





دانشگاه فردوسی مشهد

انتشارات دانشگاه فردوسی (مشهد)، شماره ۱۰۲

# مبانی نظریه کوانتومی

سل ویدر

دانشگاه فیرلی دیکنسون

ترجمه

جعفر گودرزی

استادیار فیزیک دانشگاه فردوسی (مشهد)

نام کتاب : مبانی نظریه کوانتومی  
مؤلف : سل ویدر  
مترجم : جعفر گودرزی  
ویراستار : دکتر محسن سربیشه‌ای  
طراح و مونتاژ : محسن مومنی مهرجردی  
ناشر : انتشارات دانشگاه فردوسی (مشهد)  
تیراژ : ۲۰۰۰ نسخه  
تاریخ انتشار : مهرماه ۱۳۶۸  
چاپ و صحافی : چاپخانه دانشگاه فردوسی (مشهد)  
قیمت : ۱۵۶۰ ریال



## فهرست مطالب

<u>صفحه</u>	<u>عنوان</u>
سیزده	پیشگفتار
۱	قسمت اول : سیستمهای یک ذره‌ای
۳	فصل ۱ جنبه‌های تاریخی
۳	۱ تابش جسم سیاه
۶	۲ مدهای مشخصه در داخل یک کاواک
۱۰	۳ نظریه (کلاسیکی) رالی <sup>۱</sup> - جینز <sup>۲</sup>
۱۱	۴ نظریه (کوانتومی) پلانک <sup>۳</sup>
۱۳	۵ اثر فوتوالکتریک
۱۶	۶ اثر کامپتون <sup>۴</sup>
۱۷	۷ نظریه کوانتومی ماده
۱۸	۸ فرضیه دوپروی <sup>۵</sup> و آزمایش داویسن <sup>۶</sup> - جرمر <sup>۷</sup>
۱۹	۹ نظریه بوهر <sup>۸</sup> برای هیدروژن

1- Rayleigh

2- Jeans

3- Planck

4- Compton

5- De Broglie

6- Davisson

7- Germer

8- Bohr

۲۲	۱۰ اصل تناظر
۲۳	۱۱ خلاصه
۲۴	مسائل
۲۷	فصل ۲ مکانیک کلاسیکی
۲۷	۱ شکل نیوتنی مکانیک (غیرنسبیتی)
۳۲	۲ معادلات لاگرانژ <sup>۹</sup>
۴۱	۳ معادلات هامیلتون <sup>۱۰</sup>
۴۴	۴ گروه‌های پواسن <sup>۱۱</sup>
۴۶	۵ دینامیک نسبیتی
۴۷	مسائل
۵۱	فصل ۳ صورتبندی مکانیک کوانتومی
۵۱	۱ بردارها در یک فضای مختلط خطی $N$ بعدی
۵۶	۲ عملگرهای خطی
۶۰	۳ ویژه مقدارها و ویژه بردارها
۶۲	۴ جبر ویژه مقدارها و ویژه بردارها برای عملگرهای هرمیتی <sup>۱۲</sup>
۶۵	۵ جابه‌جاگر و مسئله ویژه مقدار
۶۷	۶ عملگر تصویرگر
۷۰	۷ اصول موضوع مکانیک کوانتومی
۷۸	۸ دینامیک کوانتومی
۸۳	۹ حالت‌های مانا
۸۴	۱۰ ابعاد " فضای کوانتومی "
۸۷	۱۱ نمایش مختصه‌ای
۸۹	۱۲ گذار به مکانیک موجی

۹۳	معادله موج شرودینگر <sup>۱۳</sup>
۹۶	معادله موج شرودینگر و جریان احتمال
۹۹	مسائل
۱۰۵	فصل ۴ مکانیک موجی در یک بعد
۱۰۵	طبقه‌بندی حالت‌های مانا در مکانیک موجی
۱۰۸	ذره آزاد در یک بعد
۱۰۹	پراکندگی از سدهای یک بعدی
۱۱۱	سد مستطیلی
۱۱۶	حالت‌های مانای مقید در یک بعد
۱۱۸	چاه نامتناهی
۱۲۱	چاه متقارن نامتناهی
۱۲۲	پاریته
۱۲۵	چاه متقارن متناهی
۱۲۹	نوسانگر هماهنگ
۱۳۵	خواص ویژه تابع‌های نوسانگر
۱۳۸	نوسانات در حالت‌های غیرمانا - تناظر کلاسیکی
۱۴۰	مسئله نوسانگر در نمادگذاری دیراک <sup>۱۴</sup> - روش نردبانی
۱۴۶	مسائل
۱۵۳	فصل ۵ مکانیک موجی در سه بعد
۱۵۴	مسئله ویژه مقداری در سه بعد
۱۵۴	ذره آزاد (مختصات دکارتی)
۱۵۸	ذره در یک جعبه
۱۶۱	نوسانگر ناهمسانگرد
۱۶۲	مختصات منحنی‌الخط

۱۶۵	مسئله نیروی مرکزی	۶
۱۶۹	کوانتش تگانه زاویه‌ای	۷
۱۷۵	ذره آزاد (مختصات کروی)	۸
۱۷۶	نوسانگر همسانگرد	۹
۱۷۹	حالت‌های مقید یک پتانسیل جاذبه کولنی	۱۰
۱۸۳	اتم هیدروژن	۱۱
۱۸۸	پارایته و مسئله نیروی مرکزی	۱۲
۱۹۰	اثر میدان مغناطیسی یکجواخت روی مسئله نیروی مرکزی	۱۳
۱۹۹	مسائل	
۲۰۳	فصل ۶ تگانه زاویه‌ای اسپینی	
۲۰۴	۱ نظریه پاولی <sup>۱۵</sup> برای اسپین الکترون	۱
۲۰۹	۲ خواص تبدیل کتهای اسپینی - تگانه زاویه‌ای کل	۲
۲۱۱	۳ اسپین و مسئله نیروی مرکزی	۳
۲۱۵	۴ مغناطیس اسپینی و برهم‌کنش اسپین - مدار در هیدروژن	۴
۲۱۸	۵ میدانهای مغناطیسی خارجی - اثر پاشن <sup>۱۶</sup> - پاک <sup>۱۶</sup>	۵
۲۲۱	مسائل	
۲۲۳	فصل ۷ روشهای تقریبی	
۲۲۳	۱ نظریه پیرشیدگی	۱
۲۲۴	۲ نظریه پیرشیدگی مانای حالت مقید ناتبهگن (روش رالی - شرودینگر)	۲
۲۲۸	۳ یک کاربرد از نظریه مرتبه اول	۳
۲۳۰	۴ نظریه مرتبه دوم	۴
۲۳۲	۵ پیرشیدگی یک تراز تبهگن	۵
۲۳۶	۶ کاربرد نظریه پیرشیدگی در یک تراز تبهگن - اثر استارک <sup>۱۷</sup> در هیدروژن	۶



۲۳۹	۷	اتم هیدرژن با برهم کنش اسپین - مدار
۲۴۴	۸	اثر غیرعادی زمین <sup>۱۸</sup> در هیدرژن
۲۴۷	۹	نظریه پریشیدگی وابسته به زمان
۲۴۹	۱۰	گذارهای القاء شده به وسیله یک پریشیدگی ثابت
۲۵۱	۱۱	گذارهای مرتبه اول - قاعده طلائی فرمی <sup>۱۹</sup>
۲۵۴	۱۲	تصحیحات مرتبه های بالاتر قاعده طلائی
۲۵۶	۱۳	گذارهای القاء شده به وسیله یک پریشیدگی هماهنگ
۲۵۷	۱۴	گذارهای تابشی در هیدرژن
۲۶۱	۱۵	دیدگاه اینشتین <sup>۲۰</sup> در گسیل خود به خود - توازن دقیق
۲۶۳	۱۶	روش وردشی (رالی - ریتس <sup>۲۱</sup> )
۲۶۸		مسائل

## فصل ۸ نظریه پراکندگی ۲۷۳

۲۷۳	۱	نظریه کلاسیکی پراکندگی
۲۷۷	۲	نظریه کوانتومی مانای (حالت پا برجا) پراکندگی
۲۸۰	۳	پراکندگی راترفورد <sup>۲۲</sup> (مورد کوانتومی)
۲۸۴	۴	بررسی پراکندگی مانا به روش پریشیدگی - سری بورن
۲۸۸	۵	تقریب اول بورن <sup>۲۳</sup>
۲۹۲	۶	تقریبه های بالاتر بورن
۲۹۳	۷	روش امواج جزئی
۲۹۷	۸	تقریب جابه جایی فاز جزئی
۳۰۰	۹	پراکندگی S - موج
۳۰۳	۱۰	پراکندگی کوانتومی دینامیکی و گذارها .
۳۰۶	۱۱	پراکندگی ناکشسان و جذب
۳۰۷		مسائل

18- Zeeman

19- Fermi

20- Einstein

21- Rayleigh-Ritz

22- Rutherford

23- Born

۳۱۱	قسمت دوم : سیستمهای چندذره‌ای
۳۱۲	فصل ۹ ذرات بدون برهم‌کنش
۳۱۳	۱ مکانیک کلاسیکی
۳۱۷	۲ گذار به مکانیک کوانتومی
۳۱۸	۳ نمایش مختصه‌ای و مکانیک موجی
۳۲۰	۴ عملگر جایگشت
۳۲۴	۵ سیستمهای ایده‌آل تمیزپذیر
۳۲۷	۶ سیستمهای ایده‌آل تمیزناپذیر
۳۲۹	۷ همبستگی‌های آماری در سیستمهای ایده‌آل بوز <sup>۲۳</sup> و فرمی
۳۳۱	۸ اتم هلیوم " ایده‌آل "
۳۳۳	۹ حالت‌های برانگیخته در هلیوم
۳۴۲	۱۰ گاز ایده‌آل کوانتومی
۳۴۴	۱۱ نمایش N ، عملگر چگالی ، و آمار کوانتومی
۳۵۱	مسائل
۳۵۵	فصل ۱۰ سیستمهای چندذره‌ای برهم‌کنش‌کننده
۳۵۶	۱ مسئله دوجسمی منزوی
۳۵۹	۲ پراکندگی از یک هدف متحرک
۳۶۳	۳ اتم هلیوم - بررسی به‌روش پربشیدگی
۳۶۷	۴ اتم هلیوم - یک روش وردشی
۳۶۹	۵ مدل آماری توماس <sup>۲۴</sup> و فرمی برای اتمهای پیچیده
۳۷۳	۶ روش میدان خود- سازگار و تقریب هارتری <sup>۲۵</sup> - فوک <sup>۲۶</sup> - اسلاتر <sup>۲۷</sup>
۳۷۸	۷ خواص اتمها در تقریب HFS

۳۸۲	۸	مولکولهای دو اتمی - تقریب هی دررو
۳۸۹	۹	مولکول هیدروژن و پیوند کووالانت (نظریه لندن - هایتلر <sup>۲۸</sup> )
۳۹۳	۱۰	تبدیل به مختصات بهنجار، شبکه خطی، فونونها
۴۰۰		مسائل

۴۰۵ قسمت سوم : مکانیک کوانتومی نسبیتی و نظریه میدانها

۴۰۷ فصل ۱۱ مکانیک کوانتومی نسبیتی

۴۰۷	۱	معادله کلاین <sup>۲۹</sup> - گوردون <sup>۳۰</sup>
۴۱۱	۲	معادله دیراک
۴۱۳	۳	ذرات آزاد دیراک
۴۱۵	۴	حالتهای انرژی منفی
۴۱۷	۵	یک ذره دیراک در یک میدان ایستا
۴۲۱	۶	ذره دیراک در یک پتانسیل کولنی - ساختار ریز در هیدروژن
۴۲۶		مسائل

۴۲۹ فصل ۱۲ نظریه میدان کوانتومی

۴۳۰	۱	نظریه کلاسیکی میدانها
۴۳۲	۲	چگالی هامیلتونی
۴۳۳	۳	کوانتش میدان
۴۳۴	۴	الکترو دینامیک کلاسیکی
۴۳۹	۵	هم ارزی بین تابش آزاد و نوسانگرها
۴۴۱	۶	کوانتش میدان (عرضی) تابش آزاد
۴۴۳	۷	الکترو دینامیک کوانتومی - گذارهای تابشی
۴۴۹	۸	پهن شدگی خطوط طیفی - رابط عدم قطعیت انرژی - زمان

۴۵۱	مسائل
۴۵۵	پیوست الف: تقریب وانتزل <sup>۳۱</sup> - کرامرز <sup>۳۲</sup> - بریلوئن <sup>۳۳</sup> (WKB) یا "انتگرال فاز" (۴۵۵)
۴۶۵	پیوست ب: تصویرهای هایزنبرگ <sup>۳۴</sup> و برهم کنش
۴۷۱	واژنامه:
۴۷۵	فهرست راهنما:

## پیشگفتار

برنامه فیزیک دوره لیسانس در بسیاری از دانشکده‌ها در جهتی مورد تجدید نظر قرار گرفته است که در دو نیمسال اول مطالبی از فیزیک جدید را بپوشاند و مکانیک کوانتومی را بر یک پایه نیمه کمی بررسی کند. دانشجو سپس درسی می‌گیرد که بر پایه نظریه کوانتومی صوری استوار است. این کتاب‌گذار آرامی از کارهای اولیه دوره لیسانس به مطالب پیشرفته‌تر را فراهم می‌آورد. متن حاضر شکل تکمیل یافته یادداشتهایی است که در یک درس دو نیمساله در دانشگاه فیرلی دیکینسون<sup>۱</sup> مورد استفاده قرار گرفته بودند. دروس پیش‌نیاز آن مکانیک، الکتریسیته و مغناطیس، و فیزیک جدید است.

بنا بر تجربه شخصی‌ام، دو روش آموزشی را برای نظریه کوانتومی مفید تشخیص داده‌ام. روش اول به‌طور نسبتاً زیادی بر شباهت بین معادله موج در اپتیک فیزیکی و معادله شرودینگر استوار است. این دیدگاه در واقع مسئول محدودکنندگی و نارسایی عنوان "مکانیک موجی" است. چون فرضیه دوبروی به‌عنوان سنگ زیر بنای مکانیک موجی به‌کار می‌رود، این روش به‌طور محسوسی با گسترش تاریخی سازگار است. به علاوه، حد کلاسیکی براحتی می‌تواند از طریق مقایسه با اپتیک هندسی، با نشان دادن شباهت‌های معادله هامیلتون - ژاکوبی<sup>۲</sup> و معادله آیکونال، توضیح داده شود. با این وجود تناظر صوری بین مکانیک کلاسیکی و مکانیک کوانتومی صریحاً روشن نیست. در این متن، من انتخاب دوم را، که گاهی اوقات "روش بندادی" نامیده می‌شود، برگزیده‌ام. اهمیت این روش که نخست هامیلتونی کلاسیکی را برحسب مختصات بندادی و

تکانه‌های همیوگ آنها نوشته و سپس تقارنهای مربوط به مسئله را مطالعه کنیم یکی از موضوعهای مهم این کتاب را تشکیل می‌دهد. از این نظر این کتاب به دقت روش ظریف ولی صوری دیراک را دنبال می‌کند\* . این کتاب مطلب را به صورتی مطرح می‌کند که برای دانشجویان مطلوب‌تر است. تناظر بین نظریه‌های کلاسیکی و کوانتومی از طریق مشابهت جابه‌جاگرها گروه پواسن ساخته می‌شود. قضیه اهرنفتست<sup>۳</sup> به عنوان یک اصل موضوع برای ربط دادن معادلات کلاسیکی حرکت به معادله شرودینگر به کار می‌رود. بعد از ارائه شکل عمومی مکانیک موجی در نماد - گذاری "براکت"<sup>۴</sup>، نشان خواهیم داد که مکانیک موجی تنها یکی از چند نمایش نظریه کوانتومی است.

توافق عموم بر این است که جایی که مکانیک موجی قابل اعمال باشد، ساده‌ترین و مستقیم‌ترین راه برای بررسی مسئله است. بیشتر مسائل در این کتاب، با ذراتی واقع در پتانسیلهای معلوم سروکار دارند و بدین ترتیب مکانیک موجی به طور وسیعی مورد استفاده قرار می‌گیرد و روشهای حل معادله دیفرانسیل شرودینگر به طور مفصل مورد بحث قرار می‌گیرند. با این وجود، هر جا که امکان داشته باشد، جوابها با استفاده از روشهای عمومی‌تر دیراک نیز به دست خواهند آمد. نظریه کوانتومی به مسائل منتخبی در فیزیک جدید، با قصد اکید آموزش نظریه کوانتومی و نه فیزیک جدید، اعمال می‌شود. احساس من این بوده است که بعد از ارائه دقیق مکانیک کوانتومی، فیزیک جدید به بهترین وجهی فهمیده و ارزیابی می‌شود. چون برهم‌کنشهای الکترومغناطیسی بهتر از دیگر برهم‌کنشها فهمیده می‌شوند، عمداً از اغلب کاربردها به فیزیک هسته‌ای احتراز کرده‌ام و بیشتر بحثها را به گستره اتمی و مولکولی محدود کرده‌ام.

این کتاب به سه قسمت تقسیم شده است - سیستمهای یک ذره‌ای (فصلهای ۱ تا ۸)، سیستمهای چند ذره‌ای (فصلهای ۹ و ۱۰)، و مکانیک کوانتومی نسبیتی و نظریه میدانها (فصلهای ۱۱ و ۱۲). در قسمت اول، فصلهای ۳ و ۷ مهم و تعیین کننده‌اند و احتمالاً تسلط دانشجویان آنها مشکلتر از سایر فصول حاصل خواهد شد. بدون توجه خاص به این دو فصل، آنچه که به دنبال می‌آید ممکن است نامفهوم باشد. در قسمت دوم، فصل ۹ به ذرات تمیزناپذیر و بدون برهم‌کنش می‌پردازد و موضوع تحت پوشش آن برای تقریباً تمام شاخه‌های فیزیک اساسی است. فصل ۱۰ شامل سیستمهای ذرات برهم‌کنش کننده است و در

\* P.A.M. Dirac, "The Principles of Quantum Mechanics,"  
4th ed. Oxford University, London, 1958.

صورت لزوم بعضی از بخشهای آن می‌توانند نادیده گرفته شوند. قسمت سوم شامل موضوعهای قدری پیشرفته‌تر است و در صورت کمبود وقت می‌توان کلاً از آن چشم‌پوشی کرد. چنانچه تمام دوازده فصل بخواهند تحت پوشش قرار گیرند حداقل تا نیمه فصل ۷ بایستی در پایان نیمسال اول تدریش شده باشد.

من به همکاران، دانشجویان و ویراستارانی که با صرف وقت و کوشش خود موجهات بهتر شدن این متن را فراهم آورده‌اند بسیار مدیونم. سپاس من به دانشجوی ممتازم آقای آلن بلومبرگ<sup>۵</sup> که دست‌نوشته‌ها را بازخوانی کرد و به پروفیسور آرتور<sup>۶</sup> که بررسی‌های موشکافانه وی از قسمت‌های مشکل‌کتاب تعداد غلط‌ها را به نحو چشمگیری تقلیل داد. بخصوص از پروفیسور فلوری<sup>۷</sup> و پروفیسور زیدلر<sup>۸</sup> به خاطر بخش‌های بسیار جالب و پیشنهاد‌های ارزشمندشان درباره نظریه کوانتومی که این کتاب را بهبود بخشیدند سپاسگزارم. مسئولیت هرگونه اشتباه باقیمانده یا نارسائی، کاملاً متوجه خود من است. همسرم سوزان، در حالی که از فرزندانم آری، جان، و جرمی مواظبت می‌کرد با شکیبائی تمام دست‌نوشته‌ها را، گاهی برای چندبار، ماشین می‌نمود و گوشه‌های سودمند بسیاری به من می‌کرد. وی به خاطر این زحمات و به خاطر گذشتی که در طول این کار از خود نشان داد، شایسته‌ترین تشکرات من است.

---

5- Alan Blumberg

6- Arthur

7- Flory

8- Zeidler





قسمت اول

سیستمهای يك ذره‌ای



# ۱

## جنبه‌های تاریخی

گسترش فیزیک در قرن بیستم، با دو کشف بزرگ رقم زده شده است. اول، نسبیت خاص (اینشتین، ۱۹۰۵) که معادلات دینامیک کلاسیکی را وقتی سرعت ماده با سرعت نور قابل مقایسه می‌شود تصحیح می‌کند. دوم، مکانیک کوانتومی (شرودینگر، هایزنبرگ، بورن، دیراک، ۱۹۲۸-۱۹۱۰) که در مقایسه با قوانین نیوتنی تصویر دقیق‌تری از دینامیک سیستم‌های میکروسکوپیکی به ما می‌دهد. در اواخر قرن نوزدهم، شواهد تجربی بتدریج انباشته شدند و پیشنهاد می‌کردند که نظریه‌های کلاسیکی نیوتن و ماکسول<sup>۱</sup> برای توضیح بسیاری از پدیده‌های وابسته به ماده و تابش مناسب نیستند. به عنوان اولین قدم در مطالعه مکانیک کوانتومی، به بررسی بعضی از مسائلی که در اوایل قرن در مقابل فیزیکدانها قرار گرفته بود می‌پردازیم.

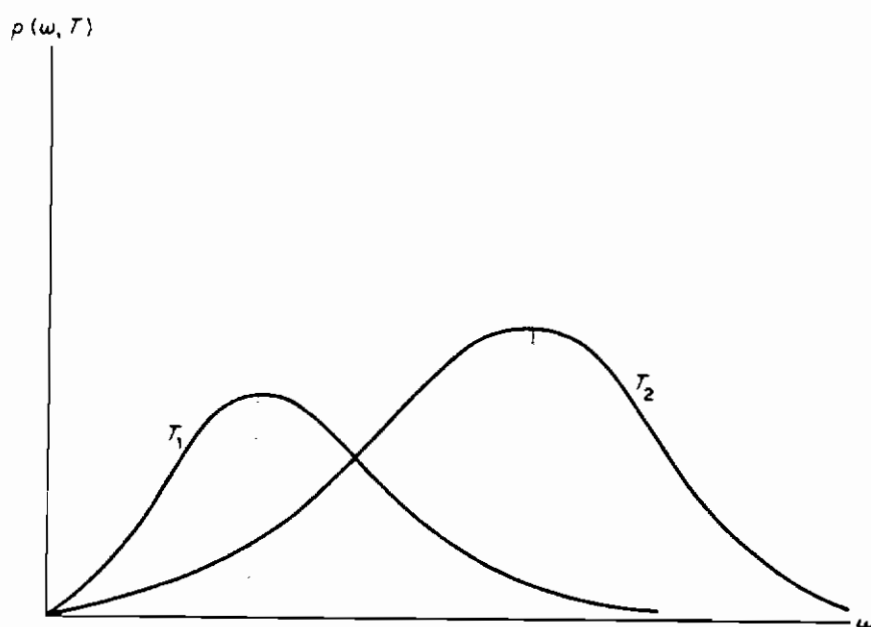
### ۱- تابش جسم سیاه

ماده به طور دائم در حال گسیل و جذب تابش است. هر جسم در اثر اغتشاشات حرارتی تابش گسیل می‌دارد. به عنوان مثال، یک فلز وقتی تا چند هزار درجه کلوین<sup>۲</sup> گرم شود "ملتهب قرمز" می‌شود. بنابراین، وقتی جسمی با دمای  $T$  در داخل محفظه بسته‌ای که قسمتی از فضا را اشغال کرده است قرار گیرد، محفظه حاوی تابش الکترو مغناطیسی خواهد بود.

