری از (۱۶)، مجدداً به عبارت (۵۷) می‌رسیم:

$$\begin{aligned} m\ddot{x} + q \left[\frac{\partial A_x}{\partial t} + \dot{x} \frac{\partial A_x}{\partial x} + \dot{y} \frac{\partial A_x}{\partial y} + \dot{z} \frac{\partial A_x}{\partial z} \right] \\ - q \left[\dot{x} \frac{\partial A_x}{\partial x} + \dot{y} \frac{\partial A_y}{\partial x} + \dot{z} \frac{\partial A_z}{\partial x} \right] + q \frac{\partial U}{\partial x} = 0 \end{aligned} \quad (61)$$

یعنی:

$$m\ddot{x} = q \left[-\frac{\partial U}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial t} + \dot{y} \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) - \dot{z} \left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) \right] \quad (62)$$

۳. تکانه. هامیلتونی کلاسیک

لاگرانژی (۵۸) ما را قادر می‌سازد تا تکانه‌های همیوگ مختصات دکارتی x, y, z ذره را محاسبه کنیم. مثلاً:

$$p_x = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} + qA_x(\mathbf{r}, t) \quad (63)$$

تکانه ذره، که بنا بر تعریف، برداری با مؤلفه‌های (p_x, p_y, p_z) است، دیگر مانند (۱۹)، با تکانه مکانیکی $m\dot{\mathbf{r}}$ برابر نیست:

$$\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{r}} + q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (۶۴)$$

بالاخره، هامیلتونی کلاسیک زیر را خواهیم نوشت:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) &= \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{r}} - \mathcal{L} \\ &= \mathbf{p} \cdot \frac{1}{m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A}) - \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 - \frac{q}{m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A}) \cdot \mathbf{A} + qU \end{aligned} \quad (۶۵)$$

یعنی:

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = \frac{1}{2m}[\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)]^2 + qU(\mathbf{r}, t) \quad (۶۶)$$

یادداشت:

بنابراین، صورتبندی هامیلتونی، میدانهای \mathbf{E} و \mathbf{B} را مستقیماً مورد استفاده قرار نمی‌دهد بلکه از پتانسیلهای \mathbf{A} و U استفاده می‌کند. نتیجه این است که، توصیف ذره به پیمانه انتخابی بستگی دارد. معذالک، چون نیروی لورنتس برحسب میدانهای \mathbf{E} و \mathbf{B} بیان می‌شود، معقول است که انتظار داشته باشیم که پیش‌بینیهای مربوط به رفتار فیزیکی ذره، برای دو پیمانه هم‌ارز، یکی باشند. اصطلاحاً گفته می‌شود که پی‌آمدهای فیزیکی صورتبندی هامیلتونی، ناوردای پیمانه‌ای‌اند. مفهوم ناوردایی پیمانه‌ای را در مکمل H_{III} در جلد اول فارسی به تفصیل، تحلیل کرده‌ایم. ■

۵. اصل کمترین کنش

مکانیک کلاسیک، می‌تواند مبتنی بر یک اصل وردشی، اصل کمترین کنش، باشد. موضوع کنش، علاوه بر اهمیت نظری آن، به‌عنوان بنیاد فرمولبندی لاگرانژی مکانیک کوانتومی (مکمل J_{III} در جلد اول فارسی را ببینید) به‌کار گرفته می‌شود. به این جهت، اکنون اصل کمترین کنش را به‌اختصار مورد بحث قرار داده و نشان می‌دهیم که چگونه این اصل ما را به معادلات لاگرانژ هدایت می‌کند.

الف. نمایش هندسی حرکت یک سیستم

ابتدا، ذره‌ای را در نظر بگیرید که مقید به حرکت در امتداد محور Ox است. حرکت این ذره را می‌توان با ردیابی منحنی تعریف شده توسط قانون حرکت که $x(t)$ را به دست می‌دهد، در صفحه (x, t) ، نمایش داد. به طور کلیتر، سیستمی فیزیکی را مطالعه می‌کنیم که با N مختصهٔ تعیین یافتهٔ q_i توصیف می‌شود (برای یک سیستم n ذره‌ای در فضای سه بعدی، $N = 3n$). 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 نقطهٔ 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 سادهٔ یک ذره منفرد که در یک بعد حرکت می‌کند، حرکت نقطهٔ Q ، یعنی، حرکت سیستم، را می‌توان توسط نمودار $Q(t)$ ، که منحنی‌ای در فضا-زمان $(N + 1)$ بعدی است (محور زمان به N بعد R_N افزوده می‌شود)، نمایش داد. این منحنی، حرکت مورد مطالعه را مشخص می‌کند.

ب. بیان اصل کمترین کنش

$q_i(t)$ را می‌توان به دلخواه مشخص کرد؛ به این ترتیب، نقطهٔ Q و سیستم حرکتی دلخواه می‌یابد. اما رفتار حقیقی آنها توسط شرایط اولیه و معادلات حرکت تعریف می‌شود. فرض کنید می‌دانیم که، در خلال حرکت واقعی، همان طوری که 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 حرکتهای، توسط تمام منحنیها،* یا مسیریایی در فضا-زمان که نقاط (Q_1, t_1) و (Q_2, t_2) را به هم متصل می‌کنند (شکل ۲) نشان داده می‌شوند.

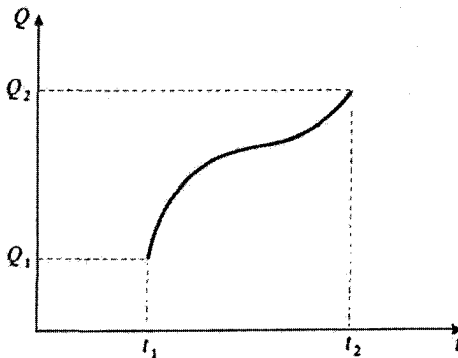
مسیر Γ را در جایگاه در نظر بگیرید، و فرض کنید که این مسیر توسط تابع برداری $Q(t)$ که در (۶۷) صدق می‌کند، مشخص می‌شود، اگر:

$$\mathcal{L}(q_1, q_2, \dots, q_N; \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_N; t) \equiv \mathcal{L}(Q, \dot{Q}; t) \quad (68)$$

لاگرانژی سیستم باشد، کنش S_Γ که با مسیر Γ متناظر است، بنا بر تعریف عبارت است از:

$$S_\Gamma = \int_{t_1}^{t_2} dt \mathcal{L}[Q_\Gamma(t), \dot{Q}_\Gamma(t); t] \quad (69)$$

* البته، به استثناء منحنیهایی که "بعقب 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 جگانه. محور Q ها معرف زمان و "محور t 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 $Q_r(t)$ و $Q_l(t)$ 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 Γ مشخص شده باشد. حال یک مسیر دیگر Γ' را در نظر بگیرید که بینهایت به آن نزدیک است (شکل ۳)، و مختصات تعمیم یافته آن عبارت اند از:

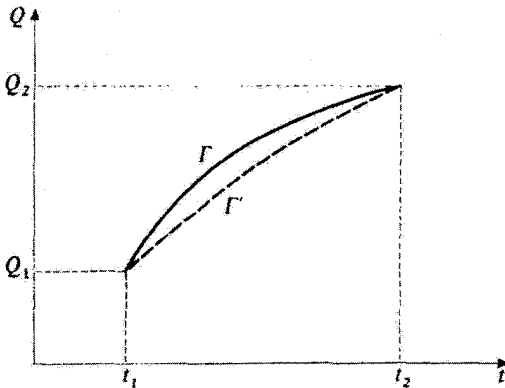
$$q'_i(t) = q_i(t) + \delta q_i(t) \quad (70)$$

که $\delta q_i(t)$ بینهایت کوچک اند و در شرایط (۶۷) صدق می کنند، یعنی:

$$\delta q_i(t_1) = \delta q_i(t_2) = 0 \quad (71)$$

سرعت های تعمیم یافته $\dot{q}'_i(t)$ متناظر با Γ' را می توان با مشتق گیری از روابط (۷۰) به دست آورد:

$$\dot{q}'_i(t) = \dot{q}_i(t) + \frac{d}{dt} \delta q_i(t) \quad (72)$$



شکل ۳. دو مسیر جلوگاه، که از نقاط (Q_1, t_1) و (Q_2, t_2) می‌گذرند: منحنی خطیر مسیر وابسته به حرکت واقعی سیستم، و منحنی خط چین یک مسیر دیگر بینهایت نزدیک به آن است.

بنابراین، نموای $\delta \dot{q}_i(t)$ عبارت‌اند از:

$$\delta \dot{q}_i(t) = \frac{d}{dt} \delta q_i(t) \quad (۷۳)$$

حال، بنابر (۷۳)، وردش کنش را هنگام رفتن از مسیر Γ به مسیر Γ' محاسبه می‌کنیم:

$$\begin{aligned} \delta S &= \int_{t_1}^{t_2} dt \delta \mathcal{L} \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} \delta q_i + \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \delta \dot{q}_i \right] \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} \delta q_i + \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \frac{d}{dt} \delta q_i \right] \end{aligned} \quad (۷۴)$$

اگر از جمله دوم به روش جزء به جزء انتگرال بگیریم، به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} \delta S &= \left[\sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \delta q_i \right]_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_i \delta q_i \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \right] \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_i \delta q_i \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \right] \end{aligned} \quad (۷۵)$$

زیرا، به خاطر شرایط (۷۱)، جمله انتگرال گرفته شده صفر است.

اگر Γ مسیری در فضا-زمان باشد که عملاً در خلال حرکت واقعی سیستم طی می‌شود، بنابر اصل کمترین کنش، نموکنش، δS ، صفر است. بدین منظور، شرط لازم و کافی این است که:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = 0 \quad ; \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (۷۶)$$

بدیهی است که این شرط کافی است. این شرط لازم نیز هست. زیرا، اگر فاصله زمانی وجود می‌داشت که در خلال آن عبارت (۷۶) به‌ازاء یک مقدار مفروض k از شاخص i ، غیر صفر می‌بود، $\delta q_i(t)$ را می‌توانستیم طوری انتخاب کنیم که نمود δS مربوطه را مخالف صفر بسازد. (مثلاً کافی بود که، آنها را طوری انتخاب می‌کردیم که حاصلضرب $\delta q_k [\partial \mathcal{L} / \partial q_k - d/dt \partial \mathcal{L} / \partial \dot{q}_k]$ همواره مثبت یا صفر باشد). در نتیجه، اصل کمترین کنش، با معادلات لاگرانژ هم‌ارز است.

مراجع 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).

مکانیک کوانتومی نسبیاتی

- (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. GOLDBERGER, "The Conservation Laws of Physics", *Scientific American*, **209**, 36 (Oct. 1963).

- (2.30) E. P. WIGNER, "Violations of Symmetry in Physics", *Scientific American*, **213**, 28 (Dec. 1965).
- (2.31) U. FANO, "Description of States in Quantum Mechanics by Density Matrix and Operator Techniques", *Rev. Mod. Phys.*, **29**, 74 (1957).
- (2.32) D. TER HAAR, "Theory and Applications of the Density Matrix", *Rept. Progr. Phys.*, **24**, 304 (1961).
- (2.33) V. F. WEISSKOPF and E. WIGNER, "Berechnung der Natürlichen Linienbreite auf Grund der Diracschen Lichttheorie", *Z. Physik*, **63**, 54 (1930).
- (2.34) A. DALGARNO and J. T. LEWIS, "The Exact Calculation of Long-Range Forces between Atoms by Perturbation Theory", *Proc. Roy. Soc.*, **A 233**, 70 (1955).
- (2.35) A. DALGARNO and A. L. STEWART, "On the Perturbation Theory of Small Disturbances", *Proc. Roy. Soc.*, **A 238**, 269 (1957).
- (2.36) C. SCHWARTZ, "Calculations in Schrödinger Perturbation Theory", *Annals of Physics* (New York), **6**, 156 (1959).
- (2.37) J. O. HIRSCHFELDER, W. BYERS BROWN and S. T. EPSTEIN, "Recent Developments in Perturbation Theory", in *Advances in Quantum Chemistry*, P. O. LOWDIN ed., Vol. I, Academic Press, New York (1964).
- (2.38) R. P. FEYNMAN, "Space Time Approach to Nonrelativistic Quantum Mechanics", *Rev. Mod. Phys.*, **20**, 367 (1948).
- (2.39) L. VAN HOVE, "Correlations in Space and Time and Born Approximation Scattering in Systems of Interacting Particles", *Phys. Rev.*, **95**, 249 (1954).

۳. مکانیک کوانتومی: آزمایشهای بنیادی

اثرات تداخل با نور ضعیف

- (3.1) G. I. TAYLOR, "Interference Fringes with Feeble Light", *Proc. Camb. Phil. Soc.*, **15**, 114 (1909).
- (3.2) G. T. REYNOLDS, K. SPARTALIAN and D. B. SCARL, "Interference Effects Produced by Single Photons", *Nuovo Cimento*, **61 B**, 355 (1969).

بررسی تجربی قانون اینشتین برای اثر فوتوالکترونیک؛ اندازه‌گیری h

- (3.3) A. L. HUGHES, "On the Emission Velocities of Photoelectrons", *Phil. Trans. Roy. Soc.*, **212**, 205 (1912).
- (3.4) R. A. MILLIKAN, "A Direct Photoelectric Determination of Planck's h ", *Phys. Rev.* **7**, 355 (1916).

آزمایش فرانک-هرتز

- (3.5) J. FRANCK und G. HERTZ, "Über Zusammenstöße Zwischen Elektronen und den Molekülen des Quecksilberdampfes und die Ionisierungsspannung desselben", *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, **16**, 457 (1914).
- "Über Kinetik von Elektronen und Ionen in Gasen", *Physikalische Zeitschrift*, **17**, 409 (1916).