1- Maxwell

2- Kelvin

در حالت تعادل، این تابش، تابش "جسم سیاه" نامیده می‌شود، و به‌طور تجربی ثابت شده است که شامل ترکیب مشخصی از فرکانسها (یعنی، رنگها) است که فقط تابع دمای کلویین  $T$  است و تابع ترکیب شیمیایی، محتویات یا شکل محفظه نیست.



شکل (۱-۱). چگالی تابشی جسم سیاه در دو دمای متفاوت کلویین ( $T_2 > T_1$ ).

چگالی طیفی تابش  $\rho(\omega, T)$  را به‌صورت انرژی (در واحد حجم) تابشی‌ای که در گستره فرکانس (رادیان بر ثانیه) بین  $\omega$  و  $\omega + d\omega$  قرار داشته باشد، تعریف می‌کنیم. در شکل (۱-۱) چگالی طیفی در دو دمای متفاوت نشان داده شده است. سعی خواهیم کرد منحنی‌های آن را، که منحنی‌های فوق‌دونمونه از آنها هستند، از نظریه کلاسیکی به‌دست آوریم. شکست ما در این مورد، نمای بهتری از نیاز به مکانیک کوانتومی به‌ما می‌دهد و در عین حال تعریفی در فیزیک کلاسیکی برایمان فراهم می‌کند. از نظر ریاضی داریم

$$d\mathcal{E} = \rho(\omega, T) d\omega. \quad (1-1)$$

چگالی انرژی کل مربوط به تمام فرکانسهای ممکن عبارت است از

$$\mathcal{E}(T) = \frac{E}{V} = \int_0^{\infty} \rho(\omega, T) d\omega \quad (2-1)$$

که در آن  $E$  انرژی کل و  $V$  حجم محفظه است.

کوششهای گوناگونی برای توضیح منشأ طیف جسم سیاه صورت گرفته‌بود. وین<sup>۳</sup> پیشنهاد

کرد که شکل عمومی چگالی طیفی می‌تواند با انجام یک فرایند ترمودینامیکی (چرخه کارنو<sup>۴</sup>) روی تابش داخل محفظه به دست آید. وی با در نظر گرفتن تابش به عنوان ماده کار در ماشین کارنو، به این نتیجه رسید که شکل عمومی  $\rho(\omega, T)$  باید به صورت

$$\rho(\omega, T) = \omega^3 F\left(\frac{\omega}{T}\right) \quad (۳-۱)$$

باشد، که در آن  $F$  تابعی از متغیر  $x = \omega/T$  است. ترمودینامیک به تنهایی نمی‌تواند تابع  $F$  را معین کند، ولی آن نظریه‌هایی را که با قانون "وین" (۳-۱) مطابقت نمی‌کنند از میدان خارج می‌کند.

با استفاده از قانون وین و (۲-۱)، چگالی انرژی کل در داخل محفظه خواهد شد

$$\mathcal{E}(T) = \int_0^\infty \omega^3 F\left(\frac{\omega}{T}\right) d\omega = T^4 \int_0^\infty x^3 F(x) dx \quad (۴-۱)$$

که در آن  $x = \omega/T$ .

این انتگرال (اگر همگرا باشد) ایجاب می‌کند که چگالی انرژی کل در داخل محفظه متناسب باشد با  $T^4$ ، یعنی،

$$\mathcal{E}(T) = \sigma' T^4 \quad (۴-۱ الف)$$

که در آن ضریب ثابت عبارت است از  $\sigma' = \int_0^\infty x^3 F(x) dx$ . معادله (۴-۱ الف) چگالی انرژی الکترو مغناطیسی را به دمای کلوین مربوط می‌سازد. برای تابش همسانگرد، شار تابشی  $J$  (انرژی عبور کرده از واحد سطح در واحد زمان) به نوبه خود می‌تواند با رابطه

$$J = \frac{1}{4} c \mathcal{E}$$

به چگالی انرژی وابسته شود، که در آن  $c$  سرعت نور است (رک مسئله ۲-۱). معادله (۴-۱ الف) خواهد شد

$$J = \frac{1}{4} c \sigma' T^4 = \sigma T^4. \quad (۵-۱)$$

این، قانون استفان - بولتزمن<sup>۵</sup> است که در آن ثابت استفان - بولتزمن عبارت است از

$$\sigma = \frac{c}{4} \int_0^\infty x^3 F(x) dx.$$

در حالی که  $\sigma$  به طور تجربی برابر با  $\sigma = 5.67 \times 10^{-8} \text{ (cgs)}$  به دست آمده بود،  $F(x)$  می‌بایستی به طور نظری تعیین می‌شد.

نتیجه دوم (۳-۱) قانون "جابه‌جائی" است که بنا بر آن رنگ غالب (یعنی، فرکانسی که در آن  $\rho(\omega, T)$  بیشینه است) در داخل محفظه متناسب با دما است، یعنی،

$$\omega_0 \propto T. \quad (۱-۶)$$

این جا به جایی در فرکانس بر اثر دما به طور تجربی نیز تأیید شده بود. افزایش دمای یک ماده، انتقالی از "قرمز ملتهب" به سوی "سفید ملتهب"، که بیانگر حضور یک مولفه آبی رنگ است، ایجاد می‌کند. فرکانس  $\omega_0$  که در آن  $\rho$  بیشینه است می‌تواند با مشتق‌گیری از (۱-۳) به دست آید. با به کار بردن متغیر  $x = \omega/T$  خواهیم داشت

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \omega^3 F(\omega/T)}{\partial \omega} \right|_{\omega=\omega_0} &= T^4 \left\{ \frac{d}{dx} x^3 F(x) \right\}_{x=x_0} = 0 \\ &= T^4 \{ x_0^3 F'(x_0) + 3x_0^2 F(x_0) \} = 0 \end{aligned}$$

یا

$$x_0 F'(x_0) - 3F(x_0) = 0. \quad (۱-۷)$$

برای هر تابع "معقول"  $F(x)$  در قانون وین، رابطه (۱-۷) یک معادله معمولی را نشان می‌دهد که می‌تواند نسبت به  $x_0$  حل شود و رابطه

$$x_0 = \frac{\omega_0}{T} = \text{const.}$$

را به عنوان قانون جابه‌جایی (۱-۶) به دست دهد. البته، مقدار ثابت بستگی به انتخاب  $F$  دارد. در واقع، برای بعضی از توابع، (۱-۷) جواب ندارد و قانون جابه‌جایی با شکست مواجه می‌شود.

به طور خلاصه، مشاهده می‌کنیم که قانون وین منجر به یک چگالی طیفی می‌شود که هم با قانون "استفان-بولتزمن" سازگار است و هم با قانون جابه‌جایی. ثابتهای وابسته به این قوانین به تابع بخصوص  $F$ ، که نمی‌تواند به کمک ترمودینامیک تنها تعیین شود، بستگی دارند. در واقع، جستجوی تابع  $F$  بود که پلانک را به کشف مکانیک کوانتومی هدایت کرد. بعداً "قوانین مکانیک و الکترومغناطیس را، به امید به دست آوردن تابع  $F(\omega/T)$ ، به مدل‌های متعددی اعمال خواهیم کرد.

## ۲- مدهای مشخصه در داخل یک کاواک

در نظریه کلاسیکی، تابش الکترومغناطیسی ترکیبی است از ارتعاشات میدانهای الکتریکی و مغناطیسی  $E$  و  $B$ . چون تابش جسم سیاه در داخل یک کاواک مستقل از شکل و ترکیب محفظه است، انتخاب یک کاواک فلزی مکعبی شکل بزرگ نه تنها از عمومیت مسئله کم نمی‌کند

بلکه از نظر ریاضی تسهیلاتی فراهم می‌کند. قوانین الکترومغناطیس ایجاب می‌کنند که این میدانها در معادلات موج زیر صدق کنند

$$\begin{aligned}\nabla^2 \mathbf{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} &= 0 \\ \nabla^2 \mathbf{B} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} &= 0\end{aligned}\quad (۸-۱)$$

که در آن  $c$  سرعت نور در خلاء است. به علاوه، میدانها باید در چند شرط مرزی در روی سطح فلز صدق کنند. به عنوان مثال، مولفه‌های مماسی  $E$  و مولفه‌های قائم  $B$  باید در سطح فلز صفر شوند. این نکته ایجاب می‌کند که فقط بعضی از مدهای مشخصه (امواج ساکن) می‌توانند توسط کاواک حفظ شوند. مدها و فرکانسهای مشخصه آنها می‌توانند از قیاس با تار مرتعش به دست آیند.

مدهای طبیعی تار مرتعش با دو انتهای ثابت به وسیله

$$y_n = \exp(-i\omega_n t) \sin \frac{n\pi}{L} x \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (۹-۱)$$

نمایش داده می‌شوند که در آن  $L$  طول تار است. این جوابها هم در معادله موج (۸-۱) و هم در شرایط مرزی (یعنی  $y_n(0, t) = y_n(L, t) = 0$ ) صدق می‌کنند. می‌توان مستقیماً نشان داد که فرکانسهای طبیعی به وسیله

$$\omega_n = \frac{vn\pi}{L} \quad (۱۰-۱)$$

که در آن  $v$  سرعت فاز امواج عرضی در طول تار است، داده می‌شوند. هر مد با یک عدد صحیح  $n$  مشخص می‌شود و دارای یک فرکانس معین و یکتا است.

مدهای مربوط به تابش در داخل یک کاواک فلزی دارای شکلی شبیه به (۹-۱) هستند، به استثنای اینکه این مدها با سه عدد صحیح مثبت  $l$ ،  $m$ ، و  $n$  مشخص می‌شوند. به علاوه، با مقایسه با (۱۰-۱)، فرکانسهای مشخصه با

$$\omega_{l,m,n} = \frac{c\pi}{L} (l^2 + m^2 + n^2)^{1/2}. \quad (۱۱-۱)$$

داده می‌شوند. در اینجا  $L$  طول یک ضلع مکعب است. توجه کنیم که تمام مدها فرکانسهای متمایزی ندارند. به عنوان مثال، از (۱۱-۱) نتیجه خواهد شد که سه "مد"  $(l=1, m=1, n=2)$ ،  $(l=1, m=2, n=1)$  و  $(l=2, m=1, n=1)$  دارای یک فرکانس  $\omega = (c\pi/L)\sqrt{6}$  هستند. تعداد مدهایی که دارای یک فرکانس باشند،  $N(\omega)$ ، تبهگنی مد نامیده می‌شود و برابر است با دو برابر تعداد طرقتی که در آنها اعداد صحیح در

(۱-۱۱) می‌توانند به یک مقدار  $\omega$  منجر شوند. ضرب دو از این واقعیت ناشی می‌شود که نور یک موج عرضی است و دارای دو حالت قطبش است. هرچه  $\omega$  بزرگ‌تر می‌شود تعداد طرق ممکن برای انتخاب اعداد صحیح زیادتر می‌شود به‌طوری که  $N(\omega)$  با  $\omega$  افزایش پیدا می‌کند.

فرض کنیم که انرژی متوسط حرارتی یک مد در یک دمای مشخص، فقط با فرکانس آن معین شود، یعنی، فرض کنیم

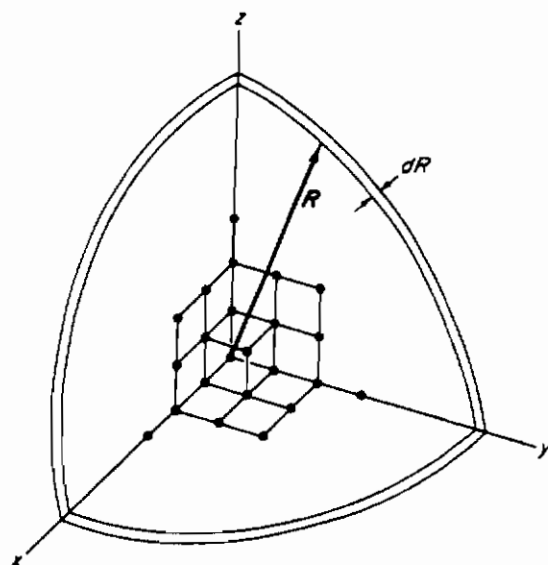
$$\bar{E}_{l, m, n} = \bar{E}(\omega). \quad (1-12)$$

این فرض در زیر توجیه خواهد شد. اگر بخواهیم انرژی کل حمل شده به وسیله مدهای متفاوت را محاسبه کنیم، می‌توانیم بنویسیم

$$E = \sum_{\omega} \bar{E}(\omega) N(\omega). \quad (1-13)$$

انرژی موجود در مدهایی که دارای یک فرکانس  $\omega$  هستند دقیقاً عبارت است از انرژی هر مد،  $\bar{E}(\omega)$ ، ضربدر تعداد مدهایی که دارای این فرکانس می‌باشند،  $N(\omega)$ ، انرژی کل با جمع بندی روی تمام فرکانسها به دست می‌آید. برای انجام این جمع بندی به نمایش صرفاً ریاضیاتی سیستم فیزیکی نظر می‌افکنیم.

مدهای داخل کاواک می‌توانند به وسیله نقطه‌هایی که معرف اعداد صحیح وابسته به آنها در  $\frac{1}{8}$  اول فضای "اعداد صحیح" است نمایش داده شوند (شکل ۱-۲). نقاط  $l$ ،  $m$  و  $n$ ، به



شکل (۱-۲). نمایش مدها به وسیله نقطه‌هایی در  $\frac{1}{8}$  اول فضای اعداد صحیح.



ترتیب، روی محورهای  $x$ ،  $y$  و  $z$  نمایش داده شده‌اند. توجه کنیم که فرکانس مد به وسیله فاصله نقطه معرف مد از مبدأ، یعنی،  $\omega = (c\pi/L)R$  تعیین می‌شود که در آن

$$R = (l^2 + m^2 + n^2)^{1/2}$$

تبهگنی مد،  $N(\omega)$ ، برابر است با دوبرابر تعداد نقاط مد واقع بر روی  $\frac{1}{8}$  اول کره‌ای به شعاع  $R$ . برای تابش حرارتی نقاط مد غالبی که مورد توجه هستند دور از مبدأ قرار دارند که مسلماً "متناظرند با فرکانسهای بالاتر، یعنی، فرکانسهایی که در داخل ناحیه مادون قرمز یا بالاتر از آن قرار دارند. این مدها به قدری نزدیک به یکدیگر قرار دارند که می‌توان آنها را پیوسته تلقی کرد و تعداد مدهای بین  $\omega$  و  $\omega + d\omega$  را به صورت  $dN = G(\omega) d\omega$  تعریف کرد، که در آن  $G(\omega)$  چگالی مد است که بعداً آنرا محاسبه خواهیم کرد. انرژی کل داخل کاواک (۱-۱۳) خواهد شد

$$E = \int \bar{\epsilon}(\omega) dN = \int \bar{\epsilon}(\omega) G(\omega) d\omega \quad (1-14)$$

برای پیدا کردن  $G(\omega)$  خاطرنشان کنیم که  $dN$  بیانگر حجمی از فضای اعداد صحیح است که در داخل لایه‌ای کروی به شعاع  $R$  و ضخامت  $dR$ ، در  $\frac{1}{8}$  اول، قرار دارد، یعنی،

$$dN = 2 \cdot \frac{1}{8} \cdot 4\pi R^2 dR = \pi R^2 dR \quad (1-15)$$

ضریب ۲ از فیزیک سرچشمه می‌گیرد نه از مدل ریاضی به کار برده شده، از این نظر که باید هردو درجه قطبش را در نظر بگیریم. با استفاده از  $\omega = (c\pi/L)R$  خواهیم داشت

$$R^2 dR = \left(\frac{L}{c\pi}\right)^3 \omega^2 d\omega = \frac{\mathcal{V}}{c^3\pi^3} \omega^2 d\omega \quad (1-16)$$

که در آن  $\mathcal{V} = L^3$  حجم کاواک است. بالاخره، نتیجه می‌گیریم

$$dN = \frac{\mathcal{V}}{c^3\pi^2} \omega^2 d\omega \quad (1-17)$$

و چگالی مد عبارت است از

$$G(\omega) = \frac{\mathcal{V}}{c^3\pi^2} \omega^2 \quad (1-18)$$

چگالی انرژی کل در داخل کاواک از (۱-۱۴) به صورت

$$\mathcal{E} = \frac{E}{\mathcal{V}} = \frac{1}{c^3\pi^2} \int_0^\infty \bar{\epsilon}(\omega) \omega^2 d\omega = \int_0^\infty \rho(\omega) d\omega \quad (1-19)$$

به دست می‌آید که از آن می‌توان چگالی طیفی را به صورت زیر مشخص کرد

$$\rho(\omega) = \frac{1}{c^3\pi^2} \bar{\epsilon}(\omega) \omega^2 \quad (1-20)$$

برای تابش حرارتی (جسم سیاه)، انرژی متوسط  $\bar{\epsilon}$  هرمد نیز توسط دمای کلوین تعیین می‌شود و (۲۰-۱)

$$\rho(\omega, T) = \frac{1}{c^3 \pi^2} \bar{\epsilon}(\omega, T) \omega^2 \quad (21-1)$$

نوشته شود. بستگی صریح به دما را در زیر محاسبه خواهیم کرد. برای پیدا کردن  $\bar{\epsilon}$  از تشابه بین یک مد و یک نوسانگر هماهنگ ساده\* با فرکانس طبیعی  $\omega$  استفاده می‌کنیم. فرض اینکه این نوسانگر از نظر ماهیت کاملاً کلاسیکی است اساس نظریه رالی - جینز را تشکیل می‌دهد.

### ۳ - نظریه (کلاسیکی) رالی - جینز

مجموعه‌ای از نوسانگرهایی را که همه آنها دارای یک فرکانس می‌باشند ولی انرژیهای آنها متفاوتند در نظر بگیریم. طبق قانون کلاسیکی بولتزمن، کسری از نوسانگرها که انرژیشان  $\epsilon$  است متناسب است با  $e^{-\epsilon/kT}$ ، که در آن  $k$  ثابت بولتزمن است ( $k = 1/38 \times 10^{-16} \text{ erg/deg}$ ). انرژی متوسط با استفاده از نمایش مکانیک آماری کلاسیکی به صورت زیر به دست می‌آید\*\*\*

$$\bar{\epsilon}(\omega, T) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon e^{-\epsilon/kT} dp dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\epsilon/kT} dp dx} \quad (22-1)$$

که در آن انرژی نوسانگر عبارت است از

$$\epsilon = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

انتگرالها می‌توانند مستقیماً محاسبه شده و به  $\bar{\epsilon}(\omega, T) = kT$  منجر شوند. این نتیجه جالب توجه است زیرا بنا بر آن مادامی که انرژی یک نوسانگر بتواند به طور پیوسته تغییر کند، انرژی متوسط مستقل از فرکانس نوسانگرهای مورد نظر است. با قرارداد  $\bar{\epsilon} = kT$  در (۲۱-۱) خواهیم داشت

$$\rho_{RJ}(\omega, T) = \frac{1}{c^3 \pi^2} kT \omega^2 \quad (23-1)$$

که همان چگالی طیفی رالی - جینز است.

\* ایده معادل بودن یک مد تابشی و یک نوسانگر، یک ایده دقیق است که در فصل ۱۲ ثابت خواهد شد.

\*\* به عنوان مثال، به کتاب زیر مراجعه کنید:

C, Kittel, "Elementary Statistical physics," Chapter 11, Wiley, New York, 1958.

این چگالی در صورتی با قانون وین (۳-۱) سازگار است که قرار دهیم

$$F_{RJ}\left(\frac{\omega}{T}\right) = \frac{k}{c^3\pi^2} \left(\frac{\omega}{T}\right)^{-1} \quad (1-24)$$

زیرا در این صورت (۱-۲۳) خواهد شد

$$\rho_{RJ} = \omega^3 F_{RJ}\left(\frac{\omega}{T}\right)$$

با اینکه نتیجه رالی - جینز با قانون وین سازگار است، اما به دلائل زیر نمی‌تواند به عنوان چگالی طیفی جسم سیاه مورد قبول قرار گیرد:

(الف) رسم ساده  $\rho_{RJ}(\omega, T)$  آشکار می‌کند که این چگالی بیشینه ندارد، بلکه وقتی  $\omega$  زیاد می‌شود به سمت بینهایت میل می‌کند. در نتیجه، قانون جابه‌جایی نقض می‌شود.

(ب) چگالی انرژی کل  $\mathcal{E} = \int_0^\infty \rho(\omega) d\omega$  بینهایت می‌شود، که در تناقض مستقیم با قانون استفان، یعنی،  $J = \sigma T^4$ ، است.

مشکل دوم به این علت پیش می‌آید که انتگرال در حد بالایی (فرکانسهای بالا) واگرا می‌شود. این واگرایی منشاء "فاجعه فرابنفش" مشهور است که، همان‌طور که خواهیم دید، به وسیله نظریه پلانک رفع خواهد شد.

#### ۴ - نظریه (کوانتومی) پلانک

تحلیل پلانک دقیقاً "دنباله نظریه رالی - جینز است، با این استثناء که او فرض کرد که انرژی یک نوسانگر با فرکانس  $\omega$  طبق قاعده

$$\varepsilon_n = n\hbar\omega \quad (1-25)$$

محدود یا "کوانتیده" است، که در آن  $\hbar = h/2\pi$  ( $h$  بار بخوانید)،  $h$  ثابت جهانی پلانک و  $n = 0, 1, 2, \dots$  است. انرژی متوسط حرارتی مشابه با (۱-۲۲) به وسیله قانون کوانتومی بولتزمن داده می‌شود

$$\bar{\varepsilon}(\omega, T) = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_n \exp(-\varepsilon_n/kT)}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\varepsilon_n/kT)} \quad (1-26)$$

با مشاهده اینکه (۱-۲۶) می‌تواند به صورت

$$\bar{\epsilon}(\omega, T) = - \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta \epsilon_n) \quad (1-27)$$

که در آن  $\beta = 1/kT$  است، نوشته شود، حاصل جمع‌های فوق به آسانی محاسبه می‌شوند. با استفاده از  $\epsilon_n = n\hbar\omega$ ، حاصل جمع فوق خواهد شد

$$\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta n\hbar\omega) = \sum_{n=0}^{\infty} [\exp(-\beta\hbar\omega)]^n \quad (1-28)$$

با قراردادن  $y = e^{-\beta\hbar\omega}$ ، جمع فوق به صورت جمع یک سری هندسی در خواهد آمد و خواهیم داشت

$$\sum_{n=0}^{\infty} y^n = \frac{1}{1-y}$$

بنابراین

$$\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta \epsilon_n) = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta n\hbar\omega) = \frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \quad (1-29)$$

با مشتق‌گیری از عبارت فوق، که (۱-۲۷) ایجاب می‌کند، و ساده کردن آن خواهیم داشت

$$\bar{\epsilon}(\omega, T) = \frac{\hbar\omega e^{-\hbar\omega/kT}}{1 - e^{-\hbar\omega/kT}} = \frac{\hbar\omega}{(e^{\hbar\omega/kT} - 1)} \quad (1-30)$$

توجه کنیم که شرط کوانتتش (۱-۲۵) منجر به یک انرژی متوسطی برای نوسانگر می‌شود که هم تابع  $T$  است و هم تابع  $\omega$ . با قراردادن (۱-۳۰) در (۱-۲۱) چگالی طیفی پلانک را به صورت زیر به دست خواهیم آورد

$$\rho_P(\omega, T) = \frac{\omega^2}{c^3 \pi^2} \frac{\hbar\omega}{(e^{\hbar\omega/kT} - 1)} = \omega^3 F_P\left(\frac{\omega}{T}\right) \quad (1-31)$$

که در آن

$$F_P\left(\frac{\omega}{T}\right) = \frac{\hbar}{c^3 \pi^2} [e^{(\hbar/k)(\omega/T)} - 1]^{-1} \quad (1-32)$$

فرمول پلانک با قانون وین سازگار است. ولی اکنون تابع پلانک،  $F_P(\omega/T)$ ، منجر به یک چگالی طیفی می‌شود که با مشاهدات تجربی نیز سازگار است (شکل ۱-۱). هم قانون جابه‌جایی و هم قانون استفان - بولتزمن هردو مستقیماً از فرمول پلانک به دست می‌آیند. برای مقایسه نظریه با تجربه، راحت‌تر است که چگالی طیفی را، به جای فرکانسها، بر حسب طول موجها بیان کنیم. بنا به تعریف، عبارت است از انرژی حمل شده به وسیله

طول موجهای بین  $\lambda$  و  $\lambda + d\lambda$  . بنابراین

$$-\rho(\lambda, T) d\lambda = \rho(\omega, T) d\omega \quad (۱-۳۳)$$

با استفاده از  $\lambda = \frac{2\pi c}{\omega}$  و  $d\lambda = -\frac{2\pi c}{\omega^2} d\omega$  نتیجه خواهیم گرفت

$$\rho(\lambda, T) = \frac{\omega^2}{2\pi c} \rho(\omega, T)$$

یا

$$\rho_P(\lambda, T) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \left[ \exp\left(\frac{hc}{\lambda kT}\right) - 1 \right]^{-1} \quad (۱-۳۴)$$

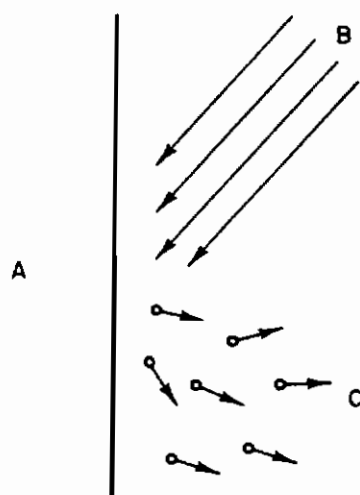
با قراردادن  $h = ۶/۶۳ \times ۱۰^{-۲۷} \text{ erg-sec}$  توافق بسیار خوبی با تجربه حاصل می شود .  
تمام آنچه که برای حل مشکلاتی که با نظریه کلاسیکی داشتیم لازم بود عبارت بود از محدود کردن یا کوانتیده کردن انرژیهای یک نوسانگر بر طبق  $\epsilon_n = nh\omega$  .  
بعداً "دلیل دیگری ارائه خواهد شد که نشان می دهد کوانتش باید در دیگر سیستمها نیز صورت گیرد .

## ۵ - اثر فوتوالکتریک

هر ماده از اتمهایی تشکیل شده است که ، به نوبه خود ، شامل الکترونها ، پروتونها ، و نوترونها هستند . در یک فلز بعضی از الکترونها در داخل فلز آزادانه حرکت کرده و از اتمی به اتم دیگر می روند . کمترین انرژی لازم برای اینکه یک الکترون را از فلز جدا کند تابع گار فلز نامیده می شود . انرژی لازم برای خارج کردن الکترون می تواند از طریق حرارتی (گسیل گرما یونی) ، برخورد ذرات پر انرژی (گسیل ثانوی) ، یا تابش الکترومغناطیسی (گسیل فوتونی) تأمین شود . در اینجا فرایند اخیر ، اثر فوتوالکتریک (شکل ۱-۳) ، را قدری دقیق تر بررسی می کنیم زیرا گسترشهای اولیه مکانیک کوانتومی را روشن تر می سازد .

در نظریه کلاسیکی ، انرژی یک موج الکترومغناطیسی با مربع دامنه آن متناسب است . در نتیجه ، هر فرکانسی که دامنه آن کافی باشد باید بتواند انرژی لازم برای خروج الکترونها

را تأمین کند. با این وجود، از نظر تجربی، افزایش دامنه، یا در مورد نور، درخشندگی، باعث شروع گسیل فوتونی الکترون نمی‌شود. برخلاف تفکر کلاسیکی، گسیل فوتونی الکترون با افزایش فرکانس تا بالاتر از یک مقدار آستانه ایجاد می‌شود. به‌طور تجربی معلوم شده است که این فرکانس آستانه  $\nu_0$  "مستقیماً" با تابع کار  $W$  متناسب است.



شکل (۱-۳). اثر فوتو الکتریک. A، فلز؛ B، نور؛ C، الکترون‌ها.

توضیح اثر فوتو الکتریک نخستین بار توسط اینشتین (۱۹۰۵) ارائه شد. او در نظریه کوانتومی خود از نور، حدس زد که نور دارای ویژگی‌های ذره مانند بوده و از کوانتاهای نوری یا فوتون با خواص زیر تشکیل شده است.

$$\begin{aligned} \text{انرژی} &= h\nu & \text{سرعت} &= c \\ \text{تکانه} &= \frac{h}{\lambda} & \text{جرم} &= 0 \end{aligned} \quad \nu = \frac{\omega}{2\pi}$$

طبق نظر اینشتین، یک الکترون با جذب یک تک فوتون انرژی کسب می‌کند، بنابراین انرژی کمینه لازم فوتون برای آزاد کردن یک الکترون عبارت است از

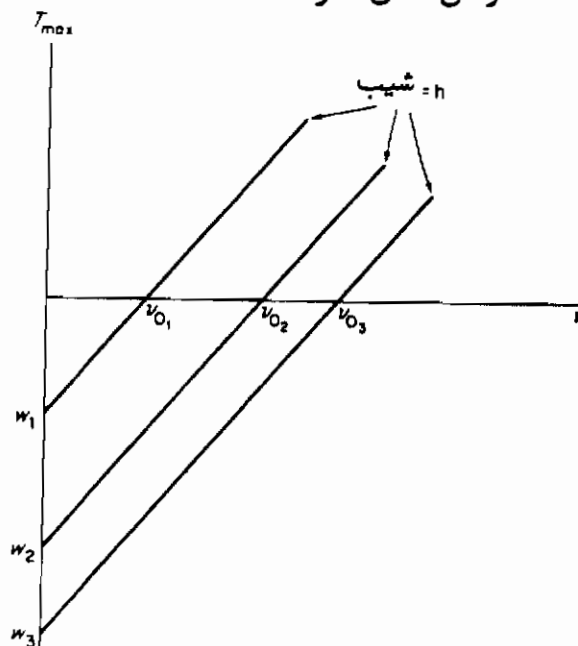
$$\varepsilon_{\min} = h\nu_0 = W \quad (۱-۳۵)$$

اگر انرژی فوتون ورودی بزرگتر از  $h\nu_0$  باشد، انرژی اضافی به‌جای دیگر می‌رود، یا احتمالاً به انرژی جنبشی الکترون پرتاب شده تبدیل می‌شود. افزایش شدت باریکه نور تأیید شده صرفاً تعداد فوتون‌های ورودی را افزایش می‌دهد، و در نتیجه، باعث افزایش تعداد

فوتو - الکترونها می شود . انرژی جنبشی بیشینه هر الکترون عبارت است از

$$T_{\max} = h\nu - W = h(\nu - \nu_0) \quad (۱-۳۶)$$

این معادله ، معادله فوتوالکتریک اینشتین نامیده می شود . اگر منحنی انرژی جنبشی مشاهده شده بیشینه نسبت به فرکانس فرودی را برای تعدادی از فلزات رسم کنیم ، در واقع ، یک رابطه خطی به دست خواهیم آورد ( شکل ۱-۴ ) . تمام منحنیها دارای یک شیب مشترک  $h$  هستند ، ولی نقاط تقاطع آنها با محورها با یکدیگر تفاوت دارند که مربوط است به تابع کار خاص فلز . مقدار تجربی به دست آمده برای  $h$  با مقداری که از داده های تابش جسم سیاه برای آن به دست آمده است توافق کامل دارد .



شکل (۱-۴) . منحنی معادله فوتو الکتریک برای سه فلز ، که توابع کار و فرکانسهای آستانه آنها را نشان می دهد .

توجیه کامل نظریه اینشتین مستلزم بررسی دقیق فرایند گسیل فوتونی الکترون از طریق دینامیک کوانتومی است . فرمول نسبتاً پیچیده ای برای توضیح جنبه های ظریف این پدیده به دست آمده است\* .

\* برای بحث در فرمول اثر فوتوالکتریک به کتاب

"the Quantum Theory of Radiation." 3rd ed., pp. 204-211.

Oxford Univ. Press, London and New York, 1954.

تألیف W. Heitler مراجعه کنید .

## ۶- اثر کامپتون

نظریه کوانتومی اینشتین در مورد نور می‌تواند به پراکندگی فوتونهای اشعه X از الکترونهای آزاد نیز اعمال شود. در عمل، الکترونها مقید به فلز هستند، اما چون انرژیهای وابسته به اشعه X خیلی بزرگتر از تابع کار  $W$  است، الکترونها می‌توانند آزاد در نظر گرفته شوند. این اثر وقتی به طریق کلاسیکی بررسی شود، پراکندگی تامسون<sup>۶</sup> نامیده می‌شود. از نظر کلاسیکی، تابشهای فرودی و پراکنده شده دارای یک فرکانس هستند و شدت پراکنده شده بر طبق رابطه

$$I \propto I_0(1 + \cos^2 \theta) \quad (۱-۳۷)$$

با زاویه پراکندگی تغییر می‌کند، که در آن  $I_0$  شدت تابش فرودی است. وقتی اشعه X از الکترونهای یک ورقه فلزی پراکنده می‌شوند، هیچکدام از پیشگوئیه‌ها صادق نیست. فرکانس اشعه X پراکنده شده کاهش می‌یابد و شدت آنها با فرمولی خیلی پیچیده‌تر از (۱-۳۷) داده می‌شود.

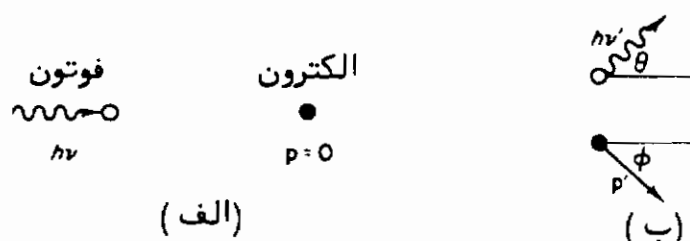
کاهش فرکانس اشعه X پراکنده شده، نخستین بار توسط کامپتون (۱۹۲۳)، با استفاده از نظریه کوانتومی اینشتین در مورد نور، توضیح داده شد. کامپتون این پراکندگی را به عنوان برخورد یک فوتون با یک الکترون آزاد که ابتدا در حال سکون بوده است، در نظر گرفت (شکل ۱-۵).

قوانین بقاء انرژی و تکانه ایجاب می‌کنند که

$$h\nu - h\nu' = T \quad (\text{انرژی})$$

$$\frac{h}{\lambda} = \frac{h}{\lambda'} \cos \theta + p \cos \phi \quad (\text{تکانه در امتداد محور } x \text{ ها}) \quad (۱-۳۸)$$

$$\frac{h}{\lambda'} \sin \theta = p \sin \phi \quad (\text{تکانه در امتداد محور } y \text{ ها})$$



شکل (۱-۵). سینماتیک اثر کامپتون (الف) قبل و (ب) بعد از برخورد یک فوتون و یک الکترون.



در اینجا  $T$  و  $p$ ، به ترتیب، انرژی جنبشی و تکانه خطی الکترون پراکنده شده‌اند. با استفاده از فرمول موجی

$$c = v\lambda = v'\lambda'$$

و رابطه نسبیتی بین تکانه و انرژی جنبشی

$$T^2 + 2Tmc^2 = p^2c^2$$

می‌توان  $p$ ،  $T$ ،  $v$ ،  $v'$  و  $\phi$  را در (۱-۳۸) حذف کرد و فرمول کامپتون را به صورت زیر به دست آورد

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{mc} (1 - \cos \theta) \quad (1-39)$$

این فرمول طول موج پراکنده شده  $\lambda'$  را به زاویه پراکندگی فوتون،  $\theta$ ، ربط می‌دهد. کمیت

$$\lambda_c = h/mc \simeq 0.024 \times 10^{-8} \text{ cm} \quad (1-40)$$

طول موج کامپتون نامیده می‌شود. بیشینه جابه‌جایی برای پراکندگی به عقب ( $\theta = 180^\circ$ ) رخ می‌دهد که برای آن  $\Delta\lambda = 2\lambda_c$ .

شدت اشعه X پراکنده شده، با فرمول کلاین - نیشینا<sup>۷</sup> (به جای فرمول تامسون) مطابقت می‌کند. این فرمول بر پایه الکترودینامیک کوانتومی نسبیتی بنا شده و خیلی پیچیده‌تر از آن است که در اینجا مورد بحث قرار گیرد\*.

## ۷- نظریه کوانتومی ماده

گرچه کوانتش در ابتدا در ارتباط با تابش وارد شده بود، به زودی آشکار شد که ماده نیز باید کوانتیده باشد. حتی ویژگیهای ساده‌ترین اتم، هیدروژن، نمی‌تواند برحسب تنها مکانیک کلاسیکی توضیح داده شود. از نظر کلاسیکی، الکترون هیدروژنی باید روی یک مدار بیضی شکل در اطراف پروتون، شبیه به حرکت سیاره‌ای، که در آن جاذبه الکتروستاتیکی نیروی مرکز‌گرار را تامین می‌کند، حرکت کند.

\* برای بحث فرمول کلاین - نیشینا به کتاب

"the Quantum Theory of Radiation" "3rd." P.215. Oxford Univ. Press London and New York, 1954.

تألیف W. Heitler مراجعه کنید.

به‌طور کلاسیکی کاملاً" معلوم شده است که وقتی ذرات باردار دارای شتاب هستند انرژی تابشی از خود گسیل می‌دارند. الکترو دینامیک کلاسیکی ثابت می‌کند که آهنگ گسیل عبارت است از

$$\frac{\text{انرژی}}{\text{زمان}} = \frac{2e^2 a^2}{3c^3} \quad (۴۱-۱)$$

که در آن،  $e$  بار الکتریکی،  $a$  شتاب و  $c$  سرعت نور است. چون الکترون هیدروژنی همیشه شتابی به‌طرف پروتون دارد، باید از طریق فرایند تابش انرژی از دست بدهد و به‌صورت مارپیچ به‌طرف پروتون هدایت شود. با این وجود، این فروپاشی اتمی در طبیعت رخ نمی‌دهد، الکترون هیدروژن (به‌طور متوسط) هرگز نزدیک‌تر از  $d \sim \frac{1}{2} \times 10^{-8} \text{ cm}$  به هسته مشاهده نشده است.

یکی دیگر از نتایج نظریه کلاسیکی این است که در حالی که الکترون به‌طرف داخل حرکت مارپیچی دارد، فرکانس دوران آن باید به‌طور ملایم تغییر کرده و طیف تابشی باید پیوسته باشد، یعنی، تمام رنگها باید به‌طور پیوسته گسیل شوند، تجربه آشکارا نشان می‌دهد که طیف هیدروژن گسسته است، یعنی، شامل چند رنگ مشخص می‌باشد.

ریدبرگ<sup>۸</sup> مشاهده کرد که طول موج خطوط طیفی در طیف تابشی هیدروژن با فرمول تجربی زیر وفق می‌دهد

$$\frac{1}{\lambda_{m,n}} = R \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad (n, m = 1, 2, \dots; m > n) \quad (۴۲-۱)$$

که در آن  $R = 109677/576 \text{ cm}^{-1}$  ثابت ریدبرگ است. توضیح مشاهدات ریدبرگ در زیر خواهد آمد.

## ۸ - فرضیه دوبروی و آزمایش داویسن - جرمز

وقتی نوری با طول موج معین از یک سری روزنه‌های نزدیک به هم عبور کند، با خودش تداخل می‌کند و یک طرح پراش که، در روی یک پرده، به‌صورت تغییراتی در شدت نوری قابل رؤیت است، ایجاد می‌کند. این پدیده محدود به نور نیست و در تمام سیستمهایی که دارای خواص موجی هستند (مثلاً، صوت، امواج آب، و غیره) رخ می‌دهد. وقتی طول موج به سمت صفر میل می‌کند ویژگیهای موج مانندی (نور موجی) محو می‌شود و امواج مثل پرتوها رفتار می‌کنند

(نور هندسی). وقتی  $\lambda \rightarrow 0$ ، نور، به جای ایجاد طرحهای تداخلی، سایه‌هایی هندسی از روزنه‌ها ایجاد می‌کند. به بیان دیگر، در این حد هندسی نور به خط مستقیم حرکت می‌کند. لویی دوبروی، در رساله دکترای خود (۱۹۲۴) پیشنهاد کرد که ماده نیز دارای ویژگیهای موج‌مانندی است. او حدس زد که به هر ذره آزاد می‌توان طول موج

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (۱-۴۳)$$

را نسبت داد که در آن  $p$  تکانه خطی ذره و  $h$  ثابت پلانک است. چون  $h$  فوق‌العاده کوچک است، "طول موج دوبروی" ذرات ماکروسکوپیکی ( $p = mv \sim 1$ ) به قدری کوچک است که اثرات موجی آنها قابل تشخیص نیستند. برای ذرات میکروسکوپیکی طول موجها می‌توانند آن قدر بزرگ باشند که اثرات تداخلی قابل مشاهده شوند.

دایسن و جرمر یک باریکه الکترون هم انرژی را از یک بلور عبور دادند و آنها را روی یک فیلم عکاسی ظاهر کردند. آنها دریافتند که طرح شدت به طور شگفت‌آوری شبیه به طرحی است که در پراش نوری مشاهده شده است، و حدس زدند که باریکه الکترون به وسیله آرایش منظم اتمی شبکه بلوری پراشیده شده است. تجزیه و تحلیل‌های تجربی تایید کردند که فرضیه دوبروی (۱-۴۳) واقعا درست است. در واقع، این رفتار موج‌مانندی الکترون‌ها اساس کار میکروسکپ الکترونی را تشکیل می‌دهد. وجود طول موجهای بینهایت کوچک سبب می‌شود که قدرت تفکیک این میکروسکپها بزرگتر از قدرت تفکیک میکروسکپهای نوری متداول باشد.

کانونی کردن توسط میدانهای الکتریکی و مغناطیسی، به جای عدسی‌های معمولی، انجام می‌گیرد. طبیعت کوانتومی رابطه دوبروی از حضور ثابت پلانک آشکار است. اگر  $h$  صفر می‌بود، خواص موج‌مانندی در ماده وجود نمی‌داشت. مسلماً می‌توان  $h \rightarrow 0$  را به عنوان "حد کلاسیکی" در نظر گرفت. جالب توجه است که نظریه کوانتومی، همان طور که به نور خواص ذره‌مانندی نسبت می‌دهد، به ماده نیز خواص موج‌مانندی نسبت می‌دهد. دوگانگی موج-ذره بخش عمده نظریه کوانتومی تمام انواع انرژی، خواه مادی خواه تابشی، را تشکیل می‌دهد.

## ۹ - نظریه بوهر برای هیدرژن

خیلی پیش از فرضیه دوبروی، بوهر (۱۹۱۳) توصیفی از طبیعت کوانتومی هیدرژن ارائه داده بود. او اصل موضوع‌های زیر را در نظر گرفت:

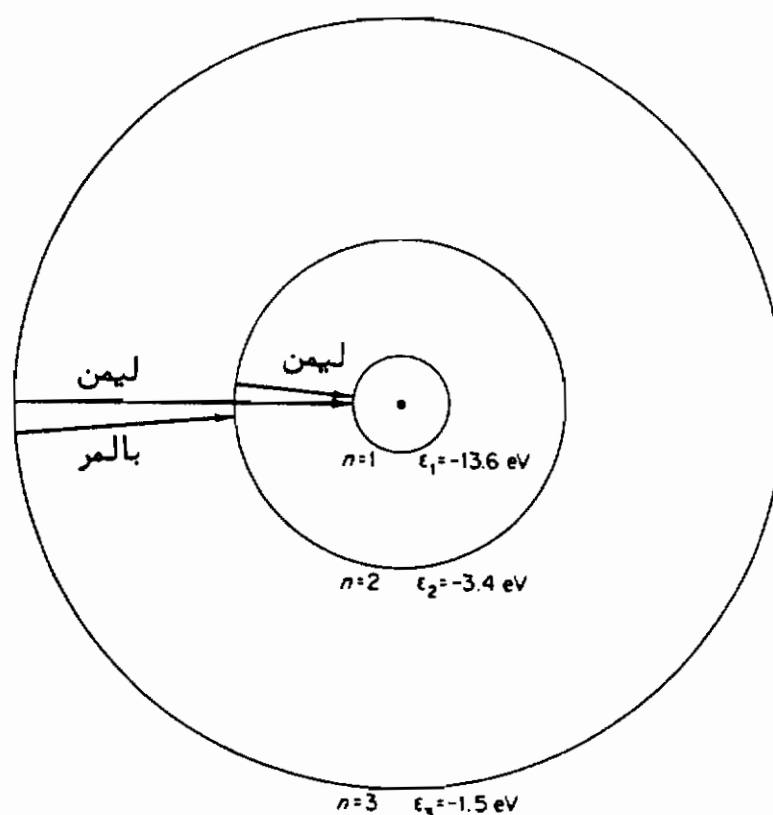
(۱) الکترون‌ها روی مدارهای دایره‌ای حرکت می‌کنند.

(۲) مدارهای مجاز آنهایی هستند که برای آنها تکانه زاویه‌ای طبق قاعده زیر کوانتیده باشد

$$L_n = mv_n r_n = n\hbar \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (۴۳ - ۱)$$

(۳) الکترون در روی هرکدام از این مدارها انرژی تابش نمی‌کند. بلکه، تابش فقط وقتی گسیل (یا جذب) می‌شود که الکترون از مدارهای با انرژی بالاتر (یا پایین‌تر) به مدارهای با انرژی پایین‌تر (یا بالاتر) "بپرد" (شکل ۱-۶). کوانتای انرژی گسیل شده برابر است با اتلاف انرژی مداری.

اصل موضوع دوم می‌تواند براساس فرضیه دوپروی فهمیده شود. اگر فرض کنیم که در هر مدار موج دوپروی وابسته به الکترون باید با خودش "هم‌فاز" باشد، باید بخواهیم که محیط مدار مضرب صحیحی از طول موج باشد، یعنی،  $2\pi r = n\lambda$



شکل (۱-۶). مدارهای کوانتیده در هیدروژن، طبق نظریه بوهر، چند گذار اول نشان داده شده‌اند.

اما چون  $\lambda = h/p = h/mv$  داریم

$$mvr = n\hbar \quad (۴۵ - ۱)$$

که همان اصل موضوع بوهر است .  
انرژیهای (جنبشی به اضافه پتانسیل) مجاز

$$\varepsilon_n = \frac{1}{2} m v_n^2 - \frac{e^2}{r_n} \quad (۴۶-۱)$$

می‌توانند با استفاده از قانون نیوتن برای حرکت دورانی

$$F = ma, \quad \frac{e^2}{r_n^2} = m \frac{v_n^2}{r_n} \quad (۴۷-۱)$$

به دست آیند . با حل (۴۵-۱) ، (۴۶-۱) و (۴۷-۱) برای  $r_n$  و  $\varepsilon_n$  خواهیم داشت

$$\varepsilon_n = \frac{\varepsilon_1}{n^2} \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (۴۸-۱ \text{ الف})$$

$$r_n = a n^2 \quad (۴۸-۱ \text{ ب})$$

که در آن انرژی حالت پایه عبارت است از

$$\varepsilon_1 = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \simeq -13.6 \text{ eV} \quad (۴۹-۱ \text{ الف})$$

و اولین شعاع بوهر برابر است با

$$a = \frac{\hbar^2}{me^2} \simeq 0.53 \times 10^{-8} \text{ cm} \quad (۴۹-۱ \text{ ب})$$

بالاخره ، با استفاده از رابطه اینشتین برای فوتون ،  $\varepsilon = h\nu$  ، نتیجه می‌گیریم که فرکانسهای مشخصه طیف هیدروژن باید به صورت زیر باشند

$$h\nu_{mn} = \varepsilon_m - \varepsilon_n = |\varepsilon_1| \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad (n < m) \quad (۵۰-۱)$$

طول موجها عبارتند از

$$\frac{1}{\lambda_{mn}} = \frac{\nu_{mn}}{c}$$

و در نتیجه

$$\frac{1}{\lambda_{mn}} = \frac{|\varepsilon_1|}{hc} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad (n < m) \quad (51-1)$$

این رابطه با فرمول ریذبرگ، که در آن ثابت ریذبرگ به وسیله  $R = |\varepsilon_1|/hc$  داده شده است، مطابقت می‌کند. خطوط گسیلی هیدروژنی در جدول (۱-۱) طبقه‌بندی شده‌اند.