تناسب بین گشتاور مغناطیسی و تکانه زاویه‌ای

- (3.6) A. EINSTEIN und J. W. DE HAAS, "Experimenteller Nachweis der Ampereschen Molekularströme", *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, **17**, 152 (1915).

(3.7) E. BECK, "Zum Experimentellen Nachweis der Ampereschen Molekularströme", *Annalen der Physik* (Leipzig), **60**, 109 (1919).

آزمایش اشترن-گرلاخ

(3.8) W. GERLACH und O. STERN, "Der Experimentelle Nachweis der Richtungsquantelung im Magnetfeld", *Zeitschrift für Physik*, **9**, 349 (1922).

اثر کامپتون

(3.9) A. H. COMPTON, "A Quantum Theory of the Scattering of X-Rays by Light Elements", *Phys. Rev.*, **21**, 483 (1923).

"Wavelength Measurements of Scattered X-Rays", *Phys. Rev.*, **21**, 715 (1923).

پراش الکترون

(3.10) C. DAVISSON and L. H. GERMER, "Diffraction of Electrons by a Crystal of Nickel", *Phys. Rev.*, **30**, 705 (1927).

تغییر مکان لمب

(3.11) W. E. LAMB JR. and R. C. RETHERFORD, "Fine Structure of the Hydrogen Atom", I - *Phys. Rev.*, **79**, 549 (1950).

II - *Phys. Rev.*, **81**, 222 (1951).

ساختار ظریف حالت پایه هیدروژن

(3.12) S. B. CRAMPTON, D. KLEPPNER and N. F. RAMSEY, "Hyperfine Separation of Ground State Atomic Hydrogen", *Phys. Rev. Letters*, **11**, 338 (1963).

آزمایشهای متعدد بنیادی در مقاله زیر توضیح داده شده‌اند:

(3.13) O. R. FRISCH, "Molecular Beams", *Scientific American*, **212**, 58 (May 1965).

۴. مکانیک کوانتومی: سرگذشت

(4.1) L. DE BROGLIE, "Recherches sur la Théorie des Quanta", *Annales de Physique*, **3**, 22, Paris (1925).

(4.2) N. BOHR, "The Solvay Meetings and the Development of Quantum Mechanics", *Essays 1958-1962 on Atomic Physics and Human Knowledge*, Vintage, New York (1966).

(4.3) W. HEISENBERG, *Physics and Beyond: Encounters and Conversations*, Harper and Row, New York (1971).

La Partie et le Tout, Albin Michel, Paris (1972).

(4.4) Niels Bohr, *His life and work as seen by his friends and colleagues*, S. ROZENTAL, ed., North Holland, Amsterdam (1967).

(4.5) A. EINSTEIN, M. and H. BORN, *Correspondance 1916-1955*, Editions du Seuil, Paris (1972). See also *La Recherche*, **3**, 137 (Feb. 1972).

(4.6) *Theoretical Physics in the Twentieth Century*, M. FIERZ and V. F. WEISSKOPF eds., Wiley Interscience, New York (1960).

(4.7) *Sources of Quantum Mechanics*, B. L. VAN DER WAERDEN ed., North Holland, Amsterdam (1967); Dover, New York (1968).

(4.8) M. JAMMER, *The Conceptual Development of Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, New York (1966). This book traces the historical development of quantum mechanics. Its very numerous footnotes provide a multitude of references. See also (5.12).

- (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 دربارهٔ تأسیس 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 اندازه‌گیری

- (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. I: Mechanics*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1967).
- (6.2) C. KITTEL, W. D. KNIGHT and M. A. RUDERMAN, *Berkeley Physics Course. Vol. 1: Mechanics*, McGraw-Hill, New York (1962).
- (6.3) R. P. FEYNMAN, R. B. LEIGHTON and M. SANDS, *The Feynman Lectures on Physics, Vol. I: Mechanics, Radiation, and Heat*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1966).
- (6.4) J. B. MARION, *Classical Dynamics of Particles and Systems*, Academic Press, New York (1965).

سطح پیشرفته‌تر

- (6.5) A. SOMMERFELD, *Lectures on Theoretical Physics, Vol. I: Mechanics*, Academic Press, New York (1964).
- (6.6) H. GOLDSTEIN, *Classical Mechanics*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1959).
- (6.7) L. D. LANDAU and E. M. LIFSHITZ, *Mechanics*, Pergamon Press, Oxford (1960).

۷. الکترومغناطیس و اپتیک

سطح مقدماتی

- (7.1) E. M. PURCELL, *Berkeley Physics Course, Vol. 2: Electricity and Magnetism*, McGraw-Hill, New York (1965).
F. S. CRAWFORD JR., *Berkeley Physics Course, Vol. 3: Waves*, McGraw-Hill, New York (1968).
- (7.2) R. P. FEYNMAN, R. B. LEIGHTON and M. SANDS, *The Feynman Lectures on Physics, Vol. II: Electromagnetism and Matter*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1966).
- (7.3) M. ALONSO and E. J. FINN, *Fundamental University Physics, Vol. II: Fields and Waves*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1967).
- (7.4) E. HECHT and A. ZAJAC, *Optics*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1974).

- (7.5) J. D. JACKSON, *Classical Electrodynamics*, 2^d ed. Wiley, New York (1975).
- (7.6) W. K. H. PANOFSKY and M. PHILLIPS, *Classical Electricity and Magnetism*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1964).
- (7.7) J. A. STRATTON, *Electromagnetic Theory*, McGraw-Hill, New York (1941).
- (7.8) M. BORN and E. WOLF, *Principles of Optics*, Pergamon Press, London (1964).
- (7.9) A. SOMMERFELD, *Lectures on Theoretical Physics, Vol. IV: Optics*, Academic Press, New York (1964).
- (7.10) G. BRUHAT, *Optique*, 5^e Edition revised and completed by A. KASTLER, Masson, Paris (1954).
- (7.11) L. LANDAU and E. LIFSHITZ, *The Classical Theory of Fields*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1951); Pergamon Press, London (1951).
- (7.12) L. D. LANDAU and E. M. LIFSHITZ, *Electrodynamics of Continuous Media*, Pergamon Press, Oxford (1960).
- (7.13) L. BRILLOUIN, *Wave Propagation and Group Velocity*, Academic Press, New York (1960).

۸. ترمودینامیک. مکانیک آماری

سطح مقدماتی

- (8.1) F. REIF, *Berkeley Physics Course, Vol. 5: Statistical Physics*, McGraw-Hill, New York (1967).
- (8.2) C. KITTEL, *Thermal Physics*, Wiley, New York (1969).
- (8.3) G. BRUHAT, *Thermodynamique*, 5^e Edition revised by A. KASTLER, Masson, Paris (1962).
همچنین قسمت ۲ مرجع (۴.۱) و مرجع (۳.۶) را ببینید.