جدول ۱-۱ طبقه‌بندی خطوط گسیلی هیدروژنی

سری	گذار	گستره	فرکانس (چرخه بر ثانیه)
لیمن <sup>۹</sup>	$m > 1 \rightarrow n = 1$	فرا بنفش	$\sim 3 \times 10^{15}$
بالمر <sup>۱۰</sup>	$m > 2 \rightarrow n = 2$	مرئی	$\sim 6 \times 10^{14}$
پاشن <sup>۱۱</sup>	$m > 3 \rightarrow n = 3$	مادون قرمز	$\sim 2 \times 10^{14}$
براکت <sup>۱۲</sup>	$m > 4 \rightarrow n = 4$	مادون قرمز	$\sim 7 \times 10^{13}$
فوند <sup>۱۳</sup>	$m > 5 \rightarrow n = 5$	مادون قرمز	$\sim 5 \times 10^{13}$

## ۱۰- اصل تناظر

اصول موضوع بوهر در مورد تابش حاصل از اتم هیدروژن، آشکارا با الکترو دینامیک کلاسیکی ناسازگار بودند. با این حال قوانین کلاسیکی برای پدیده‌های الکترومغناطیسی ماکروسکوپیکی مناسب به نظر می‌رسیدند. بنابراین، باید فرض کنیم که حدی وجود دارد که در آن الکترو دینامیک کوانتومی با الکترو دینامیک کلاسیکی متناظر است. برای اینکه بهینیم چگونه به این حد می‌رسیم توجه کنیم که ذره بار داری که دارای یک حرکت دورانی یکنواخت است باید، طبق الکترو دینامیک کلاسیکی، تابشی با فرکانسی برابر با فرکانس دوران خود، یعنی،

$$\nu_{rot} = \frac{v}{2\pi r} = \frac{1}{2\pi} \left( \frac{e^2}{mr^3} \right)^{1/2} \quad (52-1)$$

9- Lyman

10- Balmer

11- Pashen

12- Brackett

13- Pfund

یا، با استفاده از (۱-۴۸ ب) برای مدار  $n$  ام،

$$v_{\text{rot}n} = \frac{1}{2\pi} \frac{me^4}{\hbar^3} \frac{1}{n^3} \quad (1-53)$$

گسیل بدارد، اما نظریه کوانتومی پیشگوئی می‌کند که فرکانس تابشی بین دو مدار مجاور  $n$  و  $n+1$  عبارت است از

$$v_n = \frac{\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n}{2\pi\hbar} = \frac{|\varepsilon_1|}{2\pi\hbar} \left[ \frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2} \right] \quad (1-54)$$

به‌طور واضح (۱-۵۳) و (۱-۵۴) با هم ناسازگارند. اما اگر (۱-۵۴) را در حد  $n \rightarrow \infty$  مطالعه کنیم، خواهیم داشت

$$\left[ \frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2} \right] = \frac{2n+1}{n^2(n+1)^2} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \frac{2}{n^3}$$

بنابراین

$$v_n = \frac{|\varepsilon_1|}{2\pi\hbar} \frac{2}{n^3} = \frac{1}{2\pi} \frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{\hbar} \frac{2}{n^3} = v_{\text{rot}n}$$

در حد  $n \rightarrow \infty$ ، فرکانسهای گسیلی پیشگوئی شده توسط قوانین کلاسیکی و کوانتومی مطابقت دارند، و می‌توانیم حد  $n \rightarrow \infty$  را به‌عنوان حد کلاسیکی در نظر بگیریم. بنابراین از نظر کلاسیکی وقتی یک ذره باردار تابش گسیل می‌کند، عملاً بین دو تراز کوانتومی مجاور با اعداد کوانتومی خیلی بزرگ گذارهایی انجام می‌دهد. اما در این نواحی فاصله نسبی ترازهای انرژی،  $\Delta\varepsilon/\varepsilon$ ، به قدری کوچک است که کوانتش غیرقابل توجه می‌شود.

## ۱۱ - خلاصه

مطالب بحث شده در بالا مبنای نظریه کوانتومی قدیمی را تشکیل می‌دادند. در حالی که این نظریه بعضی از مسائل وابسته به نظریه کلاسیکی ماده و تابش را حل می‌کرد، از بسیاری جهات کمبود داشت. تعدادی از این نقایص عبارت بودند از:

(۱) در شکل ارائه شده، فقط می‌توانست به تعداد محدودی از سیستمها اعمال شود.

- (۲) دلایلی که برای کوانتتش ارائه می‌داد قانع‌کننده نبودند .
- (۳) طوری نبود که به‌عنوان تعمیم مکانیک کلاسیکی در نظر گرفته شود و اصل تناظر همیشه روشن نبود .
- نظریه قدیمی نیاز به این داشت که اصلاح شود، تعمیم داده شود، و مبنای نظری محکمی به‌وسیله " شرودینگر، هایزنبرگ، بورن، و دیراک (۱۹۲۵ - ۱۹۲۹) برای آن طرح‌ریزی شود . در حالی که بعضی از نتایج نظریه‌های قدیم و جدید مطابقت می‌کردند، بسیاری از آنها مطابقت نمی‌کردند . به‌عنوان مثال، انرژی‌های کوانتیده هیدروژن که به‌وسیله نظریه کوانتومی جدید پیشگوئی شده‌اند با نتایج بوهر (۱-۴۸ الف) مطابقت می‌کنند . اما مفهوم مدارهای کاملاً معین که در نظریه بوهر وجود داشت، به‌طور آشکار یکی از اصول موضوع بنیادی نظریه جدیدتر، اصل عدم قطعیت هایزنبرگ، را نقض می‌کرد .
- در فصل بعد، خلاصه‌ای از مکانیک کلاسیکی را ارائه می‌دهیم، و نشان خواهیم داد که چگونه می‌تواند در توسعه نظریه مکانیک کوانتومی مورد استفاده قرار گیرد .

### مسائل

- ۱-۱ کدامیک از توابع زیر برای چگالی طیفی جسم سیاه با قانون وین سازگار است ؟

$$(a) \quad \rho(\omega, T) = A\omega^3 [\ln \omega - \ln T] / \sin^2 \frac{T}{\omega}$$

$$(b) \quad \rho(\omega, T) = \omega^3 T \cos \frac{\omega}{T}$$

$$(c) \quad \rho(\omega, T) = \omega^2 [\omega^{1/\omega} e^{1/T}]^\omega$$

$$(d) \quad \rho(\omega, T) = \frac{\omega^4}{T} + \omega^3$$

$F(x)$  را برای حالت‌های قابل قبول بیان کنید .

- ۲-۱ برای یک گاز فوتونی همسانگرد با چگالی انرژی  $\mathcal{E}$ ، نشان دهید که انرژی عبور کرده از واحد سطح در واحد زمان، در هرجهت، با رابطه زیر داده می‌شود

$$\bar{J} = \frac{1}{4} c \mathcal{E}$$

(راهنمایی: شار متوسط در امتداد  $z$  را با انتگرال‌گیری از  $J_z = J \cos \theta$  روی یک نیمکره پیدا کنید . توجه کنید که در یک جهت مشخص فقط نصف چگالی انرژی جریان دارد)



۳-۱ نشان دهید که چگالی طیفی رالی - جینز هم قانون استفان را نقض می‌کند و هم قانون جابه‌جایی را، توضیح دهید که چرا چگالی طیفی پلانک از "فاجعه فرا بنفش" جلوگیری می‌کند.

۴-۱ در معادله (۲۲-۱) انتگرالها را محاسبه کنید و در نتیجه نشان دهید که  $\bar{\epsilon} = kT$ .

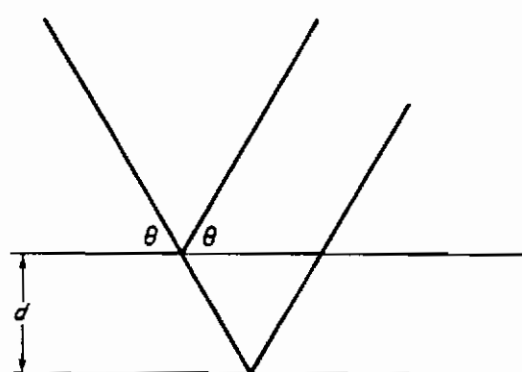
۵-۱ با استفاده از چگالی طیفی پلانک انتگرالی برای ثابت استفان - بولتزمن پیدا کنید.

۶-۱ فرمول کامپتون، معادله (۳۹-۱)، را آن‌طور که در بخش ۶ پیشنهاد شده است، اثبات کنید.

۷-۱ طول موج دوبروی وابسته به الکترون در حالت پایه هیدروژن را پیدا کنید. آنرا با طول موج دوبروی زمین در حرکت مداری آن به دور خورشید مقایسه کنید.

۸-۱ (الف) طول موج دوبروی یک نوترون حرارتی (در دمای معمولی) را، با فرض  $\epsilon \simeq kT$  تعیین کنید.

(ب) فرض کنید که یک باریکه نوترون حرارتی روی یک مجموعه از سطوح اتمی در یک شبکه بلوری بتابد. بر طبق نظریه براگ<sup>۱۴</sup>، تقویت بازتابی وقتی اتفاق می‌افتد که داشته باشیم  $2d \sin \theta = n\lambda$  که در آن  $d$  فاصله بین سطوح،  $\theta$  زاویه بین باریکه نوترون و سطوح،  $n$  یک عدد صحیح معرف مرتبه بازتاب، و  $\lambda$  طول موج باریکه فرودی است. در مرتبه اول،  $n = 1$ ، بازتاب مشاهده شده در  $\theta = 30^\circ$  رخ می‌دهد. فاصله بین سطوح اتمی را پیدا کنید.



شکل (۱ - ۷)

۹-۱ تحقیق کنید که سریهای لیمن و بالمر به ترتیب در قسمتهای فرا بنفش و مرئی طیف الکترو مغناطیسی قرار دارند.

- ۱۰-۱ طبق اصل تناظر، وقتی یک نوسانگر کلاسیکی باردار نوری با فرکانسی برابر با فرکانس طبیعی خود،  $\nu$ ، گسیل می‌دارد، عملاً "چه کاری می‌کند؟"
- ۱۱-۱ مقادیر نظری و تجربی ثابت ریدبرگ را با هم مقایسه کنید.
- ۱۲-۱ با استفاده از معادله (۱-۴۱) زمانی را که طول می‌کشد تا الکترون هیدروژن، طبق نظریه کلاسیکی، از اولین شعاع بوهر بر روی پروتون سقوط کند، تعیین کنید.

### مراجع پیشنهادی

- Born, M., "Atomic Physics." Hafner, New York, 1957.  
 Eisberg, R. M., "Fundamentals of Modern Physics." Wiley, New York, 1961.  
 McGervey, J. D., "Introduction to Modern Physics." Academic Press, New York, 1971.  
 Richtmyer, F. K., Kennard, E. H., and Lauritsen, T., "Introduction to Modern Physics." McGraw-Hill, New York, 1955.

# ۲

## مکانیک کلاسیکی

موضوع مکانیک کوانتومی می‌تواند به طرق مختلفی گسترش داده شود. یک روش، که از نظر تاریخی مهم است، براساس فرضیه دوپروی مبنی بر دوگانگی موجی - ذره‌ای ماده بنا شده است. در این روش یک معادله موج برای امواج دوپروی شبیه به معادله امواج الکترو-مغناطیسی به دست می‌آید. با به کار بردن تشابهات فیزیکی، ویژگیهای یک ذره می‌توانند به خواص موجی آن مرتبط شوند؛ لذا پراش، تداخل و اثرات تشدید جزئی اصلی مکانیک کوانتومی ماده را تشکیل می‌دهند. ارتباط بین مکانیک کلاسیکی و مکانیک کوانتومی در این طریق فوراً آشکار نمی‌شود.

یک روش دیگر، به نظریه کوانتومی به عنوان تعمیم مستقیم دینامیک کلاسیکی نگاه می‌کند، و دوگانگی موجی - ذره‌ای را پیامد طبیعی این نظریه می‌داند. امتیازات این روش در این است که تطابق با نظریه کلاسیکی را برقرار می‌کند و اجازه می‌دهد هم میدانها و هم ذرات با روش واحدی توصیف شوند. اما، ارتباط بین نظریه‌های کوانتومی و کلاسیکی نباید در دینامیک نیوتنی، بلکه باید در فرمولبندی هامیلتونی مکانیک کلاسیکی جستجو شود. صورتبندی مکانیک کلاسیکی، یعنی، عبور از دینامیک نیوتنی به دینامیک لاگرانژی و بالاخره به دینامیک هامیلتونی، در ذیل مورد بحث قرار می‌گیرد.

### ۱ - شکل نیوتنی مکانیک (غیرنسبیتی)

در این مرحله به توصیف دینامیک یک ذره نقطه‌ای تحت تأثیر نیروهای خارجی

می‌پردازیم. ذره غیرنسبیتی فرض شده است، یعنی، سرعت آن خیلی کوچکتر از سرعت نور است. هم‌چنین فرض شده است که نیروی خالص وارد به ذره غیر چرخشی است  $(\nabla \times \mathbf{F} = 0)$  و در نتیجه، مشتق از یک تابع انرژی پتانسیل  $V(\mathbf{r}, t)$  است\*

$$\mathbf{F} = -\nabla V \quad (1-2)$$

نیروهای وابسته به سرعت، مثل نیروهای وارد به ذرات باردار در میدانهای مغناطیسی، به‌زودی مورد بحث قرار خواهند گرفت. اصطکاک، که غیرچرخشی نیست، در پدیده‌های میکروسکوپیکی وارد نمی‌شود و از بحث فعلی ما حذف خواهد شد.

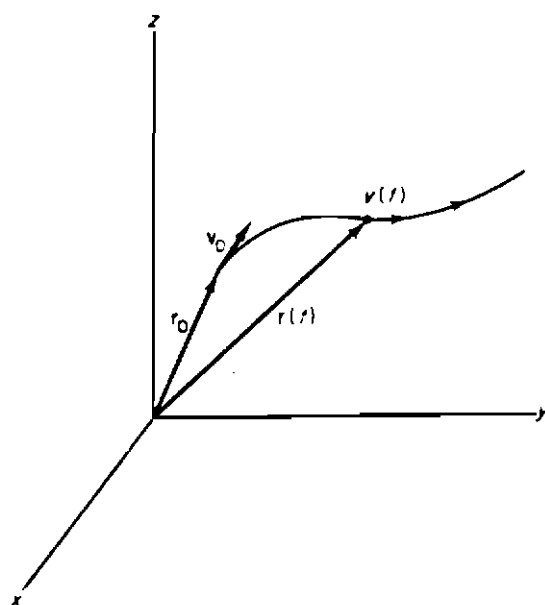
موضوع مکانیک نظری عبارت است از توصیف حرکت عمومی ذره وقتی که:

(۱) مکان و سرعت اولیه معلوم هستند،

(۲) نیروی کل وارد به ذره،  $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)$ ، مشخص باشد.

جواب از نظر ریاضی در بردار مکانی  $\mathbf{r}(t)$  که در تمام لحظات ذره را در طول مسیرش جایگزیده می‌کند نهفته است (شکل ۱-۲). سرعت و شتاب لحظه‌ای ذره می‌توانند با مشتق‌گیری به‌دست آیند،

$$\mathbf{v}(t) = \frac{d\mathbf{r}}{dt} \quad \text{و} \quad \mathbf{a}(t) = \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} \quad (2-2)$$



شکل ۱-۲. مسیر و بردارهای مکان و سرعت یک ذره

---

\* از نمادگذاری  $V(\mathbf{r}, t) = V(x, y, z, t)$  استفاده خواهیم کرد.

نیروی کل وارد به ذره به وسیله قانون دوم نیوتن ،

$$-\nabla V = \mathbf{F} = m\mathbf{a} = m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} \quad (۲-۳)$$

یا به طور عمومی تر به وسیله

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} \quad (۲-۴)$$

که در آن  $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$  تکانه خطی ذره است ، بهشتاب آن مربوط می شود . معادله (۲-۳) یک معادله دیفرانسیل برداری است و می تواند ، وقتی شرایط اولیه

$$\mathbf{r}_0 = \mathbf{r}(0) \quad \text{و} \quad \mathbf{v}_0 = \mathbf{v}(0)$$

معلوم باشند ، حل شود و

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(t) \quad (۲-۵)$$

را به دست دهد .

در مختصات دکارتی ، از مولفه های (۲-۳) خواهیم داشت

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 x}{dt^2} &= F_x = -\frac{\partial V}{\partial x}(\mathbf{r}, t) \\ m \frac{d^2 y}{dt^2} &= F_y = -\frac{\partial V}{\partial y}(\mathbf{r}, t) \\ m \frac{d^2 z}{dt^2} &= F_z = -\frac{\partial V}{\partial z}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (۲-۶)$$

با حل این دستگاه معادلات دیفرانسیل جواب سینماتیکی زیر را به دست خواهیم آورد

$$\mathbf{r}(t) = x(t)\mathbf{i} + y(t)\mathbf{j} + z(t)\mathbf{k} \quad (۲-۷)$$

که در آن  $\mathbf{i}$  ،  $\mathbf{j}$  ،  $\mathbf{k}$  بردارهای یک‌ای هستند که به ترتیب در امتداد  $x$  ،  $y$  و  $z$  قرار دارند . اگر جواب سینماتیکی معلوم باشد ، می توان زمان  $t$  را بین  $x(t)$  ،  $y(t)$  و  $z(t)$  حذف کرد و مسیر

$$y = y(x) \quad \text{و} \quad z = z(x) \quad (۸-۲)$$

را که ذره در طول آن حرکت می‌کند به دست آورد. ساختن چند تابع دینامیکی از متغیرهای  $v$  و  $r$  در طول حرکت ذره و مطالعه آنها آموزنده خواهد بود. به عنوان مثال، مولفه‌های تکانه زاویه‌ای

$$L = m\mathbf{r} \times \mathbf{v} \quad (۹-۲)$$

توابعی هستند که در مسائل مربوط به حرکت سیاره‌ای مفیداند. انرژی کل

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + V(\mathbf{r}, t) \quad (۱۰-۲)$$

نیز در بسیاری از مسائل اهمیت زیادی دارد. هر تابع دینامیکی که با گذشت زمان، وقتی ذره در امتداد مسیرش به پیش می‌رود، تغییر نکند ثابت حرکت نامیده می‌شود. همچنین می‌توان گفت که تابع پایسته است.

وقتی یک ذره تحت اثر نیروهای پایستار (غیرچرخشی و مستقل از زمان) قرار دارد انرژی آن همیشه یک ثابت حرکت است، یعنی، انرژی پایسته است. از (۱۰-۲)، با استفاده از قاعده زنجیری برای مشتق‌گیری، خواهیم داشت

$$\frac{dE}{dt} = m\mathbf{v} \cdot \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \mathbf{v} \cdot \nabla V = \mathbf{v} \cdot (m\mathbf{a} + \nabla V)$$

با توجه به قانون نیوتن، جمله داخل پرانتز صفر است و  $E$  یک ثابت حرکت است. برای روشن کردن نظریه بالا، قوانین نیوتن را به یک نوسانگر همسانگرد، یعنی، به ذره‌ای که به وسیله یک نیروی بازگرداننده خطی

$$\mathbf{F} = -k\mathbf{r} \quad (۱۱-۲)$$

به طرف مبدأ کشیده می‌شود، اعمال خواهیم کرد ( $k$  ضریب کشسانی است). انرژی پتانسیل وابسته به این نیرو عبارت است از

$$V = \frac{1}{2}kr^2 \quad (۱۲-۲)$$

معادلات حرکت به صورت زیر در می‌آیند

$$\begin{aligned} m\ddot{x} &= -\frac{\partial V}{\partial x} = -kx \\ m\ddot{y} &= -\frac{\partial V}{\partial y} = -ky \end{aligned} \quad (۲-۱۳)$$

و

$$m\ddot{z} = -\frac{\partial V}{\partial z} = -kz$$

فرض کنیم شرایط اولیه عبارت باشند از

$$\begin{aligned} x(0) &= x_0, & y(0) &= y_0, & z(0) &= 0, \\ v_x(0) &= v_{x_0}, & v_y(0) &= v_{y_0}, & v_z(0) &= 0 \end{aligned}$$

جواب برای مختصه  $z$  عبارت است از

$$v_z \equiv z \equiv 0 \quad (۲-۱۴)$$

در نتیجه، حرکت در صفحه  $(x, y)$  باقی می‌ماند. جوابهای مربوط به  $x$  و  $y$  عبارتند از

$$x = A_x \cos(\omega t + \phi_x), \quad y = A_y \cos(\omega t + \phi_y) \quad (۲-۱۵)$$

که در آن

$$\begin{aligned} A_x &= \left( x_0^2 + \frac{v_{x_0}^2}{\omega^2} \right)^{1/2}, & A_y &= \left( y_0^2 + \frac{v_{y_0}^2}{\omega^2} \right)^{1/2} \\ \phi_x &= \tan^{-1} \frac{v_{x_0}}{\omega x_0}, & \phi_y &= \tan^{-1} \frac{v_{y_0}}{\omega y_0} \end{aligned}$$

سرعت با مشتق‌گیری از (۲-۱۵) به دست می‌آید.

همان‌طور که قبلاً دیدیم، انرژی

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kr^2 = \frac{1}{2}m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) + \frac{1}{2}k(x^2 + y^2 + z^2) \quad (۲-۱۶)$$

یک ثابت حرکت است زیرا نوسانگر یک سیستم پایستار است. می‌توان ثابت کرد که مولفه غیر صفر تکانه زاویه‌ای،

$$L = L_z = m(xv_y - yv_x) \quad (۲-۱۷)$$

نیز یک ثابت حرکت است. هردو ثابت حرکت می‌توانند تحت شرایط اولیه محاسبه شده و برحسب  $r_0$  و  $v_0$  بیان شوند.

با فرض اینکه  $v_{x_0} = 0$  و  $y_0 = 0$  است، مسئله را قدری ساده می‌کنیم. جوابهای (۲-۱۵) خواهند شد

$$x = x_0 \cos \omega t, \quad y = \frac{v_{y_0}}{\omega} \sin \omega t \quad (2-18)$$

و ثابتهای حرکت می‌توانند به صورت زیر نوشته شوند

$$E = \frac{1}{2} m v_{y_0}^2 + \frac{1}{2} k x_0^2 \quad (2-19 \text{ الف})$$

$$L = m x_0 v_{y_0} \quad (2-19 \text{ ب})$$

معادله مسیر با حذف متغیر زمانی از معادلات (۲-۱۸) به صورت زیر به دست می‌آید

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1 \quad (2-20)$$

که در آن  $a = x_0$  و  $b = v_{y_0} / \omega$ . این مدار یک بیضی، با شکل معمولی، است که قطرهای اطول و اقصر آن به وسیله شرایط اولیه تعیین می‌شوند. این شرایط می‌توانند، با استفاده از (۲-۱۹ الف) و (۲-۱۹ ب)، برحسب  $E$  و  $L$  بیان شوند.

## ۲- معادلات لاگرانژ

دلیلی وجود ندارد که قوانین نیوتن را به مختصات دکارتی محدود کنیم. در واقع، خیلی از مسائل که در مختصات دکارتی غیر قابل حل هستند می‌توانند با به کار بردن دستگاههای مختصات دیگر حل شوند. به عنوان مثال، مسئله کپلر که به ذراتی که توسط نیروی

$$\mathbf{F} = -\frac{k\mathbf{r}}{r^3} \quad \begin{array}{ll} (k = GMm, & \text{گرانشی}) \\ (k = qq', & \text{الکتروستاتیکی}) \end{array} \quad (2-21)$$



به طرف مرکز نیرو کشیده می‌شوند می‌پردازد، شامل معادلاتی به شکل زیر است

$$\begin{aligned} m\ddot{x} &= -\frac{kx}{(x^2 + y^2 + z^2)^{3/2}} = F_x \\ m\ddot{y} &= -\frac{ky}{(x^2 + y^2 + z^2)^{3/2}} = F_y \\ m\ddot{z} &= -\frac{kz}{(x^2 + y^2 + z^2)^{3/2}} = F_z \end{aligned} \quad (2-22)$$

برخلاف معادلات حرکت یک نوسانگر، این معادلات جفت شده هستند، یعنی، معادله  $x$  شامل دو متغیر دیگر  $y$  و  $z$  نیز می‌باشد، و غیره... فرایند تفکیک معمولاً "کار ساده‌ای نیست. اما، اگر مسئله در مختصات قطبی کروی، یا به کار بردن متغیرهای  $r$ ،  $\theta$  و  $\phi$ ، بیان شده بود، معادلات حرکت، همان طور که در زیر به طور اختصار خواهیم دید، به آسانی تفکیک می‌شدند. می‌توان راحتی یک صورت بندی هم ارز با قوانین نیوتن را که مستقل از دستگاه مختصات بخصوصی باشد، حدس زد. این تعمیم، که به معادلات لاگرانژ موسوم است، می‌تواند بر حسب مجموعه‌ای از مختصات تعمیم یافته بیان شود؛ این مختصات جدید نیازی ندارند که ارتباط هندسی ساده‌ای با مختصات دکارتی داشته باشند. تنها محدودیت آنها این است که از یکدیگر مستقل باشند و مکان ذره را به طور یکتا تعیین کنند.

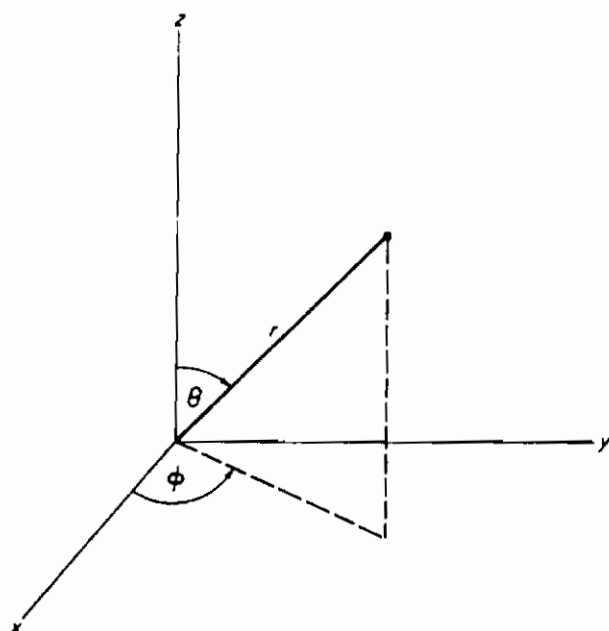
یک مجموعه مختصات تعمیم یافته می‌تواند با تبدیلی به شکل

$$q_j = q_j(r) \quad (j = 1, 2, 3), \quad (2-23)$$

بر حسب متغیرهای دکارتی تعریف شود. تعداد مختصات مستقل (در این حالت ۳) لازم برای جایگزین کردن ذره، اصطلاحاً، "تعداد درجات آزادی نامیده می‌شود. به عنوان مثال، تبدیل به مختصات قطبی عبارت است از (شکل ۲-۲)

$$\begin{aligned} r &= (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2} \\ \theta &= \tan^{-1} \frac{(x^2 + y^2)^{1/2}}{z} \\ \phi &= \tan^{-1} \frac{y}{x} \end{aligned} \quad (2-24)$$

بنابراین  $q_1 = r$ ،  $q_2 = \theta$ ،  $q_3 = \phi$  یک مجموعه بخصوصی از مختصات تعمیم یافته است.



شکل ۲-۲. مختصات قطبی کروی

در حالی که قوانین نیوتن مستقیماً با نیروها سروکار دارند، معادلات لاگرانژ کمیته به نام لاگرانژی که به صورت

$$\mathcal{L} = T - V \quad (2-25)$$

تعریف می‌شود وارد می‌کنند که در آن  $T(q_j, \dot{q}_j)$  انرژی جنبشی برحسب مختصات و سرعت‌های تعمیم یافته، و  $V(q_j)$  انرژی پتانسیل است.

برحسب لاگرانژی، معادلات لاگرانژ حرکت برای مختصات تعمیم یافته به صورت

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_j} = 0 \quad (j = 1, 2, 3, \dots) \quad (2-26)$$

درمی‌آیند. نحوه به دست آوردن (۲-۲۶) در کتابهای متعارف مکانیک کلاسیکی یافت می‌شود.\*. وقتی (۲-۲۶) حل شد و  $q_j(t)$  ها به دست آمدند، بستگی زمانی متغیرهای دکارتی می‌توانند

\* به عنوان مثال کتاب

K.R. Symon, "Mechanics" 3rd ed. Chapter 9. Addison-wesley, Reading, Massachusetts, 1971. را ببینید.

با استفاده از تبدیل وارون تبدیل (۲-۲۳) به دست آیند .  
در مختصات دکارتی ، لاگرانژی عبارت است از

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - V(x, y, z, t) \quad (2-27)$$

با اعمال معادلات لاگرانژ به متغیر  $x$  خواهیم داشت

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} = 0 \quad \text{یا} \quad m\ddot{x} = -\frac{\partial V}{\partial x} = F_x \quad (2-28)$$

با اعمال به سایر متغیرهای دکارتی ، قانون دوم نیوتن را به طور کامل به دست خواهیم آورد .  
تناظر بین معادلات لاگرانژ و قانون نیوتن وقتی روشن تر می شود که تکانه تعمیم یافته وابسته به  $q_j$  را به صورت

$$p_j = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j} \quad (2-29)$$

و نیروی تعمیم یافته را به صورت

$$F_j = -\frac{\partial V}{\partial q_j} \quad (2-30)$$

تعریف کنیم . بعلاوه

$$"F_j" = \frac{\partial T}{\partial q_j} \quad (2-31)$$

را به عنوان نیروی جنبشی یا نیروی لختی در نظر می گیریم . در این صورت ، معادلات لاگرانژ به شکل

$$\dot{p}_j = F_j + "F_j" \quad (2-32)$$

در می آید که می تواند با (۲-۴) مقایسه شود .

لاگرانژی در مختصات قطبی صفحه ای عبارت است از

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2) - V(r, \phi, t) \quad (2-33)$$

با استفاده از معادلات لاگرانژ خواهیم داشت

$$\frac{d}{dt} p_r = \frac{d}{dt} (m\dot{r}) = -\frac{\partial V}{\partial r} + mr\dot{\phi}^2 \quad (۲-۳۴)$$

و

$$\frac{d}{dt} p_\phi = \frac{d}{dt} (mr^2\dot{\phi}) = -\frac{\partial V}{\partial \phi} \quad (۲-۳۵)$$

معادله اول تغییرات تگانه شعاعی را با مولفه نیرو در امتداد شعاع به اضافه نیروی (گریز از مرکز) لختی برابر می‌دهد. معادله دوم تغییرات تگانه زاویه‌ای را به نیروی تعمیم یافته وابسته به متغیر زاویه‌ای، یعنی، گشتاور نیرو، ارتباط می‌دهد.

معادلات لاگرانژ عموماً "به یک دستگاه معادلات دیفرانسیل مرتبه دوم جفت شده برای  $q_j(t)$  ها منجر می‌شوند. مسئله کلاسیکی وقتی حل شده است که جوابهای این معادلات با توجه به شرایط اولیه مشخص به دست آمده باشند.

یک مثال مهم که مختصات قطبی را به کار می‌برد مسئله کپلر است که در ارتباط با بحث مکانیک نیوتنی ارائه کردیم. پتانسیل وابسته به این مسئله عبارت است از

$$V = -\frac{k}{r} \quad (۲-۳۶)$$

می‌توان بدون حل کامل مسئله ثابت کرد که، مثل حالت نوسانگر همسانگرد، در اینجا نیز حرکت صفحه‌ای است. با فرض اینکه حرکت در صفحه  $xy$  انجام می‌گیرد، لاگرانژی در مختصات قطبی خواهد شد

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2) + \frac{k}{r} \quad (۲-۳۷)$$

و از معادلات لاگرانژ نتیجه خواهد شد

$$m\ddot{r} - mr\dot{\phi}^2 = -\frac{k}{r^2} \quad (۲-۳۸)$$

و

$$\dot{p}_\phi = \frac{d}{dt} (mr^2\dot{\phi}) = 0 \quad \text{یا} \quad p_\phi = mr^2\dot{\phi} = L = \text{const} \quad (۲-۳۹)$$

چون  $\phi$  در لاگرانژی ظاهر نمی‌شود، تکانه تعمیم یافته متناظر با آن یک ثابت حرکت است. مختصاتی که در لاگرانژی ظاهر نمی‌شوند چرخه‌ای یا قابل اغماض نامیده می‌شوند. توجه کنیم که چگونه معادلات حرکت فوراً از لاگرانژی به دست می‌آیند، در صورتی که در مکانیک نیوتنی نخست باید تمام نیروها پیدا شوند و غالباً پس از آن تجزیه شوند. اما، وقتی معادلات دیفرانسیل حرکت پیدا شدند، چگونگی به دست آمدن آنها در حل آنها تأثیر ناچیزی خواهد داشت.

برای مسئله کپلر، هم انرژی

$$E = \frac{1}{2} m(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2) - \frac{k}{r} \quad (2-40)$$

و هم تکانه زاویه‌ای

$$L = mr^2 \dot{\phi} \quad (2-41)$$

ثابت حرکت اند. با استفاده از معادله (2-41) می‌توان  $\dot{\phi} = L/mr^2$  را در (2-40) قرار داد و آنرا برای  $\dot{r}$  حل کرد، که نتیجه خواهد شد

$$\dot{r} = \frac{dr}{dt} = \left[ \frac{2}{m} \left( E + \frac{k}{r} - \frac{L^2}{2mr^2} \right) \right]^{1/2}$$

یا

$$t = \int_0^t dt = \int_{r_0}^r \frac{dr}{\left[ \frac{2}{m} \left( E + \frac{k}{r} - \frac{L^2}{2mr^2} \right) \right]^{1/2}} = I(r) \quad (2-42)$$

با اینگونه انتگرال فوق، همان‌طور که نشان می‌دهد، انتگرال ساده‌ای نیست، می‌تواند به شکل آشناتری تبدیل شده و محاسبه شود، یا می‌تواند به روش عددی محاسبه گردد. در هر حالت (2-42) می‌تواند وارونه شود و نتیجه دهد

$$r = r(t) \quad (2-43)$$

بالاخره، می‌توان (2-41) را انتگرال‌گیری کرد و نتیجه گرفت

$$\phi(t) = L \int_0^t \frac{dt}{mr^2(t)} + \phi_0 \quad (2-44)$$

وقتی  $r(t)$  شناخته شده باشد می‌توان این انتگرال را محاسبه کرد .  
در حالی که ممکن نیست بتوان  $r(t)$  و  $\phi(t)$  را به سادگی به دست آورد ، می‌توان به‌طور  
غیرمستقیم متغیر زمانی را حذف کرد و مسیر

$$r = r(\phi) \quad (۲-۴۵)$$

را تعیین کرد . نتیجه کاملاً "شناخته شده است و عبارت است از

$$r = \frac{a(1 - \varepsilon^2)}{1 + \varepsilon \cos(\phi - \phi_0)} \quad (۲-۴۶)$$

که در آن ثابتهای هندسی به‌وسیله

$$\varepsilon = \left(1 + \frac{2EL^2}{mk^2}\right)^{1/2} \quad (\text{خروج از مرکز}) \quad (۲-۴۷)$$

و

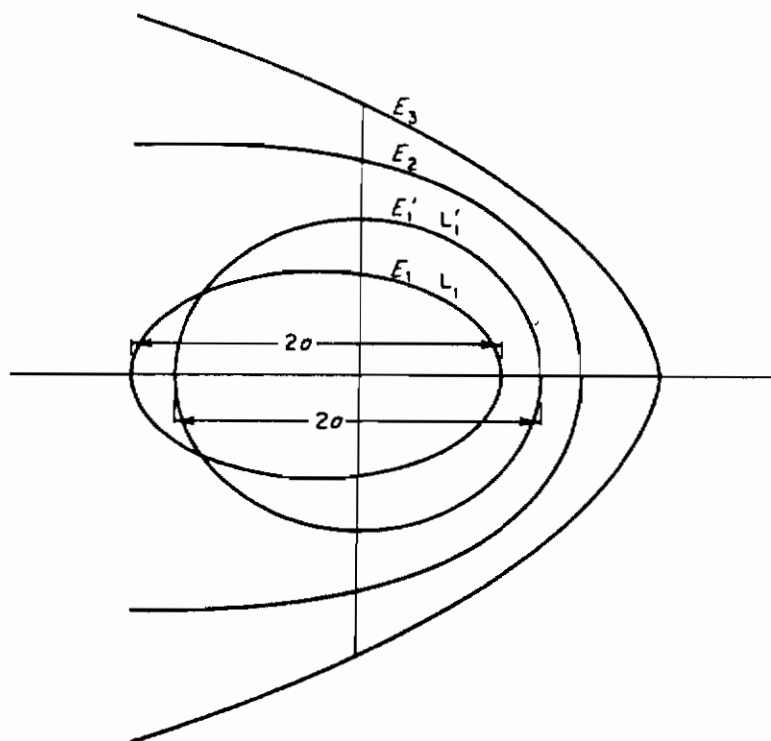
$$a = -\frac{k}{2E} \quad (۲-۴۸)$$

تعیین می‌شوند . مسیر یا مدار یک مقطع مخروطی است که مرکز نیرو در یکی از کانونهای آن است . مخصوصاً ، اگر  $\varepsilon < 1$  ( $E < 0$ ) باشد یک بیضی ، اگر  $\varepsilon = 1$  ( $E = 0$ ) باشد یک سهمی و اگر  $\varepsilon > 1$  ( $E > 0$ ) باشد یک هذلولی خواهد بود . درحالتی که مسیر بیضی است ،  $a$  نصف قطرها طول می‌باشد و تابع  $E$  است ولی تابع  $L$  نیست . برای یک مقدار معین انرژی بیضی‌های زیادی وجود دارند ، که قطرا طول تمام آنها یکی است . خروج از مرکزهای آنها ، بسته به تکانه زاویه‌ای  $L$  ذره ، متفاوت اند . وجود مدارهای متفاوت برای یک انرژی معین در مکانیک کوانتومی نیز رخ می‌دهد که در آنجا به تبهگنی تعبیر می‌شود (شکل ۲-۳) .  
ممکن است پتانسیلهای وابسته به سرعت ، مثل

$$U(q_j, \dot{q}_j, t) \quad (۲-۴۹)$$

در فرمولبندی لاگرانژی وارد شوند . برای وارد کردن این پتانسیلها ، نیروهای تعمیم یافته باید به‌صورت زیر مشتق از آنها باشند

$$F_j = \frac{d}{dt} \frac{\partial U}{\partial \dot{q}_j} - \frac{\partial U}{\partial q_j} \quad (۲-۵۰)$$



شکل ۲-۳. مدارهای مربوط به پتانسیل  $1/r$  برای انرژیهای مختلف. توجه کنیم که دو مدار بسته طوری انتخاب شده اند که انرژیهای آنها برابر باشند.

در واقع، همان طور که در زیر نشان خواهیم داد، در مورد نیروهای الکترومغناطیسی که به ذرات باردار وارد می شوند این چنین است، ما صرفاً "نیاز داریم که  $U$  را همانند  $V$  در لاگرانژی مورد استفاده قرار دهیم، یعنی، قرار دهیم  $\mathcal{L} = T - U$ ، و اقدام به به دست آوردن معادلات لاگرانژ کنیم.

در مورد نیروهای الکتروستاتیکی و مغناطیسی، می خواهیم که نیروی وارد به ذره به صورت

$$\mathbf{F} = q\mathbf{E} + \frac{q\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{B} \quad (\text{نیروی لورنتس}) \quad (۵۱-۲)$$

باشد. با وارد کردن پتانسیلهای برداری و نردهای  $\mathbf{A}$  و  $\Phi$ ، به طوری که داشته باشیم

$$\mathbf{E} = -\nabla\Phi \quad \text{و} \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (۵۲-۲)$$

می توان یک تابع پتانسیل وابسته به سرعت به صورت

$$U = q\Phi(\mathbf{r}) - \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{v} \quad (۵۳-۲)$$

ساخت\*. با کاربرد (۲-۵۰) در مورد (۲-۵۳)، برای مولفه  $x$  خواهیم داشت

$$F_x = -\frac{d}{dt} \frac{q}{c} A_x - q \frac{\partial \Phi}{\partial x} + \frac{q}{c} \frac{\partial}{\partial x} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) \quad (2-54)$$

چون آهنگ تغییرات  $A_x$ ، از دید ذره، عبارت است از

$$\frac{d}{dt} A_x = \frac{\partial A_x}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial A_x}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial A_x}{\partial z} \frac{dz}{dt} = \frac{\partial A_x}{\partial x} v_x + \frac{\partial A_x}{\partial y} v_y + \frac{\partial A_x}{\partial z} v_z$$

(۲-۵۴) خواهد شد

$$F_x = -\frac{q}{c} \left[ \frac{\partial A_x}{\partial x} v_x + \frac{\partial A_x}{\partial y} v_y + \frac{\partial A_x}{\partial z} v_z \right] - q \frac{\partial \Phi}{\partial x} + \frac{q}{c} \frac{\partial}{\partial x} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) \quad (2-55)$$

این درست مولفه  $x$  نیروی

$$\mathbf{F} = -\frac{q}{c} \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{A} - q \nabla \Phi + \frac{q}{c} \nabla (\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) \quad (2-56)$$

است. اگر  $\mathbf{v}$  مستقل از  $\mathbf{r}$  باشد، می‌توان از اتحاد

$$\nabla (\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) = \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{A} + \mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{A}) \quad (2-57)$$

استفاده کرد، و بالاخره (۲-۵۶) خواهد شد

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= q(-\nabla \Phi) + \frac{q}{c} \mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{A}) \\ &= q\mathbf{E} + \frac{q}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \end{aligned}$$

که همان نتیجه موردنظر است. بنابراین، لاگرانژی الکترومغناطیسی عبارت است از

$$\mathcal{L} = T - U = \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 + \frac{q}{c} \mathbf{A} \cdot \mathbf{v} - q\Phi \quad (2-58)$$

---

\* این نتیجه برای میدانهای تابع زمان نیز معتبر است.



## ۳- معادلات هامیلتون

صورتبندی لاگرانژی که در بخش قبل مورد بحث قرار گرفت برای بسط موضوع مکانیک کوانتومی نامناسب است. همان طور که در فصل ۳ خواهیم دید، مکانیک کوانتومی طلب می‌کند که مختصات تعمیم یافته نقشی برابر با تگانه‌های مزدوج بند/دی متناظرشان بازی کنند. صورتبندی کلاسیکی مطلوب باید به طور صریح معادلات حرکتی را ارائه دهد که نسبت به  $q_j$  و  $p_j$  متقارن باشند. معادلات لاگرانژ (و قانون نیوتن) مختصات را متفاوت از تگانه‌های آنها تلقی می‌کنند، از این نظر که فقط مشتقات زمانی تگانه‌ها در (۲-۳۲) ظاهر می‌شوند. صورتبندی هامیلتونی، که قرار است در اینجا مورد بحث قرار گیرد، تقارن مورد نظرم‌ان بین  $q_j$  و  $p_j$  را فراهم می‌کند. با استفاده از تبدیل

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^3 p_i \dot{q}_i - \mathcal{L} \quad (۲-۵۹)$$

که در آن

$$p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} = p_i(q_1, \dots, \dot{q}_1, \dots) \quad (۲-۶۰)$$

تابعی از لاگرانژی می‌سازیم. معادله (۲-۵۹) مثالی از تبدیل لوژ/ندر<sup>۲</sup> است، که در این حالت تابعی موسوم به هامیلتونی ایجاد می‌کند به طوری که متغیرهای طبیعی آن به جای  $q_j$  و  $\dot{q}_j$  که متغیرهای لاگرانژی هستند، عبارتند از  $q_j$  و  $p_j$ . ساختن هامیلتونی به کمک (۲-۶۰) که  $\dot{q}_i$  را بر حسب مختصات و تگانه‌هایی که در طرف راست (۲-۵۹) ظاهر می‌شوند بیان می‌کند انجام می‌گیرد. هامیلتونی همیشه بر حسب  $q_i$  و  $p_i$  بیان می‌شود.

می‌توان نشان داد که برای بیشتر سیستمهایی که پتانسیل آنها مستقل از سرعت است، هامیلتونی همان انرژی کل سیستم است که بر حسب مختصات و تگانه‌ها بیان شده باشد. برای چنین سیستمهایی می‌توان نوشت

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}, t) = T(p_i, q_i) + V(q_i, t) \quad (۲-۶۱)$$

که در آن  $T$  انرژی جنبشی سیستم است. هامیلتونی یک ذره در حضور نیروهای الکترو-مغناطیسی را می‌توان، با انجام یک تبدیل لوژاندر روی (۲-۵۸) به صورت زیر به دست آورد

$$\mathcal{H} = \frac{(p - qA/c)^2}{2m} + q\Phi \quad (2-62)$$

با استفاده از معادلات لاگرانژ، می‌توان نشان داد که معادلات حرکت از هامیلتونی، با به کار بردن

$$\dot{p}_j = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_j}, \quad \dot{q}_j = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_j}, \quad \frac{d\mathcal{H}}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} \quad (2-63)$$

به دست می‌آیند. معادلات (۲-۶۳) به نام معادلات حرکت بندادی هامیلتون نامیده می‌شوند. این معادلات نسبت به  $q_j$  و  $p_j$  متقارن اند\* و کاملاً هم‌ارز معادلات لاگرانژ (۲-۲۶) هستند. از (۲-۶۳) نتیجه می‌شود که اگر  $\mathcal{L}$  یا  $\mathcal{H}$  صریحاً به زمان وابسته نباشند، هامیلتونی (و در اغلب موارد انرژی) یک ثابت حرکت است\*\*.