سطح پیشرفته‌تر

- (8.4) F. REIF, *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*, McGraw-Hill, New York (1965).
- (8.5) R. CASTAING, *Thermodynamique Statistique*, Masson, Paris (1970).
- (8.6) P. M. MORSE, *Thermal Physics*, Benjamin, New York (1964).
- (8.7) R. KUBO, *Statistical Mechanics*, North Holland, Amsterdam and Wiley, New York (1965).
- (8.8) L. D. LANDAU and E. M. LIFSHITZ, *Course of Theoretical Physics, Vol. 5: Statistical Physics*, Pergamon Press, London (1963).
- (8.9) H. B. CALLEN, *Thermodynamics*, Wiley, New York (1961).
- (8.10) A. B. PIPPARD, *The Elements of Classical Thermodynamics*, Cambridge University Press (1957).
- (8.11) R. C. TOLMAN, *The Principles of Statistical Mechanics*, Oxford University Press (1950).

۹. نسبیت

سطح مقدماتی

- (9.1) J. H. SMITH, *Introduction to Special Relativity*, Benjamin, New York (1965).

مراجع (۲.۶) و (۳.۶) را ببینید.

سطح پیشرفته‌تر

- (9.2) J. L. SYNGE, *Relativity: The Special Theory*, North Holland, Amsterdam (1965).
 (9.3) R. D. SARD, *Relativistic Mechanics*, Benjamin, New York (1970).
 (9.4) J. AHARONI, *The Special Theory of Relativity*, Oxford University Press, London (1959).
 (9.5) C. MØLLER, *The Theory of Relativity*, Oxford University Press, London (1972).
 (9.6) P. G. BERGMANN, *Introduction to the Theory of Relativity*, Prentice Hall, Englewood Cliffs (1960).
 (9.7) C. W. MISNER, K. S. THORNE and J. A. WHEELER, *Gravitation*, Freeman, San Francisco (1973).

همچنین مراجع مربوط به الکترومغناطیس را ببینید، به ویژه مراجع (۵.۷) و (۱۱.۷). مراجع زیر نیز بالارزش‌اند.

- (9.8) A. EINSTEIN, *Quatre Conférences sur la Théorie de la Relativité*, Gauthier-Villars, Paris (1971).
 (9.9) A. EINSTEIN, *La Théorie de la Relativité Restreinte et Générale. La Relativité et le Problème de l'Espace*, Gauthier-Villars, Paris (1971).
 (9.10) A. EINSTEIN, *The Meaning of Relativity*, Methuen, London (1950).
 (9.11) A. EINSTEIN, *Relativity, the Special and General Theory, a Popular Exposition*, Methuen, London (1920); H. Holt, New York (1967).

A much more complete list of references can be found in :

- (9.12) G. HOLTON, Resource Letter SRT-1 on Special Relativity Theory, *Am. J. Phys.* **30**, 462 (1962).

۱۰. روشهای ریاضی
کتابهای عمومی مقدماتی

- (10.1) J. BASS, *Cours de Mathématiques*, Vols. I, II and III, Masson, Paris (1961).
 (10.2) A. ANGOT, *Compléments de Mathématiques*, Revue d'Optique, Paris (1961).
 (10.3) T. A. BAK and J. LICHTENBERG, *Mathematics for Scientists*, Benjamin, New York (1966).
 (10.4) G. ARFKEN, *Mathematical Methods for Physicists*, Academic Press, New York (1966).
 (10.5) J. D. JACKSON, *Mathematics for Quantum Mechanics*, Benjamin, New York (1962).

کتابهای عمومی پیشرفته‌تر

- (10.6) J. MATHEWS and R. L. WALKER, *Mathematical Methods of Physics*, Benjamin, New York (1970).
 (10.7) L. SCHWARTZ, *Mathematics for the Physical Sciences*, Hermann, Paris (1968). *Méthodes mathématiques pour les sciences physiques*, Hermann, Paris (1965).
 (10.8) E. BUTKOV, *Mathematical Physics*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1968).
 (10.9) H. CARTAN, *Elementary Theory of Analytic Functions of One or Several Complex Variables*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1966). *Théorie élémentaire des fonctions analytiques d'une ou plusieurs variables complexes*, Hermann, Paris (1961).
 (10.10) J. VON NEUMANN, *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*, Princeton University Press (1955).
 (10.11) R. COURANT and D. HILBERT, *Methods of Mathematical Physics*, Vols. I and II, Wiley, Interscience, New York (1966).

- (10.12) E. T. WHITTAKER and G. N. WATSON, *A Course of Modern Analysis*, Cambridge University Press (1965).
- (10.13) P. M. MORSE and H. FESHBACH, *Methods of Theoretical Physics*, McGraw-Hill, New York (1953).

جبر خطی. فضاهاى هیلبرت

- (10.14) A. C. AITKEN, *Determinants and Matrices*, Oliver and Boyd, Edinburgh (1956).
- (10.15) R. K. EISENSCHITZ, *Matrix Algebra for Physicists*, Plenum Press, New York (1966).
- (10.16) M. C. PEASE III, *Methods of Matrix Algebra*, Academic Press, New York (1965).
- (10.17) J. L. SOULE, *Linear Operators in Hilbert Space*, Gordon and Breach, New York (1967).
- (10.18) W. SCHMEIDLER, *Linear Operators in Hilbert Space*, Academic Press, New York (1965).
- (10.19) N. I. AKHIEZER and I. M. GLAZMAN, *Theory of Linear Operators in Hilbert Space*, Ungar, New York (1961).

تبدیلات فوریه به توزیعها

- (10.20) R. STUART, *Introduction to Fourier Analysis*, Chapman and Hall, London (1969).
- (10.21) M. J. LIGHTHILL, *Introduction to Fourier Analysis and Generalized Functions*, Cambridge University Press (1964).
- (10.22) L. SCHWARTZ, *Théorie des Distributions*, Hermann, Paris (1967).
- (10.23) I. M. GEL'FAND and G. E. SHILOV, *Generalized Functions*, Academic Press, New York (1964).
- (10.24) F. OBERHETTINGER, *Tabellen zur Fourier Transformation*, Springer-Verlag, Berlin (1957).

احتمالات و آمار

- (10.25) J. BASS, *Elements of Probability Theory*, Academic Press, New York (1966). *Éléments de Calcul des Probabilités*, Masson, Paris (1974).
- (10.26) P. G. HOEL, S. C. PORT and C. J. STONE, *Introduction to Probability Theory*, Houghton-Mifflin, Boston (1971).
- (10.27) H. G. TUCKER, *An Introduction to Probability and Mathematical Statistics*, Academic Press, New York (1965).
- (10.28) J. LAMPERTI, *Probability*, Benjamin, New York (1966).
- (10.29) W. FELLER, *An Introduction to Probability Theory and its Applications*, Wiley, New York (1968).
- (10.30) L. BREIMAN, *Probability*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1968).