علی‌رغم سه معادله دیفرانسیل مرتبه دوم لاگرانژ، معادلات هامیلتون (۲-۶۳) منجر به شش معادله دیفرانسیل مرتبه اول جفت شده می‌شوند. معادلات اخیر باید برای  $p_j(t)$  و  $q_j(t)$  حل شوند. برای تفکیک این معادلات، می‌توان تبدیلاتی در نظر گرفت که مختصات و تکانه‌های جدیدی به صورت

$$p'_j = p'_j(p_1, \dots, q_1, \dots), \quad q'_j = q'_j(p_1, \dots, q_1, \dots) \quad (2-64)$$

و هامیلتونی جدیدی به صورت

$$\mathcal{H}'(p'_i, q'_i) = \mathcal{H}(p_i, q_i) \quad (2-65)$$

وارد کند. معادلات (۲-۶۴) لزوماً تبدیلات مختصات ساده‌ای که  $p_i$  و  $q_i$  را مخلوط می‌کنند نیستند؛ بلکه محدود به تبدیلاتی هستیم که برای آنها معادلات دیفرانسیل حرکت حاصل از

\* بجز یک علامت منفی، تقارن کامل است.

\*\* فرض خواهیم کرد.  $\partial \mathcal{H} / \partial t = d\mathcal{H} / dt = 0$  مگر اینکه خلاف آن ذکر شود.

$$\dot{p}_j' = -\frac{\partial \mathcal{H}'}{\partial q_j'} \quad \text{و} \quad \dot{q}_j' = \frac{\partial \mathcal{H}'}{\partial p_j'} \quad (۶۶-۲)$$

با معادلات دیفرانسیل حرکت (۶۳-۲) معادل باشند. چنین تبدیلاتی تبدیلات بنیادی نامیده می‌شوند، زیرا شکل معادلات هامیلتون را محفوظ نگاه می‌دارند. یک تغییر مختصات ساده (تبدیل نقطه‌ای) همیشه بنیادی است.

در بعضی موارد می‌توان یک تبدیل بنیادی پیدا کرد که به‌طور بسیار ساده معادلات هامیلتونی را از یکدیگر تفکیک نماید. به‌عنوان مثال، هامیلتونی یک نوسانگر یک‌بعدی

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2, \quad \omega = \left(\frac{k}{m}\right)^{1/2} \quad (۶۷-۲)$$

منجر به معادلات حرکت جفت شده

$$\dot{p} = -m\omega^2 x, \quad \dot{x} = \frac{p}{m} \quad (۶۸-۲)$$

می‌شوند. اگر تبدیلات بنیادی

$$p = (2m\omega p')^{1/2} \cos x', \quad x = \left(\frac{2p'}{m\omega}\right)^{1/2} \sin x' \quad (۶۹-۲)$$

را به‌کار ببریم معادلات دیفرانسیل ساده‌تری به‌دست می‌آید. هامیلتونی (۶۷-۲) خواهد شد،

$$\mathcal{H}' = \omega p' \cos^2 x' + \omega p' \sin^2 x' = \omega p' = E \quad (۷۰-۲)$$

و معادلات حرکت تفکیک شده

$$\dot{p}' = 0 \quad \text{و} \quad \dot{x}' = \omega \quad (۷۱-۲)$$

از آن به‌دست می‌آید که جواب آنها عبارت است از

$$p' = \text{const} = \frac{E}{\omega} \quad \text{و} \quad x' = \omega t + \phi \quad (۷۲-۲)$$

اگر نتایج را برحسب مختصات و تکانه‌های قدیم بیان کنیم خواهیم داشت

$$p = (2mE)^{1/2} \cos(\omega t + \phi), \quad x = \left(\frac{2E}{m\omega^2}\right)^{1/2} \sin(\omega t + \phi) \quad (۷۳-۲)$$

این روابط همان نتایج آشنای یک نوسانگر هستند، با این استثناء که دامنه برحسب یک ثابت حرکت، یعنی، انرژی، بیان شده است.

البته، امکان تفکیک و حل ساده یک مسئله مشخص بستگی به تبدیلات بندادی مناسب با آن دارد. نحوه به دست آوردن چنین تبدیلی موضوع نظریه هامیلتون - ژاکوبی است و در اینجا ارائه نخواهد شد.\*

#### ۴ - گروه‌های پواسن

برای هر تابع بندادی  $G(p_i, q_i, t)$ ، معادلات حرکت می‌توانند، با استفاده از معادلات هامیلتون به صورت زیر نوشته شوند

$$\begin{aligned} \frac{dG}{dt} &= \sum_{i=1}^3 \frac{\partial G}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial G}{\partial p_i} \dot{p}_i + \frac{\partial G}{\partial t} \\ &= \sum_{i=1}^3 \frac{\partial G}{\partial q_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} - \frac{\partial G}{\partial p_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} + \frac{\partial G}{\partial t} \end{aligned} \quad (۷۴-۲)$$

گروه پواسن دو تابع  $A$  و  $B$  را به صورت زیر تعریف می‌کنیم\*\*

$$\{A, B\} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial q_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} \quad (۷۵-۲)$$

بنابراین، (۷۴-۲) می‌تواند به صورت

$$\frac{dG}{dt} = \{G, \mathcal{H}\} + \frac{\partial G}{\partial t} \quad (۷۶-۲)$$

\* به عنوان مثال به کتاب زیر مراجعه کنید

H. Goldstein "classical Mechanics," Chapter 9, Addison  
wesley 'Reading, Messachusetts 1950

\*\* بعضی از مؤلفین نشانه  $\{ \}$  را برای گروه پواسن ترجیح می‌دهند. ما نشانه  $\{ \}$  را به کار می‌بریم تا با جابجایی‌ها که در فصل سوم وارد خواهند شد اشتباه نشود.

خلاصه شود. برای توابع بندادی که صریحا" تابع زمان نیستند ( $\partial G/\partial t = 0$ )، مشاهده می‌کنیم که اگر  $\{G, \mathcal{H}\} = 0$  باشد  $G$  یک ثابت حرکت است. در واقع، (۷۶-۲) عملا" تمام معادلات هامیلتون را در بر دارد، همان‌طور که می‌توان با قراردادن  $G = p_i$ ،  $G = q_i$ ، یا  $G = \mathcal{H}$  آنرا تحقیق کرد. به راحتی می‌توان ثابت کرد که

$$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij} \quad \text{و} \quad \{q_i, q_j\} = \{p_i, p_j\} = 0 \quad (77-2)$$

که در آن دلتای کرونگر<sup>۳</sup> به صورت زیر تعریف شده است

$$\begin{aligned} \delta_{ij} &= 1 & i &= j \\ \delta_{ij} &= 0 & i &\neq j \end{aligned} \quad (78-2)$$

هر رابطه‌ای که گروه‌های پواسن را در بر داشته باشد باید تحت یک تبدیل بندادی تغییر-ناپذیر باشد. این در واقع تعریف دیگری برای تبدیل بندادی است. معادلات (۷۷-۲) روابط بنیادی گروه پواسن برای تمام مختصات و تکانه‌های مزدوج بندادی آنها می‌باشند. تحقیق این که مولفه‌های تکانه زاویه‌ای

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (79-2)$$

در روابط

$$\{L_i, L_j\} = L_k \quad (i, j, k = x, y, z, \text{ با ترتیب چرخه‌ای})$$

$$(80-2)$$

$$\{L_i, L^2\} = 0$$

صدق می‌کنند مشکل نخواهد بود.

از (۷۵-۲) نتیجه می‌شود که مشتق یک تابع بندادی نسبت به یک مختصه  $q_j$  برابر است با گروه پواسن آن تابع با تکانه مزدوج بندادی  $p_j$ ی آن، یعنی،  $\partial F/\partial q_j = \{F, p_j\}$ ، به ویژه، داریم

$$\frac{\partial F}{\partial x} = \{F, p_x\} \quad \text{یا} \quad F(x + dx, y, z) = F(x, y, z) + \{F, p_x\} dx \quad (81-2)$$

تکانه پندادی  $p_x$  به نام مولد انتقالهای بینهایت کوچک در امتداد  $x$  موسوم است.

### ۵- دینامیک نسبیتی

بحث را با تعمیم بعضی از نتایج قبلی پایان می‌دهیم به نحوی که بتوانند به ذرات نسبیتی که با سرعتهای قابل مقایسه با سرعت نور ( $v \lesssim c$ ) حرکت می‌کنند اعمال شوند، پایان می‌دهیم. قانون دوم نیوتن باید اصلاح شود و به صورت

$$F = \dot{p} \quad (2-82)$$

نوشته شود که در آن  $p$  تکانه نسبیتی ذره

$$p = \frac{mv}{(1 - (v^2/c^2))^{1/2}} \quad (2-83)$$

و  $m$  جرم "سکون" ذره است. معادلات لاگرانژ و هامیلتون دست نخورده باقی می‌مانند به شرط آنکه توابع نسبیتی مناسب

$$\mathcal{L} = -mc^2 \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{1/2} - V(r, t) \quad (2-84)$$

و

$$\mathcal{H} = (p^2 c^2 + m^2 c^4)^{1/2} + V(r, t) \quad (2-85)$$

را به کار ببریم. می‌توان ثابت کرد که هامیلتونی نسبیتی یک ذره باردار در یک میدان الکترومغناطیسی به صورت زیر است

$$\mathcal{H} = \left[ \left( p - \frac{qA}{c} \right)^2 c^2 + m^2 c^4 \right]^{1/2} + q\Phi \quad (2-86)$$

این نتیجه اخیر با اعمال کمترین جایگزینی، که عبارت است از

$$p \rightarrow p - \frac{qA}{c} \quad (2-87)$$

و با به کارگیری  $q\Phi$  به عنوان تابع انرژی پتانسیل معمولی به دست می آید .  
 می توان مستقیماً تحقیق کرد که اعمال معادلات لاگرانژ به (۲-۸۴) ، یا به طور معادل  
 اعمال معادلات هامیلتون به (۲-۸۵) ، به قانون دوم نیوتن (۲-۸۲) منجر می شود . در حد  
 $v/c \ll 1$  ، بسط تیلور<sup>۴</sup> (۲-۸۴) و (۲-۸۵) نشان می دهد که شکلهای نسبیتی دقیقاً "به هم تاهای  
 غیرنسبیتی خود تبدیل می شوند ، به استثنای این واقعیت که انرژی سکون ،  $mc^2$  ، از  $\mathcal{H}$  کم  
 می شود و به  $\mathcal{H}$  اضافه می شود . اما این انرژی ثابت ، تأثیری در معادلات حرکت ندارد .  
 فرمولبندی کروسه هامیلتون - پواسن به ویژه برای تعمیم به نظریه کوانتومی مناسب است .  
 خواهیم دید که چنین تعمیمی ثابت پلانک ،  $h$  ، ثابت بنیادی نظریه کوانتومی را وارد می کند  
 و هم چنین خواهیم دید که  $h \rightarrow 0$  حد کلاسیکی را ارائه می دهد . در فصل بعد ، چهارچوب  
 ریاضیاتی نظریه کوانتومی را به طریقی گسترش خواهیم داد که به روشنی ارتباط آنرا با مکانیک  
 کلاسیکی نمایان سازد .

### مسائل

- ۱-۲ با استفاده از (۲-۱۵) مستقیماً نشان دهید که  $L = m(xv_y - yv_x)$  برای یک نوسانگر  
 همسانگرد یک ثابت حرکت است .
- ۲-۲ جوابهای (۲-۱۸) را بر حسب ثابتهای حرکت  $E$  (انرژی) و  $L$  (تکانه زاویه ای) بیان  
 کنید .
- ۳-۲ یک سیستم  $N$  ذره ای که هامیلتونی آن

$$\mathcal{H} = \sum_{j=1}^N \frac{p_j^2}{2m} + V(\mathbf{r}_j) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$$

باشد در نظر بگیرید . فرض کنید که مختصات و تکانه ها توابع متناوبی<sup>۵</sup> با دوره  
 تناوب  $\tau$  ، از زمان باشند .  
 (الف) رابطه

$$\left\langle \sum_{j=1}^N \mathbf{r}_j \cdot \nabla_{\mathbf{r}_j} \mathcal{H} \right\rangle = \left\langle \sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j \cdot \nabla_{\mathbf{p}_j} \mathcal{H} \right\rangle$$

را که در آن متوسط دوره‌ای به وسیله

$$\langle A \rangle = \int_0^{\tau} \frac{A}{\tau} dt$$

تعریف شده است، ثابت کنید. (راهنمایی: از تابع  $G = \sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j \cdot \mathbf{r}_j$  نسبت به زمان مشتق بگیرید)

(ب) منفی طرف چپ نتیجه فوق ویریا  $\langle \mathcal{V} \rangle$ ،  $\langle \mathcal{V} \rangle$ ، نامیده می‌شود. نشان دهید که طرف راست برابر است با دو برابر انرژی جنبشی. این مطلب قضیه ویریا را به ما می‌دهد.

$$-\langle \mathcal{V} \rangle = 2\langle T \rangle$$

(ج) نشان دهید که برای یک ذره واقع در یک پتانسیل  $V = Ar^n$ ، قضیه ویریا به شکل زیر در می‌آید

$$\langle T \rangle = \frac{1}{2}n\langle V \rangle$$

(د) با یک محاسبه مستقیم نشان دهید که برای یک نوسانگر ساده یک‌بعدی، قضیه ویریا نتیجه می‌دهد  $\langle T \rangle = \langle V \rangle$ .

۴-۲ مورد یک ذره باردار در حضور یک میدان الکترومغناطیسی را در نظر بگیرید. (الف با استفاده از لاگرانژی (۵۸-۲) نشان دهید که تکانه مزدوج بندادی با  $\mathbf{x}$  عبارت است از

$$\mathbf{p}_x = m\mathbf{v}_x + \frac{qA_x}{c}$$

(ب) هم چنین نشان دهید که تکانه مزدوج با زاویه سمتی  $\phi$  عبارت است از

$$p_\phi = (\mathbf{r} \times m\mathbf{v})_z + \left( \mathbf{r} \times \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)_z$$

(ج) یک تبدیل لوزاندر به لاگرانژی (۵۸-۲) اعمال کنید و هامیلتونی متناظر را به دست آورید.



- ۵-۲ (الف) هامیلتونی وابسته به دو الکترون اتم هلیوم را، با در نظر گرفتن نیروی جاذبه آنها به طرف هسته و هم چنین دفع متقابل آنها بنویسید.  
(ب) با اثبات

$$\{\mathcal{H}, L\} = 0$$

نشان دهید که تکانه زاویه‌ای کل الکترونها،  $L = L_1 + L_2$ ، پایسته است.

- ۶-۲ نشان دهید که مولفه‌های تکانه زاویه‌ای در روابط زیر صدق می‌کنند

$$\{L_i, L_j\} = L_k, \quad \{L^2, L_i\} = 0$$

- ۷-۲ (الف) معادلات لاگرانژ و معادلات هامیلتون را به ترتیب به (۸۴-۲) و (۸۵-۲) اعمال کنید و تحقیق کنید که به قانون نیوتن منجر خواهند شد.  
(ب) نشان دهید که

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\text{rel}} &\xrightarrow{v/c \rightarrow 0} \mathcal{L}_{\text{nonrel}} - mc^2 \\ \mathcal{H}_{\text{rel}} &\xrightarrow{v/c \rightarrow 0} \mathcal{H}_{\text{nonrel}} + mc^2 \end{aligned}$$

### مراجع پیشنهادی

- Corben, H. C., and Stehle, P., "Classical Mechanics." Wiley, New York, 1960.  
Goldstein, H., "Classical Mechanics." Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1950.  
Konopinski, E. J., "Classical Descriptions of Motion." Freeman, San Francisco, 1969.



# ۳

## صورتبندی مکانیک کوانتومی

تجربه‌های اولیه فیزیک جدید پیشنهاد می‌کردند که برای توضیح رفتار بنیادی ماده و تابش، لازم است به متغیرهای بندادی، از قبیل انرژی و تکانه زاویه‌ای، فقط بعضی مقادیر مجاز را نسبت دهیم. ولی، منشاء کوانتش در حقیقت تا سال ۱۹۲۵ فهمیده نشده بود. نظریه صوری مکانیک کوانتومی می‌بایستی چیزی بیش از مقادیر مشخصه توابع بندادی اندازه‌پذیر یا مشاهده‌پذیرها را پیشگوئی می‌کرد. این نظریه هم‌چنین می‌بایستی حاوی قالبی باشد که به کمک آن بتوان تمام اطلاعات ممکن از یک سیستم مکانیکی را به دست آورد. به تدریج که نظریه گسترش یافت تناظر بین مکانیک کلاسیکی و مکانیک کوانتومی آشکارتر شد.

شکل جدید نظریه کوانتومی به طرق مختلف، اما معادلی، توسط شرودینگر، هایزنبرگ و دیراک فرمولبندی شد. روشی که در اینجا به کار برده شده است منتسب به دیراک است؛ ارتباط آن با فرمولبندی شرودینگر بعداً "برقرار خواهد شد". نمایش دیراک از نظریه کوانتومی مستلزم اطلاعاتی در مورد فضای برداری خطی است، بخشی از ریاضیات که برای بحث ما لازم است در زیر ارائه می‌شود.

### ۱- بردارها در یک فضای خطی مختلط $N$ بعدی

یک بردار در یک فضای حقیقی سه بعدی به وسیله اندازه و جهت آن مشخص می‌شود. برای نمایش بردار بهتر است که یک پایه راست هنجار که عبارت از سه بردار دو به دو متعامد به طول واحد است، در نظر بگیریم. معمول است که بردارهای وابسته به محورهای  $x$ ،  $y$  و  $z$  را به ترتیب با  $i$ ،  $j$  و  $k$  نمایش می‌دهند. این بردارها دارای خواص راست هنجاری زیر

می‌باشند

$$\begin{aligned} i \cdot i &= j \cdot j = k \cdot k = 1 \\ i \cdot j &= i \cdot k = j \cdot k = 0 \end{aligned}$$

اگر فضا خطی باشد یک بردار غیرمشتق می‌تواند به وسیله یک ترکیب خطی از بردارهای پایه نمایش داده شود، یعنی

$$a = a_x i + a_y j + a_z k \quad (۱-۳)$$

کمیات  $a_x$ ،  $a_y$ ، و  $a_z$  مولفه‌های بردار  $a$  در پایه  $i$ ،  $j$ ،  $k$  نامیده می‌شوند. باید تاکید شود که در حالی که بردار  $a$  یکتاست،  $a_x$ ،  $a_y$ ، و  $a_z$  بستگی به پایه به کار برده شده دارند. با استفاده از ویژگیهای بردارهای پایه خواهیم داشت

$$a_x = a \cdot i, \quad a_y = a \cdot j, \quad \text{و} \quad a_z = a \cdot k$$

در یک پایه دیگر مولفه‌ها به صورت زیر خواهند بود

$$a'_x = a \cdot i', \quad a'_y = a \cdot j', \quad \text{و} \quad a'_z = a \cdot k'$$

طول بردار به وسیله

$$|a| = (a_x^2 + a_y^2 + a_z^2)^{1/2} = (a'^2_x + a'^2_y + a'^2_z)^{1/2}$$

تعریف می‌شود و در تمام پایه‌ها یکسان است. کمیتی که در تمام پایه‌ها یکسان باشند نورده‌ای نامیده می‌شوند.

حاصل ضرب نقطه‌ای یا داخلی دو بردار نیز نورده‌ای است و می‌تواند بر حسب مولفه‌های آنها، با به کار بردن

$$a \cdot b = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z = a'_x b'_x + a'_y b'_y + a'_z b'_z$$

تعیین شود.

می‌توان مولفه‌های یک بردار در یک پایه را با استفاده از یک ماتریس ستونی، یعنی

$$a = \begin{pmatrix} a_x \\ a_y \\ a_z \end{pmatrix}$$

نمایش داد. حاصل ضرب عددی  $b \cdot a$  می‌تواند با نوشتن بردار اول به صورت یک ماتریس سطر و بردار دوم به صورت یک ماتریس ستونی نمایش داده شود. با استفاده از قاعده ضرب ماتریسها خواهیم داشت

$$b \cdot a = (b_x, b_y, b_z) \begin{pmatrix} a_x \\ a_y \\ a_z \end{pmatrix} = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z \quad (۲-۳)$$

روشن است که یک بردار می‌تواند یا به وسیله یک ماتریس سطر یا به وسیله یک ماتریس ستونی بیان شود. نمایش سطر را *الحاقی* یا همزاد نمایش ستونی خواهیم نامید. حاصل ضرب داخلی شامل ضرب یک ماتریس ستونی در همزاد آن، که یک ماتریس سطر است می‌باشد. در نمادگذاری ستونی بردارهای پایه همواره به شکل زیراند

$$i = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad j = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad k = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (۳-۳)$$

اکنون با فرض این که بردارهای مورد نظر متعلق به یک فضای  $N$  بعدی هستند، مطالب فوق را تعمیم می‌دهیم. یک بردار غیر مشخص می‌تواند در یک پایه راست‌هنجار، مشابه با (۱-۳)، به صورت

$$a = \sum_{i=1}^N a^{(i)} \alpha_i \quad (۴-۳)$$

بسط داده شود که در آن روابط راست‌هنجاری عبارتند از

$$\alpha_i \cdot \alpha_j = \delta_{ij} \quad (i, j = 1, \dots, N) \quad (۵-۳)$$

$N$  بردار پایه در شکل ستونی به صورت

$$\alpha_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_N = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (۶-۳)$$

نمایش داده می‌شوند. بردار  $\mathbf{a}$  برحسب مولفه‌هایش به صورت

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a^{(1)} \\ a^{(2)} \\ a^{(3)} \\ \vdots \\ a^{(N)} \end{pmatrix} \quad (۷-۳)$$

نمایش داده می‌شود. مجدداً باید تاکید شود که بردار  $\mathbf{a}$  توسط جهت و اندازه‌اش مشخص می‌شود ولی مولفه‌های آن با پایه تغییر می‌کنند. نمایش یک بردار تنها وقتی با معنی است که پایه و هم‌چنین مولفه‌های بردار در این پایه معلوم شده باشند.

چون در اینجا فضای  $N$  بعدی یک فضای مجرد است، یک تعمیم دیگری که در نظریه کوانتومی مفید است انجام خواهیم داد. فرض می‌کنیم بردارهای فضا مختلط باشند. به بیان دیگر، لزومی ندارد که مولفه‌های یک بردار در یک پایه حقیقی باشند. بهتر است که الحاقی یک بردارستونی را از نوبه صورت یک بردار سطری با عناصری که مزدوج مختلط عناصر متناظر باشند تعریف کنیم. به بیان ریاضی داریم

$$\begin{pmatrix} a^{(1)} \\ a^{(2)} \\ \vdots \\ a^{(N)} \end{pmatrix} \text{ الحاقی} = (a^{*(1)}, a^{*(2)}, \dots, a^{*(N)}) \quad (۸-۳)$$

نمادگذاری دیراک را وارد می‌کنیم و ماتریس ستونی را به صورت

$$\mathbf{a} = |a\rangle = \begin{pmatrix} a^{(1)} \\ a^{(2)} \\ \vdots \\ a^{(N)} \end{pmatrix} \quad (۹-۳)$$

که در آن  $|a\rangle$  یک بردار گت<sup>۱</sup> نامیده می‌شود، مختصر می‌کنیم. به طریق مشابهی، شکل الحاقی  $\langle a|$  را به صورت

$$\langle a| = (a^{*(1)}, a^{*(2)}, \dots, a^{*(N)}) \quad (۱۰-۳)$$

که در آن  $\langle a|$  یک بردار برا<sup>۲</sup> نامیده می‌شود، می‌نویسیم. حاصل ضرب داخلی  $\mathbf{b} \cdot \mathbf{a}$

یک نرده‌ای مختلطی است که با ضرب برای b در کت a به دست می‌آید، یعنی

$$c = \mathbf{b} \cdot \mathbf{a} = \langle b | a \rangle = (b^{*(1)}, b^{*(2)}, \dots, b^{*(N)}) \begin{pmatrix} a^{(1)} \\ a^{(2)} \\ \vdots \\ a^{(N)} \end{pmatrix} \\ = \sum_{i=1}^N b^{*(i)} a^{(i)}. \quad (3-11)$$

عبارت‌های برا و کت از این واقعیت سرچشمه می‌گیرند که حاصل ضرب داخلی یک "برا-کت" یا "براکت\*" تشکیل می‌دهد. توجه کنیم که ضرب داخلی دیگر یک عمل جابه‌جاپذیر نیست زیرا عوض کردن ترتیب عوامل ضرب منجر به مزدوج مختلط حاصل ضرب داخلی خواهد شد.