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.

ریاضی تر

- (10.33) G. PAPY, *Groups*, Macmillan, New York (1964).
- (10.34) A. G. KUROSH, *The Theory of Groups*, Chelsea, New York (1960).
- (10.35) L. S. PONTRYAGIN, *Topological Groups*, Gordon and Breach, New York (1966).

توابع مخصوص و جداول

- (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. AJZENSHTADT, 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. WOOTEN JR., *The 3-j and 6-j symbols*, M.I.T. Technology Press (1959); Crosby Lockwood and Sons, London.

۱۱. فیزیک اتمی
سطح مقدماتی

- (11.1) H. G. KUHN, *Atomic Spectra*, Longman, London (1969).
- (11.2) B. CAGNAC and J. C. PEBAY-PEYROULA, *Physique Atomique*, Vols. 1 and 2, Dunod, Paris (1971).
English translation : *Modern Atomic Physics*, Vol. 1 : *Fundamental Principles*, and 2 : *Quantum Theory and its Application*, Macmillan, London (1975).
- (11.3) A. G. MITCHELL and M. W. ZEMANSKY, *Resonance Radiation and Excited Atoms*, Cambridge University Press, London (1961).
- (11.4) M. BORN, *Atomic Physics*, Blackie and Son, London (1951).
- (11.5) H. E. WHITE, *Introduction to Atomic Spectra*, McGraw-Hill, New York (1934).
- (11.6) V. N. KONDRATIEV, *La Structure des Atomes et des Molécules*, Masson, Paris (1964).

مراجع (۳.۱) و (۱۲.۱) را نیز ببینید.

سطح پیشرفته‌تر

- (11.7) G. W. SERIES, *The Spectrum of Atomic Hydrogen*, Oxford University Press, London (1957).
- (11.8) J. C. SLATER, *Quantum Theory of Atomic Structure*, Vols. I and II, McGraw-Hill, New York (1960).

- (11.9) A. E. RUARK and H. C. UREY, *Atoms, Molecules and Quanta*, Vols. I and II, Dover, New York (1964).
- (11.10) *Handbuch der Physik*, Vols. XXXV and XXXVI, Atoms, s. FLÜGGE ed., Springer-Verlag Berlin (1956 and 1957).
- (11.11) N. F. RAMSEY, *Molecular Beams*, Oxford University Press, London (1956).
- (11.12) I. I. SOBEL'MAN, *Introduction to the Theory of Atomic Spectra*, Pergamon Press, Oxford (1972).
- (11.13) E. U. CONDON and G. H. SHORTLEY, *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge University Press (1953).

مقاله‌ها

مراجع متعدد و مقاله‌ها و کتابها، طبقه‌بندی شده و مورد بحث قرار گرفته، در زیر یافت می‌شوند.

- (11.14) J. C. ZORN, "Resource Letter MB-1 on Experiments with Molecular Beams, *Am. J. Phys.* **32**, 721 (1964).
See also: (3.13).
- (11.15) V. F. WEISSKOPF, "How Light Interacts with Matter", *Scientific American*, **219**, 60 (Sept. 1968).
- (11.16) H. R. CRANE, "The g Factor of the Electron", *Scientific American*, **218**, 72 (Jan. 1968).
- (11.17) M. S. ROBERTS, "Hydrogen in Galaxies", *Scientific American*, **208**, 94 (June 1963).
- (11.18) S. A. WERNER, R. COLÉLLA, A. W. OVERHAUSER and C. F. EAGEN, "Observation of the Phase Shift of a Neutron due to Precession in a Magnetic Field", *Phys. Rev. Letters*, **35**, 1053 (1975).

اتمهای نامأنوس

- (11.19) H. C. CORBEN and S. DE BENEDETTI, "The Ultimate Atom", *Scientific American*, **191**, 88 (Dec. 1954).
- (11.20) V. W. HUGHES, "The Muonium Atom", *Scientific American*, **214**, 93, (April 1966).
"Muonium", *Physics Today*, **20**, 29 (Dec. 1967).
- (11.21) S. DE BENEDETTI, "Mesonic Atoms", *Scientific American*, **195**, 93, (Oct. 1956).
- (11.22) C. E. WIEGAND, "Exotic Atoms", *Scientific American*, **227**, 102, (Nov. 1972).
- (11.23) V. W. HUGHES, "Quantum Electrodynamics: experiment", in *Atomic Physics*, B. Bederson, V. W. Cohen and F. M. Pichanick eds., Plenum Press, New York (1969).
- (11.24) R. DE VOE, P. M. MC INTYRE, A. MAGNON, D. Y. STOWELL, R. A. SWANSON and V. L. TELEGDY, "Measurement of the muonium Hfs Splitting and of the muon moment by double resonance, and new value of α ", *Phys. Rev. Letters*, **25**, 1779 (1970).
- (11.25) K. E. 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.

سطح پیشرفته‌تر

- (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*, 3rd ed., Wiley, New York (1966).
- (13.3) J. M. ZIMAN, *Principles of the Theory of Solids*, Cambridge University Press, London (1972).
- (13.4) F. SEITZ, *Modern Theory of Solids*, McGraw-Hill, New York (1940).

سطح پیشرفته‌تر

کتابهای عمومی

- (13.5) C. KITTEL, *Quantum Theory of Solids*, Wiley, New York (1963).
- (13.6) R. E. PEIERLS, *Quantum Theory of Solids*, Oxford University Press, London (1964).
- (13.7) N. F. MOTT and H. JONES, *The Theory of the Properties of Metals and Alloys*, Clarendon Press, Oxford (1936); Dover, New York (1958).

کتابهای پیشرفته‌تر

- (13.8) M. BORN and K. HUANG, *Dynamical Theory of Crystal Lattices*, Oxford University Press, London (1954).

- (13.9) J. M. ZIMAN, *Electrons and Phonons*, Oxford University Press, London (1960).
 (13.10) H. JONES, *The Theory of Brillouin Zones and Electronic States in Crystals*, North Holland, Amsterdam (1962).
 (13.11) J. CALLAWAY, *Energy Band Theory*, Academic Press, New York (1964).
 (13.12) R. A. SMITH, *Wave Mechanics of Crystalline Solids*, Chapman and Hall, London (1967).
 (13.13) D. PINES and P. NOZIERES, *The Theory of Quantum Liquids*, Benjamin, New York (1966).
 (13.14) D. A. WRIGHT, *Semiconductors*, Associated Book Publishers, London (1966).
 (13.15) R. A. SMITH, *Semiconductors*, Cambridge University Press, London (1964).