الحاقی بردار برا یک بردار کت است و برعکس. به بیان ریاضی داریم

$$|a\rangle^\dagger = \langle a| \quad \text{و} \quad \langle a|^\dagger = |a\rangle \quad (3-12)$$

با استفاده از قاعده ضرب ماتریسیها، می‌توان نشان داد که الحاقی حاصل ضرب دو بردار برابر است با حاصل ضرب الحاقی‌های بردارها با ترتیب معکوس. بنابراین

$$c^\dagger = (\langle b | a \rangle)^\dagger = \langle a | b \rangle = c^* \quad (3-13)$$

در نتیجه، الحاقی یک نرده‌ای به‌طور ساده عبارت است از مزدوج مختلط آن. حاصل ضرب داخلی یک بردار در خودش هنجار آن بردار نامیده می‌شود و همیشه حقیقی و مثبت است، یعنی

$$\langle a | a \rangle = \sum_{i=1}^N a^{*(i)} a^{(i)} = \sum_{i=1}^N |a^{(i)}|^2 \geq 0$$

با استفاده از نمادگذاری دیراک، بسط بردار (3-4) می‌تواند در شکل کت به‌صورت

$$|a\rangle = \sum_{i=1}^N a^{(i)} |\alpha_i\rangle \quad (3-14)$$

یا در شکل برا به صورت

$$\langle a | = \sum_{i=1}^N \langle \alpha_i | a^{*(i)} \quad (۱۵-۳)$$

نوشته شود. رابطه راست هنجاری برای بردارهای پایه به شکل

$$\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = \delta_{ij} \quad (۱۶-۳)$$

در می آید، یعنی، حاصل ضرب داخلی دوبردار پایه متفاوت صفر است (تعامد) و هنجار هرکدام برابر با یک است.

## ۲- عملگرهای خطی

یک عملگر در یک فضای مختلط  $N$  بعدی به وسیله عمل  $\hat{A}$  بر روی بردارهای مختلف فضا تعریف می شود. به عنوان مثال، در رابطه

$$|b\rangle = \hat{A}|a\rangle \quad (۱۷-۳)$$

عملگر  $\hat{A}$  وقتی یکتا است که برای به دست آوردن  $|b\rangle$  از هر بردار  $|a\rangle$  روشی تعیین شده باشد. ما بحث خود را به عملگرهای خطی، یعنی، عملگرهایی که دارای ویژگی

$$\hat{A}[c|a\rangle + d|b\rangle] = c\hat{A}|a\rangle + d\hat{A}|b\rangle \quad (۱۸-۳)$$

برای بردارهای دلخواه  $|a\rangle$  و  $|b\rangle$  و اعداد دلخواه  $c$  و  $d$  باشند محدود می کنیم. با بیان بردار  $|a\rangle$  در پایه  $|\alpha_i\rangle$ ، عمل  $|b\rangle = \hat{A}|a\rangle$  خواهد شد

$$|b\rangle = \hat{A} \sum_{i=1}^N a^{(i)} |\alpha_i\rangle = \sum_{i=1}^N a^{(i)} \hat{A} |\alpha_i\rangle \quad (۱۹-۳)$$

اگر مولفه های  $|b\rangle$  نیز در این پایه معلوم باشند، اثر عملگر  $\hat{A}$  یکتا است. طرفین (۱۹-۳) را در  $\langle \alpha_j |$  ضرب داخلی می کنیم، داریم

$$\langle \alpha_j | b \rangle = b^{(j)} = \sum_{i=1}^N a^{(i)} \langle \alpha_j | \hat{A} | \alpha_i \rangle \quad (۲۰-۳)$$



$N^2$  عنصر

$$A_{ji} = \langle \alpha_j | \hat{A} | \alpha_i \rangle$$

عناصر ماتریس عملگر خطی  $\hat{A}$  در پایه  $|\alpha_i\rangle$  نامیده می‌شوند. دقت در (۲-۳) آشکار می‌کند که مولفه‌های  $|a\rangle$  و  $|b\rangle$  در رابطه ماتریسی

$$|b\rangle = \hat{A}|a\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} b^{(1)} \\ \vdots \\ b^{(N)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N1} & \cdots & A_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^{(1)} \\ \vdots \\ a^{(N)} \end{pmatrix} \quad (2-21)$$

صدق می‌کنند. به بیان معادل، یک عملگر خطی می‌تواند به صورت یک ماتریس  $N \times N$  در یک پایه  $N$  بعدی معین نمایش داده شود. مجدداً، در حالی که عملگر  $\hat{A}$  مطلق است، یعنی، به وسیله عملش بر روی بردارهای فضا تعریف شده است، عناصر آن بستگی به پایه‌ای دارد که برای نمایش آن به کار رفته است.

یک عملگر ممکن است از جهت راست روی یک کت و یا از جهت چپ روی یک براعمل کند. عملهای متوالی توسط حاصل ضرب عملگرها تجلی می‌کند. ضرب عملگرها از قوانین شرکت پذیری و توزیع پذیری پیروی می‌کند، اما لزوماً جابه‌جاپذیر نیست، یعنی

$$\begin{aligned} (\hat{A}\hat{B})\hat{C} &= \hat{A}(\hat{B}\hat{C}) \\ \hat{A}(\hat{B} + \hat{C}) &= \hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{C} \\ \hat{A}\hat{B} &\neq \hat{B}\hat{A} \end{aligned} \quad (2-22)$$

این قواعد با نتایج مشهور ضرب ماتریسی مطابقت دارند. ساده‌ترین عملگرها عملگریکه یا همانی است که دارای ویژگی

$$\hat{I}|a\rangle = |a\rangle$$

برای تمام بردارهای فضا است. شکل ماتریسی آن در تمام پایه‌ها عبارت است از

$$\hat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

وارون یک عملگر،  $A^{-1}$ ، اگر وجود داشته باشد\*، توسط عمل

$$\hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{I} \quad (۲۳-۳)$$

تعریف می‌شود. در واقع، وارون  $A^{-1}$  اثر عملگر اصلی را خنثی می‌کند. الحاقی یک عملگر،  $\hat{A}^\dagger$ ، می‌تواند به طرق متعددی تعریف شود. تعریفی که ما در اینجا به کار برده‌ایم  $\hat{A}^\dagger$  را به وسیله روابط

$$\begin{aligned} |b\rangle &= \hat{A}|a\rangle \\ \langle b| &= \langle a|\hat{A}^\dagger \end{aligned} \quad \text{برای هر } |a\rangle \text{ و } |b\rangle \text{ دلخواه}$$

تعریف می‌کند. به بیان غیرریاضی، اگر  $\hat{A}$  عملگری باشد که کت  $|b\rangle$  را از کت  $|a\rangle$  تولید کند،  $\hat{A}^\dagger$  عملگری خواهد بود که برای  $\langle b|$  را از برای  $\langle a|$  تولید می‌کند. با به کار بردن این تعریف، می‌توان ثابت کرد که

$$\langle \alpha_i | \hat{A} | \alpha_j \rangle = (\langle \alpha_j | \hat{A}^\dagger | \alpha_i \rangle)^* \quad (۲۴-۳)$$

در شکل ماتریسی، الحاقی به وسیله عوض کردن سطرها با ستونها و گرفتن مزدوج مختلط عناصر، به دست می‌آید.

دو عملگر مهم در مکانیک کوانتومی عبارتند از عملگر هرمیتی و عملگریکانی. یک عملگر هرمیتی است اگر با الحاقی خودش برابر باشد

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger$$

یا

$$\langle \alpha_i | \hat{A} | \alpha_j \rangle = (\langle \alpha_j | \hat{A} | \alpha_i \rangle)^* \quad (۲۵-۳)$$

و یکانی خواهد بود اگر وارون آن برابر با الحاقی‌اش باشد

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}^{-1}$$

یا، با استفاده از (۲۳-۳)،

---

\* عملگری که دترمینان آن (رک ۲۹-۳) صفر باشد تگین نامیده می‌شود و وارون ندارد.

$$\hat{A}\hat{A}^\dagger = \hat{A}^\dagger\hat{A} = \hat{I} \quad (۲۶-۳)$$

با استفاده از ویژگیهای عملگرها، می‌توان روابط زیر را تحقیق کرد

$$(\hat{A}\hat{B})^{-1} = \hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1}, \quad (\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger \quad (۲۷-۳)$$

اکنون تاثیر یک عملگر یکانی  $O$  را روی یک مجموعه بردارهای پایه راست‌هنگار  $|\alpha_i\rangle$  بررسی کنیم. می‌نویسیم

$$|\beta_i\rangle = O|\alpha_i\rangle$$

یا در شکل الحاقی (برا)

$$\langle\beta_j| = \langle\alpha_j|O^\dagger$$

با در نظر گرفتن ضرب داخلی و استفاده از تعریف عملگر یکانی، خواهیم داشت

$$\langle\beta_j|\beta_i\rangle = \langle\alpha_j|O^\dagger O|\alpha_i\rangle = \langle\alpha_j|\alpha_i\rangle = \delta_{ij}$$

در نتیجه، بردارهای  $|\beta_i\rangle$  یک پایه راست‌هنگار دیگر تشکیل می‌دهند. بنابراین می‌توانیم  $O$  را به یک دوران منتسب کنیم و نتیجه بگیریم که تحت یک عمل یکانی طول تمام بردارها و جهتهای نسبی آنها (حاصل ضرب داخلی) بدون تغییر می‌مانند. به‌طور عمومی‌تر، تمام کمیت‌های نرده‌ای تحت عملهای یکانی (دورانها) ناوردا هستند.

رد یک عملگر، که  $\text{Tr } \hat{A}$  نوشته می‌شود، یک کمیت نرده‌ای است و، بنابراین، تحت تغییر پایه ناوردا است. این کمیت می‌تواند با جمع عناصر قطری ماتریس وابسته به  $\hat{A}$  در یک پایه محاسبه شود:

$$\text{Tr } \hat{A} = \sum_{i=1}^N \langle\alpha_i|\hat{A}|\alpha_i\rangle = \sum_{i=1}^N A_{ii} \quad (۲۸-۳)$$

دترمینان یک عملگر نیز یک کمیت نرده‌ای است و با محاسبه دترمینان ماتریس وابسته به دست می‌آید

$$|\hat{A}| = \det \hat{A} = \begin{vmatrix} \langle\alpha_1|\hat{A}|\alpha_1\rangle & \cdots & \langle\alpha_1|\hat{A}|\alpha_N\rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle\alpha_N|\hat{A}|\alpha_1\rangle & \cdots & \langle\alpha_N|\hat{A}|\alpha_N\rangle \end{vmatrix} \quad (۲۹-۳)$$

همانطور که قبلاً" خاطرنشان کردیم ، ضرب دو عملگر عموماً" جا به جا پذیر نیست . تفاضل بین حاصل ضرب مستقیم و جا به جا شده ، جا به جاگر نامیده می شود و از نظر ریاضی به صورت

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (۳-۳۰)$$

بیان می شود . نتیجه می شود که اگر دو عملگر جا به جا پذیر باشند ، جا به جاگر آنها صفر است . در زیر خواهیم دید که جا به جاگر دو عملگر یک نقش اساسی در گسترش ریاضیاتی مکانیک کوانتومی بازی می کند .

### ۳-ویژه مقدارها و ویژه بردارها

عموماً" عمل یک عملگر روی یک بردار اندازه و جهت آنرا تغییر می دهد . در حال حاضر توجه خود را به آن گروه از بردارهایی که تحت عمل یک عملگر معین فقط بزرگی آنها تغییر می کند محدود می کنیم . این تغییر در اندازه منجر به ضرب بردار در یک عدد ثابت می شود ؛ این نکته ما را به نوشتن رابطه

$$\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle \quad (۳-۳۱)$$

هدایت می کند . شاخص پائین برای این تاکید اضافه شده است که بیش از یک بردار با این ویژگی وجود دارد . روشن خواهد شد که  $N$  بردار وجود دارد که به طور خطی از یکدیگر مستقل اند و در (۳-۳۱) صدق می کنند . بردارهای  $|a_i\rangle$  و نرده ایهای  $a_i$  به ترتیب ویژه بردارها (یا ویژه کت ها) و ویژه مقدارهای عملگر  $\hat{A}$  نامیده می شوند\*، لذا این کمیات بردارها و مقدارهای سرشتی یا خودی عملگر می باشند . مجموعه ویژه مقدارها طیف عملگر نامیده می شود . چون (۳-۳۱) اندازه های ویژه بردارها را محدود نمی کند ، مناسب است که آنها را بهنجار کنیم ، یعنی بخواهیم که

$$\langle a_i | a_i \rangle = 1$$

اگر عناصر یک عملگر در یک پایه راست هنجار معلوم باشند ، ویژه بردارها و ویژه

---

\* ویژه بردار و ویژه مقدار به ترتیب ترجمه کلمات eigenvector و eigenvalue می باشند .  
 به شوند *eigen* به معنی "خود" یا "ویژه" در زبان آلمانی است .

مقدارها می‌توانند فوراً محاسبه شوند، به عنوان مثال، نمایش ماتریسی زیر را که وابسته به عملگر هرمیتی  $\hat{A}$  در فضای دوبعدی است در نظر بگیریم

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$$

معادله ویژه مقداری  $\hat{A}|a_j\rangle = a_j|a_j\rangle$  می‌تواند در شکل ماتریسی به صورت

$$\begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_j^{(1)} \\ a_j^{(2)} \end{pmatrix} = a_j \begin{pmatrix} a_j^{(1)} \\ a_j^{(2)} \end{pmatrix} \quad (j = 1, 2) \quad (3-32)$$

بیان شود. می‌خواهیم دو مولفه هریک از ویژه بردارها همراه با ویژه مقدارهای متناظر آنها را پیدا کنیم. معادله (3-32) معادل با یک زوج معادله همگن برای مولفه‌های  $a_j^{(1)}$  و  $a_j^{(2)}$  است. جوابهای غیر بدیهی ( $a_j^{(1)} \neq 0 \neq a_j^{(2)}$ ) فقط برای آن مقادیری از  $a_j$  که ریشه‌های معادله جبری

$$\det(\hat{A} - \hat{1}a_j) = \begin{vmatrix} 0 - a_j & i \\ -i & 0 - a_j \end{vmatrix} = a_j^2 - 1 = 0$$

باشند وجود دارند. ریشه‌های این معادله،  $a_j = \pm 1$ ، ویژه مقدارهای عملگر  $\hat{A}$  را تعیین می‌کنند. با قراردادن  $a_1 = +1$  و  $a_2 = -1$ ، مولفه‌های ویژه بردارهای متناظر با  $|a_1\rangle$  و  $|a_2\rangle$  به وسیله جایگزینی مستقیم در (3-32) به دست می‌آیند. همان‌طور که قبلاً متذکر شدیم، (3-31) فقط جهت بردارها، یعنی، نسبت مولفه‌های آنها را تعیین می‌کند. این آزادی را خواهیم داشت که هر کدام از مولفه‌های (غیر صفر) را برابر با یک قرار دهیم. با به کار بردن اولین ویژه مقدار  $a_1 = +1$  در (3-32) و قراردادن  $a_1^{(1)} = 1$ ، نتیجه می‌گیریم  $a_1^{(2)} = -i$  و می‌نویسیم:

$$|a_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \quad , \quad a_1 = +1 \quad \text{برای}$$

ویژه بردار دوم به طریق مشابهی به صورت

$$|a_2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \quad , \quad a_2 = -1 \quad \text{برای}$$

به دست می‌آید. این بردارها در همان پایه‌ای که ماتریس اصلی نمایش داده شده است

نمایش داده شده‌اند. هنجار هرکدام از آنها برابر با ۲ می‌باشد به‌طوری‌که ضرب هرکدام در  $1/\sqrt{2}$  آنها را به‌نجار می‌کند. تحقیق این که دوبردار متعامداند ساده است. این نتیجه همراه با این واقعیت که ویژه‌مقدارها حقیقی هستند اتفاقی نیست بلکه، همانطوری که در زیر نشان خواهیم داد، از ویژگی هرمیتی بودن عملگر اولیه ناشی می‌شود.

مثال فوق، از این نظر که تلویحا" بیان می‌کند که قبل از این که ویژه‌مقدارهای یک عملگر بتوانند معلوم شوند، باید این عملگر در یک پایه به‌صورت ماتریس نمایش داده شود، ممکن است تا حدی گمراه‌کننده باشد. باید تاکید شود که ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارها از مشخصات عملگراند و از پایه‌ای که برای محاسبه آنها به‌کار می‌رود مستقل‌اند. در بعضی موارد که نمایش ماتریسی انجام شدنی نیست، باز هم می‌توان ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارها را بدون به‌کاربردن پایه خاصی نتیجه‌گیری کرد. این نکته، بخصوص وقتی مهم است که تعداد ابعاد فضا،  $N$ ، خیلی بزرگ باشد.

#### ۴ - جبر ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارها برای عملگرهای هرمیتی

قضیه‌هایی که در زیر مورد بحث قرار خواهند گرفت، کاملاً از هر پایه‌ای که ممکن است برای نمایش به‌کار رفته باشد مستقل‌اند. این قضایا در نظریه کوانتومی از بیشترین اهمیت برخوردارند و شایسته است که دانشجویان توجه خاصی به آنها معطوف دارند.

قضیه ۱ - تمام ویژه‌مقدارهای یک عملگر هرمیتی حقیقی‌اند.

اثبات: فرض کنیم  $\hat{A}$  هرمیتی باشد و  $|a_j\rangle$  و  $a_j$  به‌ترتیب معرف ویژه‌بردارها و ویژه‌مقدارهای آن باشند. معادله ویژه‌مقداری، در شکل کت، عبارت است از

$$\hat{A}|a_j\rangle = a_j|a_j\rangle \quad (j = 1, \dots, N) \quad (3-33)$$

و در شکل برا عبارت است از

$$\langle a_k|\hat{A}^\dagger = \langle a_k|a_k^* \quad (k = 1, \dots, N) \quad (3-34)$$

با ضرب داخلی (۳۳-۳) در  $\langle a_k|$  و (۳۴-۳) در  $|a_j\rangle$ ، و سپس کم کردن نتایج از یکدیگر، خواهیم داشت

$$\langle a_k|\hat{A}^\dagger|a_j\rangle - \langle a_k|\hat{A}|a_j\rangle = (a_k^* - a_j)\langle a_k|a_j\rangle$$

چون عملگر هرمیتی فرض شده است ( $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ )، طرف چپ صفر می‌شود و نتیجه می‌گیریم

$$(a_k^* - a_j) \langle a_k | a_j \rangle = 0 \quad (۳-۳۵)$$

با قراردادن  $k = j$  و یادآوری این نکته که هنجار یک ویژه بردار نمی‌تواند صفر باشد، خواهیم داشت

$$(a_j^* - a_j) = 0 \quad \text{یا} \quad a_j^* = a_j \quad (۳-۳۶)$$

که تنها در صورتی برقرار است که  $a_j$  حقیقی باشد.  
تعریف- اگر دو یا چند ویژه مقدار یک عملگر برابر باشند آن عملگر تبهگن است، در غیر این صورت ناتبهگن است.

قضیه ۲- ویژه بردارهای هر عملگر هرمیتی ناتبهگن متقابلاً "متعامداند".  
اثبات: با به کار بردن (۳-۳۵) و قراردادن  $k \neq j$  خواهیم داشت

$$(a_k - a_j) \langle a_k | a_j \rangle = 0$$

قبلاً ثابت شد که ویژه مقدارهای  $a_k$  حقیقی‌اند ( $a_k^* = a_k$ ). با استفاده از این فرض که  $\hat{A}$  ناتبهگن است ( $a_k \neq a_j$ ) برای  $k \neq j$  به نتیجه مورد نظر خواهیم رسید

$$\langle a_k | a_j \rangle = \delta_{kj}$$

از قرارداد بهنجار بودن ویژه بردارها در اینجا استفاده شده است. به این نتیجه می‌رسیم که ویژه بردارهای یک عملگر هرمیتی ناتبهگن یکتا هستند و یک پایه راست هنجار تشکیل می‌دهند. اگر عملگر هرمیتی تبهگن باشد، اثبات قضیه ۲ با شکست مواجه می‌شود؛ متعامد بودن دو ویژه بردار تنها در صورتی قطعی است که ویژه مقدارهای متناظر ناهم‌راست باشند. در مورد تبهگنی، تنها نیاز به در نظر گرفتن ویژه بردارهای وابسته به ویژه مقدارهای برابر (تبهگن) داریم؛ خواص سایر ویژه بردارها توسط قضیه ۲ پوشش می‌شوند.  
لم ۱- ویژه بردارهای متناظر با ویژه مقدارهای مساوی یک عملگر هرمیتی تبهگن یکتا نیستند.

اثبات- این لم را با یک تبهگنی دو تایی تصور می‌کنیم. فرض کنیم

$$\hat{A} |a_1\rangle = a_1 |a_1\rangle \quad (۳-۳۷ \text{ الف})$$

و

$$\hat{A} |a_2\rangle = a_2 |a_2\rangle \quad (۳-۳۷ \text{ ب})$$

که در آنها  $a_1 = a_2 = a$  می‌توان تحقیق کرد که ترکیبهای خطی

$$|a_1'\rangle = \alpha|a_1\rangle + \beta|a_2\rangle \quad (3-38 \text{ الف})$$

و

$$|a_2'\rangle = \gamma|a_1\rangle + \delta|a_2\rangle \quad (3-38 \text{ ب})$$

ویژه‌بردارهای جدیدی وابسته به ویژه مقدار  $a$  هستند. از جایگذاری مستقیم در (۳-۳۷) نتیجه می‌شود

$$\hat{A}|a_1'\rangle = \alpha\hat{A}|a_1\rangle + \beta\hat{A}|a_2\rangle = a(\alpha|a_1\rangle + \beta|a_2\rangle) = a|a_1'\rangle$$

با  $|a_2'\rangle$  نیز نتیجه مشابهی به دست می‌آید. با تغییر دادن  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$  ویژه‌بردارهای جدیدی وابسته به ویژه مقدار  $a$  ایجاد خواهیم کرد.

لم ۲- همه ویژه‌بردارهای وابسته به ویژه مقدارهای مساوی نیازی ندارند که متعام باشند. اثبات: این نتیجه از لم ۱ حاصل می‌شود زیرا همیشه می‌توان  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$  را طوری انتخاب کرد که داشته باشیم

$$\langle a_1'|a_2'\rangle \neq 0$$

بنابراین می‌توان  $N$  ویژه‌بردار برای یک عملگر هرمیتی تهیه کرد که به‌طور خطی از یکدیگر مستقل باشند ولی متقابلاً متعام نباشند.

لم ۳- حداقل یک مجموعه  $N$  ویژه‌بردار متعام برای هر عملگر هرمیتی تهیه وجود دارد.

اثبات- اثبات این مطلب اصولاً با روش ساختن صورت می‌گیرد. ما صرفاً "خاطر نشان می‌کنیم که اگر  $|a_1\rangle$  و  $|a_2\rangle$  در (۳-۳۷) متعام نباشند، یعنی،  $\langle a_1|a_2\rangle = c \neq 0$ ، همیشه می‌توان  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$  در (۳-۳۸) را طوری انتخاب کرد که داشته باشیم

$$\langle a_1'|a_2'\rangle = 0$$

ساختن یک مجموعه ویژه‌بردارهای راست‌هنجار، روش راست‌هنجار کردن اشمیت<sup>۳</sup> نامیده



می‌شود. نتایج قضایا و لم‌های پیشین در قضیه زیر خلاصه می‌شوند.