مقالات

- (13.16) R. L. SPROULL, "The Conduction of Heat in Solids", *Scientific American*, **207**, 92 (Dec. 1962).
 (13.17) A. R. MACKINTOSH, "The Fermi Surface of Metals", *Scientific American*, **209**, 110 (July 1963).
 (13.18) D. N. LANGENBERG, D. J. SCALAPINO and B. N. TAYLOR, "The Josephson Effects", *Scientific American* **214**, 30 (May 1966).
 (13.19) G. L. POLLACK, "Solid Noble Gases", *Scientific American*, **215**, 64 (Oct. 1966).
 (13.20) B. BERTMAN and R. A. GUYER, "Solid Helium", *Scientific American*, **217**, 85 (Aug. 1967).
 (13.21) N. MOTT, "The Solid State", *Scientific American*, **217**, 80 (Sept. 1967).
 (13.22) M. Ya. AZBEL, M. I. KAGANOV and I. M. LIFSHITZ, "Conduction Electrons in Metals", *Scientific American*, **228**, 88 (Jan. 1973).
 (13.23) W. A. HARRISON, "Electrons in Metals", *Physics Today*, **22**, 23 (Oct. 1969).

۱۴. تشدید هسته‌ای

- (14.1) A. ABRAGAM, *The Principles of Nuclear Magnetism*, Clarendon Press, Oxford (1961).
 (14.2) C. P. SLICHTER, *Principles of Magnetic Resonance*, Harper and Row, New York (1963).
 (14.3) G. E. PAKE, *Paramagnetic Resonance*, Benjamin, New York (1962).

همچنین به فصلهای ۵، ۶، و ۷ کتاب زیر رجوع کنید.

مقالات

- (14.4) G. E. PAKE, "Fundamentals of Nuclear Magnetic Resonance Absorption, I and II. *Am. J. Phys.*, **18**, 438 and 473 (1950).
 (14.5) E. M. PURCELL, "Nuclear Magnetism", *Am. J. Phys.*, **22**, 1 (1954).
 (14.6) G. E. PAKE, "Magnetic Resonance", *Scientific American*, **199**, 58 (Aug. 1958).
 (14.7) K. WÜTHRICH and R. C. SHULMAN, "Magnetic Resonance in Biology", *Physics Today*, **23**, 43 (April 1970).
 (14.8) F. BLOCH, "Nuclear Induction", *Phys. Rev.* **70**, 460 (1946).
 Numerous other references, in particular to original articles, can be found in:
 (14.9) R. E. NORBERG, "Resource Letter NMR-EPR-1 on Nuclear Magnetic Resonance and Electron Paramagnetic Resonance", *Am. J. Phys.*, **33**, 71 (1965).

۱۵. اپتیک کوانتومی: میزرها و لیزرها

دمش اپتیکی: میزرها و لیزرها

- (15.1) R. A. BERNHEIM, *Optical Pumping: An Introduction*, Benjamin, New York (1965). This book contains many references. In addition, several important original papers are reprinted.
- (15.2) *Quantum Optics and Electronics, Les Houches Lectures 1964*, C. DE WITT, A. BLANDIN and C. COHEN-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 می‌دهد و دسته‌بندی می‌کند:

- (15.11) H. W. MOOS, "Resource Letter MOP-1 on Masers (Microwave through Optical) and on Optical Pumping", *Am. J. Phys.*, **32**, 589 (1964).
- (15.12) P. CARRUTHERS, "Resource Letter QSL-1 on Quantum and Statistical Aspects of Light", *Am. J. Phys.*, **31**, 321 (1963).
Reprints of many important papers on Lasers have been collected in:
- (15.13) *Laser Theory*, F. S. BARNES ed., I.E.E.E. Press, New York (1972).
- (15.14) H. LYONS, "Atomic Clocks", *Scientific American*, **196**, 71 (Feb. 1957).
- (15.15) J. P. GORDON, "The Maser", *Scientific American*, **199**, 42 (Dec. 1958).
- (15.16) A. L. BLOOM, "Optical Pumping", *Scientific American*, **203**, 72 (Oct. 1960).
- (15.17) A. L. SCHAWLOW, "Optical Masers", *Scientific American*, **204**, 52 (June 1961).
"Advances in Optical Masers", *Scientific American*, **209**, 34 (July 1963). "Laser Light", *Scientific American*, **219**, 120 (Sept. 1968).
- (15.18) M. S. FELD and V. S. LETOKHOV, "Laser Spectroscopy", *Scientific American*, **229**, 69 (Dec. 1973).

اپتیک غیر-خطی

- (15.19) G. C. BALDWIN, *An Introduction to Non-Linear Optics*, Plenum Press, New York (1969).
- (15.20) F. ZERNIKE and J. E. MIDWINTER, *Applied Non-Linear Optics*, Wiley Interscience, New York (1973).

(15.21) N. BLOEMBERGEN, *Non-Linear Optics*, Benjamin, New York (1965).

همچنین متن سخنرانیهای این نویسنده در مراجع (۲.۱۵) و (۳.۱۵) را ببینید.

مقالات

(15.22) J. A. GIORDMAINE, "The Interaction of Light with Light", *Scientific American*, **210**, 38 (Apr. 1964).

"Non-Linear Optics", *Physics Today*, **22**, 39 (Jan. 1969).

۱۶. فیزیک هسته‌ای و فیزیک ذره

مقدمه‌ای بر فیزیک هسته‌ای

(16.1) L. VALENTIN, *Physique Subatomique: Noyaux et Particules*, Hermann, Paris (1975).

(16.2) D. HALLIDAY, *Introductory Nuclear Physics*, Wiley, New York (1960).

(16.3) R. D. EVANS, *The Atomic Nucleus*, McGraw-Hill, New York (1955).

(16.4) M. A. PRESTON, *Physics of the Nucleus*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1962).

(16.5) E. SEGRE, *Nuclei and Particles*, Benjamin, New York (1965).

کتابهای فیزیک هسته‌ای پیشرفته‌تر

(16.6) A. DESHALIT and H. FESHBACH, *Theoretical Nuclear Physics. Vol. 1: Nuclear Structure*, Wiley, New York (1974).

(16.7) J. M. BLATT and V. F. WEISSKOPF, *Theoretical Nuclear Physics*, Wiley, New York (1963).

(16.8) E. FEENBERG, *Shell Theory of the Nucleus*, Princeton University Press (1955).

(16.9) A. BOHR and B. R. MOTTELSON, *Nuclear Structure*, Benjamin, New York (1969).

فیزیک ذره مقدماتی

(16.10) D. H. FRISCH and A. M. THORNDIKE, *Elementary Particles*, Van Nostrand, Princeton (1964).

(16.11) C. E. SWARTZ, *The Fundamental Particles*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1965).

(16.12) R. P. FEYNMAN, *Theory of Fundamental Processes*, Benjamin, New York (1962).

(16.13) R. OMNES, *Introduction à l'Etude des Particules Élémentaires*, Ediscience, Paris (1970).

(16.14) K. NISHIJIMA, *Fundamental Particles*, Benjamin, New York (1964).

کتابهای فیزیک ذره‌ای پیشرفته‌تر

(16.15) B. DIU, *Qu'est-ce qu'une Particule Élémentaire?* Masson, Paris (1965).

(16.16) J. J. SAKURAI, *Invariance Principles and Elementary Particles*, Princeton University Press (1964).

(16.17) G. KÄLLEN, *Elementary Particle Physics*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1964).

(16.18) A. D. MARTIN and T. D. SPEARMAN, *Elementary Particle Theory*, North Holland, Amsterdam (1970).

(16.19) A. O. WEISSENBERG, *Muons*, North Holland, Amsterdam (1967).

مقالات

(16.20) M. G. MAYER, "The Structure of the Nucleus", *Scientific American*, **184**, 22 (March 1951).

(16.21) R. E. PEIERLS, "The Atomic Nucleus", *Scientific American*, **200**, 75 (Jan. 1959).

(16.22) E. U. BARANGER, "The present status of the nuclear shell model", *Physics Today*, **26**, 34 (June 1973).

- (16.23) S. DE BENEDETTI, "Mesonic Atoms", *Scientific American*, **195**, 93 (Oct. 1956).
- (16.24) S. DE BENEDETTI, "The Mössbauer Effect", *Scientific American*, **202**, 72 (April 1960).
- (16.25) R. H. HERBER, "Mössbauer Spectroscopy", *Scientific American*, **225**, 86 (Oct. 1971).
- (16.26) S. PENMAN, "The Muon", *Scientific American*, **205**, 46 (July 1961).
- (16.27) R. E. MARSHAK, "The Nuclear Force", *Scientific American*, **202**, 98 (March 1960).
- (16.28) M. GELL-MANN and E. P. ROSENBAUM, "Elementary Particles", *Scientific American*, **197**, 72 (July 1957).
- (16.29) G. F. CHEW, M. GELL-MANN and A. H. ROSENFELD, "Strongly Interacting Particles", *Scientific American*, **210**, 74 (Feb. 1964).
- (16.30) V. F. WEISSKOPF, "The Three Spectroscopies", *Scientific American*, **218**, 15 (May 1968).
- (16.31) U. AMALDI, "Proton Interactions at High Energies", *Scientific American*, **229**, 36 (Nov. 1973).
- (16.32) S. WEINBERG, "Unified Theories of Elementary-Particle Interaction", *Scientific American*, **231**, 50 (July 1974).
- (16.33) S. D. DRELL, "Electron-Positron Annihilation and the New Particles", *Scientific American*, **232**, 50 (June 1975).
- (16.34) R. WILSON, "Form Factors of Elementary Particles", *Physics Today*, **22**, 47 (Jan. 1969).
- (16.35) E. S. ABERS and B. W. LEE, "Gauge Theories", *Physics Reports*, **9C**, 1, Amsterdam (1973).

نمایه

	آمار
~ در هسته ۵۴	~ یوزباینشتین ۲۴۱
~ دوپلر ۱۹۸	~ فرمی-دیراک ۲۴۱
~ رامان ۱۶۶	~ کوانتومی ۲۴۱
~ زیمان در اتم هیدروژن بدون اسپین ۵۰، ۸۱	اتمهای چندالکترونی ۲۶۴، ۲۵۵
~ زیمان در یوزیتونیم ۷۸	اتمهای دهنده ۲۹۹
~ زیمان ساختار فوق ریز اتم هیدروژن ۳۵	اتم هیدروژن
~ فوتوالکتریک ۱۹۳، ۱۷۳	اثر ساختار ریز زیمان در ~ ۸۱، ۵۰
~ موسباور ۱۹۸	اثر زیمان ساختار فوق ریز ~ ۳۵
~ هال ۲۹۹	انتقال لمب در ~ ۲۸
~ هانل ۱۶۶	انرژیهای نسبیته ~ ۲۷
احتمال گذار ۱۹۶، ۱۴۲، ۱۱۸، ۱۱۳، ۱۰۵	~ در میدان مغناطیسی ۸۱، ۵۲، ۳۵
اختلاطی (از یک حالت به دیگری) ۹۶، ۸۰	~ در میز هیدروژنی ۳۳
اختلال تابع زمان ۹۹	ساختار ریز ~ ۱۹
اسپین مجازی ۱۴۹	ساختار فوق ریز ~ ۲۸
اشباع ۱۶۱	اثر
اصل	~ اشتراک ۹۲
~ طرد ۲۸۸، ۲۸۴، ۲۶۰، ۲۳۸، ۲۲۹	~ در اتم هیدروژن ۹۲
۲۹۹	~ اوتلر-تاوونز ۱۹۰
	~ حجمی ۵۴

- باسخ غیرخطی ۱۴۶
پتانسیل
~ خودسازگار ۲۵۸
~ دوقطبی مغناطیسی ۵۴
~ شیمیایی ۲۸۹
بیروتون
اسپین و تکانه زاویه‌ای ~ ۵۶، ۵۵
جفت‌شدگی فوق‌ریز ~ ۵۵
پذیرفتاری
~ الکتریکی ۱۳۹، ۹۴
~ خطی ۱۵۶
~ غیرخطی ۱۶۱
~ مغناطیسی ۲۹۱
پوزیترون ۷۱
پوزیترونیم ۷۱
پیکربندی (الکترونی) ۲۶۴، ۲۶۰
پیمانهای ۳۵۷، ۱۲۹
پیوستاری از حالت‌های نهایی ۱۷۲، ۱۱۴
پهنای (طبیعی) ۱۸۶
تابع چگالی یک و دوزده‌ای ۳۰۹
تابع دلتای (دیراک) ۱۹۳
تانسور پذیرفتاری ۱۹۰
تبدیل مشاهده‌پذیرها توسط جایگشت ۲۲۵، ۲۱۷
تداخلها ۲۴۲
تراز فرمی ۲۹۶، ۲۹۰، ۲۸۹
ترازهای انرژی هلیوم ۲۶۴
ترانهشتها ۲۲۰
تشدید برای برانگیختگی سینوسی ۱۰۸، ۱۵۶
۱۶۲، ۱۶۷
تصحیحات نسبیتی ۲۷۹، ۱۱
~ جرم ۱۳
- ~ پاؤلی ۲۲۹، ۲۳۸، ۲۶۰، ۲۸۴.
۲۸۸، ۲۹۹
~ موضوعهای مقارن‌سازی ۲۲۵، ۲۴۹
الکترودینامیک (کوانتومی) ۲۸
الکترون
~ رسانش ۲۹۸
~ گیرنده ۳۰۰
~ مقید به‌طور کفسان ۱۳۷
انتقال لمب ۲۸، ۱۸۵
انتقالها و قوانین گزینش دوقطبی مغناطیسی ۱۳۵،
۱۳۷، ۱۴۸
انتگرال تبادل ۲۷۴
انتگرال شعاعی ۶۵
انرژی
~ پس‌زنی ۱۹۸
~ فرمی ۲۴۰، ۲۸۳، ۲۸۹
~ نوارهای الکترونها در جامدات ۲۸۳، ۲۹۶
اوربیتال اتمی ۳۱
ایزوتوپهای ${}^2\text{He}$ و ${}^3\text{He}$ هلیوم ۲۲۶، ۲۴۲، ۲۸۱
برانگیختگی غیرتشدیدی ۱۳۷
برخورد بین ذرات یکسان ۲۰۷، ۲۴۷، ۲۵۲، ۳۰۲
برهم‌کنش (های)
~ دوقطبی-دوقطبی بین دو گشتاور
مغناطیسی ۱۸، ۶۰
~ مغناطیسی ۱۰، ۱۶، ۲۷۹
~ یک اتم با یک موج الکترومغناطیسی ۱۲۳
بوزون ۲۲۵
یادمقارن‌نگر ۲۱۶، ۲۲۱
پارامغناطیس ۲۹۸
پارینه جایگشت ۲۲۰
باسخ خطی ۱۳۷، ۱۴۶، ۱۵۵

- تعداد ترمودینامیکی گاز الکترون ۲۸۹
تقریب
~ بورن ۱۲۰
~ جواب مشخصه ۱۶۷، ۱۱۴
~ دو قطبی الکترونیک ۱۲۹، ۱۲۷
~ (میدان یا پتانسیل) مرکزی ۲۶۴، ۲۵۵
تکانه زاویه‌ای بین دو ذره یکسان ۳۰۳
تکانه زاویه‌ای یک فوتون ۱۶۳
تکنایی ۲۷۵
توزیع فرمی-دیراک ۲۸۹
تولید هماهنگ ۱۶۲، ۱۵۹
جذب چند فوتون ۱۶۶، ۱۶۲
جذب یک کوانتوم، یک فوتون ۱۵۸، ۱۴۲، ۱۰۹
جفت‌شدگی اسپین-مدار ۲۳، ۱۳
جملات طیفی ۳۰۱، ۲۷۲، ۲۶۴
جمله
~ یاد تشدید ۱۱۰
~ تبادل ۲۴۹، ۲۴۲
~ تماسی ۳۰، ۱۸
~ داروین ۱۵
چگالش (بوز) ۲۴۲
چگالی حالتها ۲۹۲، ۲۸۷، ۱۷۴، ۱۱۴
~ ی نهایی ۱۷۴، ۱۱۴
چهارقطبی
قواعد گرینش و گذارهای ~ ۱۳۶
هامیلتونی ~ (الکترونیکی) ۱۳۳
حالت
~ پادمقارن ۲۲۱، ۲۱۶
~ شبه پایدار ۹۶
~ کت مقارن ۲۲۱، ۲۱۶
حرکت تقدیمی
~ توماس ۶۴
~ لارمور ۴۱
حفره ۲۹۹
خاموشی (شبه پایدار) ۹۶
خود یونشی ۲۶۶، ۱۷۳
درمیان اسلاتر ۲۳۱
دمش ۱۶۵، ۱۵۵، ۱۴۷
ذرات یکسان ۲۰۴
رابطه عدم قطعیت زمان-انرژی ۱۸۷، ۱۱۱
رسانا ۲۹۸
رسانندگی (الکترونیکی) جامد ۲۹۶
ساختار ریز
~ هامیلتونی ۲۷۹، ۶۵، ۱۱
~ هلیوم ۲۷۹
~ هیدروژن ۱۹
سیستم سه تراز ۱۹۰
سیستمهای دو تراز ۱۴۹، ۱۴۶
شرایط بورن-فن کارمن ۲۹۴
شرایط مرزی تناوبی ۲۹۳
ضریب
~ اینشتین ۱۴۵
~ شکل ۱۹۲
~ پراکندگی ۱۹۲
~ لانه ۸۵، ۴۱
طبقه‌بندی (تناوبی) عناصر ۲۶۲
طبقه‌بندی مندلیف ۲۹۲
طول موج کامپتون ۱۵

- عایق ۲۹۷
 عدد اشتغال ۲۳۲
 عمر ۱۸۳، ۱۷۳، ۹۶
 عملگرهای جایگشت ۲۱۹، ۲۱۳
 عناصر (طبقه‌بندی تناوبی) ۲۶۲
 فرمول ریایی ۱۷۰، ۱۰۰
 فرمیون ۲۲۵
 فرومغناطیسی ۲۷۸
 فوتونها ۱۶۲
 قاعده طلایی فرمی ۱۱۷
 قدرت نوسانگر ۱۴۱
 قضیه
 ~ اسپینی آماری ۲۲۶
 ~ تصویر ۳۹
 ~ ویگنر-اکارت ۳۹
 قطبش مؤلفه‌های زیمان ۸۷
 قطبش‌پذیری اتم هیدروژن ۹۳
 قواعد گزینش گذار دوقطبی (الکتریکی) ۱۳۱
 کیت ۲۲۷
 گاز الکترون آزاد ۲۸۳
 گرمای ویژه جامد ۲۹۰
 گرمای ویژه یک گاز الکترون ۲۸۷
 گذارهای ممنوع ۱۳۱
 گذارهای یک یا چندکوانتومی ۱۰۹، ۱۶۰، ۱۸۹
 گسیل القاشده ۱۵۸، ۱۴۲، ۱۰۹
 گسیل خودبه‌خودی ۱۸۵، ۱۷۳، ۱۴۵، ۹۶
 گشتاورهای چهارقطبی ۲۱۵
 لایه الکترونی ۲۶۰
 لیزرها ۱۶۲، ۱۴۹
 متقارن‌گر ۲۲۱، ۲۱۶
 مدار پرنفوذتر ۲۵۹
 مدل برداری ۴۲، ۲۱
 مشاهده‌پذیر متقارن ۲۳۵، ۲۱۸
 مشاهده‌پذیرها برای ذرات یکسان ۲۳۴، ۲۱۷
 معادله
 ~ بلاخ ۱۴۷، ۱۵۰
 ~ دیراک ۱۱، ۲۷
 ~ مادر ۱۴۸
 مگنتون (بور) هسته‌ای ۱۷
 میز ۱۶۲، ۱۴۹، ۳۳
 میون ۷۸
 میونیوم ۷۱
 ناپایداری ۱۷۳
 نمادگذاری طیف‌نمایی ۲۷۳، ۲۵
 نوار(های)
 ~ انرژی، ظرفیت، رسانش ۲۹۷
 ~ انرژی مجاز و ممنوع ۲۸۳
 ~ رسانش ۲۹۷
 ~ ظرفیت ۲۹۷
 ~ مجاز ۲۸۳
 نوسان بین دو حالت ۱۵۵
 نیمرساناها ۲۹۹
 واپاشی ۱۷۲
 واجفتیدگی (ساختار ریز یا فوق ریز) ۵۰، ۸۶
 واگتی تعویض ۲۶۶، ۲۰۹
 واهش ۱۹۶، ۱۴۷
 هامیلتونی دوقطبی (مغناطیسی) ۱۳۳
 هامیلتونی فوق ریز ۵۳، ۱۶