قضیه ۳ - هر عملگر هرمیتی دارای حداقل یک مجموعه  $N$  ویژه‌بردار راست‌هنگار است. اگر عملگر ناتبه‌گن باشد، این مجموعه یکتا است. در غیر این صورت مجموعه‌های راست‌هنگار زیادی وجود دارند. (فقط ویژه‌بردارهای وابسته به ویژه‌مقدارهای ناتبه‌گن یکتا هستند.) در مورد تبه‌گن، باید مشخص کنیم که کدام مجموعه راست‌هنگار مورد نظر ما است.

چون هر عملگر هرمیتی در یک فضای  $N$  بعدی دارای حداقل یک مجموعه  $N$  ویژه - برداری است که متقابلاً متعامداند، می‌توانیم این مجموعه را به عنوان یک پایه، که تمام بردارها و عملگرهای دیگر فضا توسط آن نمایش داده می‌شوند، به کار ببریم. پایه‌ای که از ویژه‌بردارهای راست‌هنگار عملگر  $\hat{A}$  تشکیل شده است ویژه پایه  $\hat{A}$  نامیده می‌شود. ویژه بردارها به صورت بردارهای پایه در می‌آیند و دارای شکل ماتریسی زیر هستند

$$|a_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad |a_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad |a_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \dots$$

ماتریس  $\hat{A}$  در ویژه پایه خودش عبارت است از

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & a_2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & a_3 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad a_N$$

این شکل  $\hat{A}$  اطمینان می‌دهد که رابطه  $\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$  در این پایه برقرار خواهد بود. تبدیل از یک پایه غیرمشخص به ویژه پایه  $\hat{A}$  همواره به قطری کردن ماتریس  $\hat{A}$  منتهی می‌شود. این ماتریس در ویژه پایه مربوطه‌اش فقط دارای عناصر قطری است که هر کدام از آنها یکی از ویژه‌مقدارهای  $\hat{A}$  است.

## ۵ - جابه‌جاگر و مسئله ویژه‌مقدار

ویژه پایه‌های دو عملگر هرمیتی  $\hat{A}$ ،  $\hat{B}$  را در نظر بگیریم. نشان خواهیم داد که

جهت‌های نسبی ویژه پایه‌های  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  اساساً به وسیله جابه‌جاگر این عملگرها تعیین می‌شوند. قضایای زیر در مورد عملگرهای هرمیتی این ارتباط را تأمین می‌کند.

قضیه ۴ - اگر دو عملگر دارای یک مجموعه ویژه‌بردار مشترک باشند، جابه‌جاگر آنها صفر است. یعنی، جابه‌جاپذیراند.

اثبات: فرض کنیم یک مجموعه  $N$  بردار راست هنجار، که با علامت  $|a_i, b_i\rangle$  مشخص می‌شوند، به‌طور همزمان ویژه‌بردارهای عملگرهای  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  وابسته به ویژه مقادارهای  $a_i$  و  $b_i$  باشند، یعنی،

$$\begin{aligned}\hat{A}|a_i, b_i\rangle &= a_i|a_i, b_i\rangle \\ \hat{B}|a_i, b_i\rangle &= b_i|a_i, b_i\rangle\end{aligned}\quad (3-39)$$

با اعمال  $\hat{B}$  روی معادله اول و  $\hat{A}$  روی معادله دوم و سپس کم کردن آنها از یکدیگر، خواهیم داشت

$$(\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B})|a_i, b_i\rangle = (b_i a_i - a_i b_i)|a_i, b_i\rangle = 0$$

چون طرف چپ باید برای هر ویژه‌بردار  $|a_i, b_i\rangle$  صفر باشد داریم

$$(\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B}) = [\hat{B}, \hat{A}] = 0 \quad (3-40)$$

نتیجه: اگر دو عملگر جابه‌جاپذیر نباشند نمی‌توانند یک ویژه پایه مشترک داشته باشند.

قضیه ۵ - اگر دو عملگر ناتبه‌گن جابه‌جاپذیر باشند، دارای یک مجموعه ویژه‌بردارهای مشترک خواهند بود، یعنی هر ویژه‌بردار عملگر اول ویژه بردار عملگر دوم نیز خواهد بود. اثبات: فرض کنیم معادلات ویژه مقداری  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  به ترتیب عبارت باشند از

$$\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle, \quad \hat{B}|b_i\rangle = b_i|b_i\rangle$$

و فرض کنیم

$$[\hat{A}, \hat{B}] = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) = 0$$

با تأثیر دادن  $\hat{B}$  روی طرف چپ معادله اول و استفاده از رابطه جابه‌جائی، خواهیم داشت:

$$\hat{B}\hat{A}|a_i\rangle = \hat{A}\hat{B}|a_i\rangle$$

این رابطه می‌تواند ، با استفاده از معادله ویژه‌مقداری اول به صورت

$$\hat{A}\{\hat{B}|a_i\rangle\} = \hat{B}\{\hat{A}|a_i\rangle\} = a_i\{\hat{B}|a_i\rangle\}$$

نوشته شود . از مقایسه طرف‌های چپ و راست این رابطه نتیجه می‌گیریم که بردار داخل پُرانتز باید حداقل متناسب با ویژه‌برداری بهنجار شده  $\hat{A}$  وابسته به ویژه‌مقدار  $a_i$  باشد . در نتیجه می‌نویسیم

$$\hat{B}|a_i\rangle = b_i|a_i\rangle \quad (۳-۴۱)$$

که در آن  $b_i$  به عنوان یک ضریب تناسب وارد شده است . چون هر دو عملگر ناتبه‌کن فرض شده‌اند ، (۳-۴۱) ایجاب می‌کند که  $|a_i\rangle$  یک ویژه‌برداری  $\hat{B}$  وابسته به ویژه‌مقدار  $b_i$  نیز باشد ، و قرار می‌دهیم

$$|a_i\rangle = |b_i\rangle = |a_i, b_i\rangle$$

بدین طریق ثابت کردیم که ویژه‌پایه‌های یکتای دو عملگر هرمیتی جابه‌جاپذیر ، یکسان‌اند . اگر یکی از عملگرها یا هر دو تبه‌کن باشند ، اثبات قضیه ۵ در آخرین مرحله با شکست مواجه می‌شود . در این حالت بردار  $\hat{B}|a_i\rangle$  می‌تواند یک ترکیب خطی از ویژه‌بردارهای تبه‌کن  $\hat{A}$  باشد .

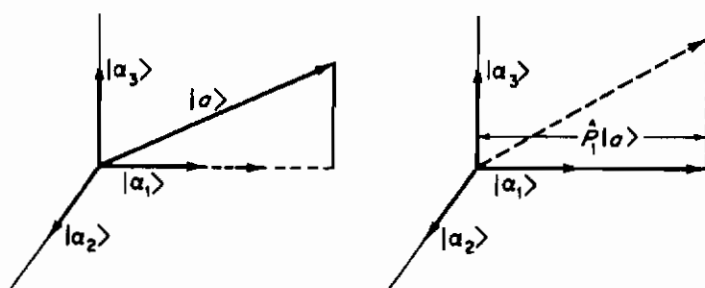
قضیه ۶ - هر دو عملگر جابه‌جاپذیر دارای حداقل یک مجموعه ویژه‌بردارهای راست هنجاراند ، حتی اگر تبه‌کن باشند .

اثبات این قضیه با روش ساختن انجام می‌گیرد و در اینجا آورده نخواهد شد . کافی است بگوئیم اگر  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  جابه‌جاپذیر و تبه‌کن باشند ، هر کدام از آنها چند ویژه‌پایه متمایز دارند و تمام ویژه‌پایه‌های  $\hat{A}$  بر ویژه‌پایه‌های  $\hat{B}$  ، منطبق نیستند . با این وجود ، اگر دو عملگر جابه‌جاپذیر باشند ، باید حداقل یک ویژه‌پایه مشترک برای آنها وجود داشته باشد . قضایای ۴ تا ۶ ایجاب می‌کنند که هر مجموعه‌ای از عملگرهای جابه‌جاپذیر حداقل در یک ویژه‌پایه مشترک‌اند . ماتریسهای این عملگرها در این پایه مشترک به‌طور همزمان قطری هستند .

## ۶ - عملگر تصویرگر

اگر هر بردار دلخواه بتواند توسط یک پایه راست هنجار معین نمایش داده شود، گوئیم

که این پایه کامل است. به عنوان مثال، بردارهای یک  $i$  و  $j$  برای نمایش بردارهای واقع در فضای سه بعدی حقیقی (ناکامل) اند؛ بردار  $k$  برای نمایش مولفه  $z$  لازم است. موجه به نظر می‌رسد که اگر برداری متعلق به یک فضای  $N$  بعدی باشد، هر مجموعه  $N$  بردار یک‌ای که متقابلاً متعامد باشند یک پایه کامل تشکیل می‌دهد، یعنی، این بردارها فضا را ایجاد می‌کنند. اما مفید خواهد بود که این ویژگی کامل بودن را به شکل ریاضی بیان کنیم. با هر بردار  $|\alpha_j\rangle$  از یک پایه راست‌هنگار، یک عملگر تصویرگر  $\hat{P}_j$  وارد می‌کنیم. تاثیر  $\hat{P}_j$  روی یک بردار دلخواه  $|a\rangle$  در فضا عبارت است از ایجاد یک بردار جدید که جهت آن در جهت بردار پایه  $|\alpha_j\rangle$  و بزرگی آن برابر با  $\langle\alpha_j|a\rangle$  باشد (شکل ۱-۳).



شکل (۱-۳)

از نظر ریاضی، عمل تصویرگر عبارت است از

$$\hat{P}_j |a\rangle = (\langle\alpha_j|a\rangle) |\alpha_j\rangle = |\alpha_j\rangle (\langle\alpha_j|a\rangle) \quad (۳-۴۲)$$

با استفاده از قانون شرکت‌پذیری، طرفهای راست و چپ به صورت زیر به هم مربوطند

$$\hat{P}_j |a\rangle = (|\alpha_j\rangle \langle\alpha_j|) |a\rangle$$

چون  $|a\rangle$  کاملاً دلخواه است، نتیجه می‌گیریم

$$\hat{P}_j = |\alpha_j\rangle \langle\alpha_j| \quad (۳-۴۳)$$

ضرب یک برا از طرف چپ در یک کت به ضرب دیادیک موسوم است و متناظر با ضرب یک ماتریس سطری، از طرف چپ، در یک ماتریس ستونی است. اگر بردار  $|\alpha_j\rangle$  در یک پایه دیگر به صورت

$$|\alpha_j\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_j^{(1)} \\ \vdots \\ \alpha_j^{(N)} \end{pmatrix} \quad \text{و} \quad \langle \alpha_j| = (\alpha_j^{*(1)} \dots \alpha_j^{*(N)})$$

بیان شود،  $\hat{P}_j$  به وسیله ماتریس هرمیتی زیر نمایش داده می‌شود

$$\hat{P}_j = |\alpha_j\rangle\langle\alpha_j| \rightarrow \begin{pmatrix} \alpha_j^{(1)} \\ \vdots \\ \alpha_j^{(N)} \end{pmatrix} (\alpha_j^{*(1)} \dots \alpha_j^{*(N)}) = \begin{pmatrix} \alpha_j^{(1)}\alpha_j^{*(1)} & \dots & \alpha_j^{(1)}\alpha_j^{*(N)} \\ \vdots & & \vdots \\ \alpha_j^{(N)}\alpha_j^{*(1)} & \dots & \alpha_j^{(N)}\alpha_j^{*(N)} \end{pmatrix} \quad (۴۴-۳)$$

توجه کنیم که وقتی  $\hat{P}_j$  روی  $|\alpha_j\rangle$  عمل کند همان بردار را ایجاد می‌کند. از طرف دیگر، چون بردارهای دیگر پایه بر  $|\alpha_j\rangle$  عموداند نتیجه عمل تصویرگر بر روی آنها صفر است. بنابراین، بردارهای پایه، ویژه بردارهای  $\hat{P}_j$  با ویژگی زیر می‌باشند

$$\hat{P}_k |\alpha_j\rangle = \delta_{kj} |\alpha_j\rangle \quad (j, k = 1, \dots, N)$$

چون این  $N$  عملگر تصویرگر دارای یک ویژه پایه مشترک  $(|\alpha_j\rangle)$  هستند، دو به دو جابه‌جا پذیراند (قضیه ۴). در این پایه تمام آنها قطری هستند و دارای شکل ماتریسی زیراند

$$\hat{P}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad \hat{P}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$\hat{P}_N = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

بالاخره یک پایه در صورتی کامل است که هر بردار دلخواهی از فضا بتواند به صورت

$$|a\rangle = \sum_{j=1}^N (\langle\alpha_j|a\rangle) |\alpha_j\rangle \quad (۴۵-۳)$$

$$= \sum_{j=1}^N |\alpha_j\rangle\langle\alpha_j|a\rangle = \sum_{j=1}^N \hat{P}_j |a\rangle$$

نمایش داده شود. چون این بسط برای هر بردار دلخواه  $|a\rangle$  معتبر است، رابطه کامل بودن (یا بستاری) خواهد شد

$$\sum_{j=1}^N \hat{P}_j = \sum_{j=1}^N |\alpha_j\rangle\langle\alpha_j| = \hat{1} \quad (۴۶-۳)$$

همیشه فرض خواهیم کرد که  $N$  ویژه بردار راست هنجار یک عملگر هرمیتی، کامل اند و در (۴۶-۳) صدق می کنند.

## ۷- اصول موضوع مکانیک کوانتومی

بعد از مرور خواص لازم عملگرها و بردارها در یک فضای خطی، اکنون می توان اساس مکانیک کوانتومی را در نمادگذاری دیراک گسترش داد.

اصل موضوع <sup>\*</sup>۱- به هر مشاهده پذیر دینامیکی (به عنوان مثال، انرژی، تکانه خطی، تکانه زاویه ای)، در یک فضای مختلط، یک عملگر هرمیتی خطی که خواص آن طبیعت کوانتومی این مشاهده پذیر را بیان می کند، نسبت می دهیم. (تعداداً بعداً فضا در همین جا مورد بحث قرار خواهد گرفت).

بنابراین، به متغیرهای دکارتی بنیادی  $r$  و  $p$  وابستگی های زیر را نسبت می دهیم

$$r \rightarrow \hat{r} = \hat{r}^\dagger, \quad p \rightarrow \hat{p} = \hat{p}^\dagger \quad (۴۷-۳)$$

به هر تابع جبری از این متغیرها تابع عملگری متناظر آنرا نسبت می دهیم. به عنوان مثال، عملگرهای وابسته به انرژی جنبشی و مولفه های تکانه زاویه ای ذره خواهند شد

$$\hat{T} = \frac{(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2)}{2m} \quad (\hat{p}_x^2 = \hat{p}_x \hat{p}_x)$$

و

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \quad \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z, \quad \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$$

---

\* اصول موضوع فهرست شده لزوماً به ترتیب اهمیت نیامده اند بلکه به ترتیبی آمده اند که گمان می رود از نظر آموزشی بهترین باشد.

توجه کنیم که هر تابع عملگری غیر جبری باید توسط سری تیلور آن تعریف شود. به عنوان مثال تابع عملگری نمائی به وسیله سری بینهایت

$$e^{\hat{M}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \hat{M}^n$$

تعریف می شود.

اصل موضوع ۲- رابطه جابه جایی بین عملگرهای وابسته به دو مشاهده پذیر کلاسیکی از گروه پواسن آن مشاهده پذیرها، با استفاده از تناظر

$$\{A, B\} \rightarrow \frac{[\hat{A}, \hat{B}]}{i\hbar} \quad (3-48)$$

به دست می آید.

در زیر خواهیم دید که این تناظر به معادلات کوانتومی حرکتی منجر خواهد شد که با معادلات به دست آمده در مکانیک کلاسیکی سازگاراند. توجه کنیم که این تناظر صریحا "ثابت پلانک، ثابت بنیادی نظریه کوانتومی، را وارد می کند. اما ارتباط بین گروه پواسن و جابه جاگر عدد موهومی  $i$  را نیز دخالت می دهد. همان طور که خواهیم دید بخش بزرگی از ریاضیات نظریه کوانتومی توابع مختلط را در بر داری.

از روابط گروه پواسن برای متغیرهای بندادی (۲-۷۷)، روابط جابه جایی بنیادی عملگرهای مکان و تکانه را به صورت زیر به دست خواهیم آورد

$$\begin{aligned} [\hat{x}_i, \hat{p}_j] &= i\hbar \delta_{ij} \\ [\hat{x}_i, \hat{x}_j] &= [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \quad (x_1 = x, \quad x_2 = y, \quad x_3 = z) \end{aligned} \quad (3-49)$$

نتیجه می شود که اگر گروه پواسن دو مشاهده پذیر صفر باشد، جابه جاگر متناظر صفر است و عملگرها جابه جا پذیراند.

اصل موضوع ۳- مقادیر کوانتومی مجاز هر مشاهده پذیر به وسیله ویژه مقدارهای عملگر متناظر با آن تعیین می شوند. هر اندازه گیری از سیستم به یکی از این مقادیر منجر خواهد شد.

به عنوان مثال، فرض کنیم عملگر  $\hat{H}$  متناظر با هامیلتونی (انرژی) سیستم باشد. هر اندازه گیری انرژی منجر به یکی از ویژه مقدارهای  $\hat{H}$ ، که آنرا  $\epsilon_i$  می نامیم، خواهد شست.

بنابراین به محض اینکه ویژگیهای عملگر  $\hat{A}$ ، وابسته به یک مشاهده پذیر، معلوم شدند، ویژه مقدارهای  $a_i$  مقادیر کوانتیده این مشاهده پذیر را تعیین می کنند. چون این ویژه مقدارها مستقیماً قابل اندازه گیری هستند، باید حقیقی باشند. طبیعت هرمیتی عملگرهای منتسب به مشاهده پذیرها حقیقی بودن این ویژه مقدارها را تضمین می کند (قضیه ۱).

اصل موضوع ۴- حالت هر سیستم فیزیکی به وسیله یک بردار حالت با طول واحد در یک فضای مختلط مشخص می شود. علاوه، اگر سیستم به وسیله یک بردار  $|\beta\rangle$  مشخص شده باشد و یک اندازه گیری از یک مشاهده پذیر  $\hat{A}$  انجام گیرد، در این صورت احتمال مشاهده سیستم با مقدار مشخصه  $a_i$  به وسیله

$$\mathcal{P}_\beta(a_i) = |\langle a_i | \beta \rangle|^2 \leq 1 \quad (\langle \beta | \beta \rangle = 1) \quad (50-3)$$

داده می شود.

اصل موضوع ۴، از این نظر که دقتی را که با آن می توانیم حالت یک سیستم مکانیکی را تشریح کنیم محدود می کند، بسیار جالب است. معادله (۵۰-۳) ایجاب می کند که جنبه احتمالاتی سیستم به وسیله جهت گیری نسبی بردار حالت نسبت به ویژه بردارهای مختلف عملگرهای متناظر با مشاهده پذیرها تعیین شود. توجه کنیم که احتمالات شامل کمیت های نرده ای (حاصل ضرب های داخلی) هستند و بنابراین از هر پایه ای که برای نمایش به کار می رود مستقل اند. با جمع بندی روی تمام مقادیر ممکن  $a_i$ ، می نویسیم

$$\begin{aligned} \sum_i \mathcal{P}_\beta(a_i) &= \sum_i |\langle a_i | \beta \rangle|^2 \\ &= \sum_i \langle \beta | a_i \rangle \langle a_i | \beta \rangle = \langle \beta | \left\{ \sum_i |a_i\rangle \langle a_i| \right\} | \beta \rangle \end{aligned}$$

با فرض اینکه ویژه پایه  $\hat{A}$  کامل است،  $\sum_i |a_i\rangle \langle a_i| = \hat{1}$ ، خواهیم داشت

$$\sum_i \mathcal{P}_\beta(a_i) = \langle \beta | \beta \rangle = 1$$

بنابراین، شرط بهنجار بودن بردار حالت  $|\beta\rangle$  منجر به بهنجار بودن احتمال می شود. یک طریقه دیگر تعبیر جنبه های احتمالاتی نظریه کوانتومی این است که فرض کنیم سیستم مورد مطالعه عملاً از بسیاری زیر سیستم های کوانتومی میکروسکوپیکی یکسان تشکیل شده است. اگر سیستم به وسیله  $|\beta\rangle$  مشخص شده باشد،



$$\mathcal{P}_\beta(a_i) = |\langle a_i | \beta \rangle|^2 \quad (۵۱-۳)$$

می‌تواند به عنوان کسری از زیر سیستمها با مقدار مشخصه  $a_i$  تعبیر شود . میانگین یا مقدار قابل انتظار چند اندازه‌گیری از یک مشاهده‌پذیر  $\hat{A}$  ، وقتی سیستم به وسیله  $|\beta\rangle$  مشخص شده باشد ، با

$$\overline{A}_\beta = \sum_i \mathcal{P}_\beta(a_i) a_i / \sum_i \mathcal{P}_\beta(a_i) \quad (۵۲-۳)$$

داده می‌شود . چون احتمال بهنجار شده فرض شده است ، مخرج برابر است با یک . توجه کنیم که این مقدار قابل انتظار ، برای  $a_i$  ی حقیقی ، یعنی برای عملگرهای هرمیتی ، همیشه حقیقی است .

بهتر است که مقدار قابل انتظار را به صورت زیر بنویسیم

$$\overline{A}_\beta = \sum_i \mathcal{P}_\beta(a_i) a_i = \sum_i (\langle \beta | a_i \rangle) (\langle a_i | \beta \rangle) a_i = \sum_i \langle \beta | a_i | a_i \rangle \langle a_i | \beta \rangle$$

اما ، چون  $\hat{A} | a_i \rangle = a_i | a_i \rangle$  ، خواهیم داشت

$$\overline{A}_\beta = \sum_i \langle \beta | \hat{A} | a_i \rangle \langle a_i | \beta \rangle = \langle \beta | \hat{A} \left( \sum_i | a_i \rangle \langle a_i | \right) | \beta \rangle$$

با فرض کامل بودن ویژه پایه  $\hat{A}$  ،  $\sum_i | a_i \rangle \langle a_i | = \hat{1}$  ، مقدار قابل انتظار در نهایت خواهد شد

$$\overline{A}_\beta = \langle \beta | \hat{A} | \beta \rangle$$

از این به بعد نمادگذاری زیر را می‌پذیریم

$$\overline{A}_\beta = \langle A \rangle_\beta = \langle \beta | \hat{A} | \beta \rangle \quad (۵۳-۳)$$

مقدار قابل انتظار یک مشاهده‌پذیر  $\hat{A}$  در حالت  $|\beta\rangle$  به وسیله ساختن " ساندویچی " از بردارهای حالت برا و کت ، که عملکرد وسط آنها قرار دارد ، به دست می‌آید . برای تشریح میزان انحراف یک اندازه‌گیری کاتوره‌ای از مقدار قابل انتظار ، عدم قطعیت یا انحراف ریشه میانگین مربعی یک اندازه‌گیری  $A$  (وقتی سیستم با  $|\beta\rangle$  مشخص شده است) را به وسیله

$$\begin{aligned}\Delta A_\beta &= [\langle \beta | (\hat{A} - \langle A \rangle_\beta)^2 | \beta \rangle]^{1/2} \\ &= [\langle \beta | \hat{A}^2 | \beta \rangle - 2\langle A \rangle_\beta \langle \beta | \hat{A} | \beta \rangle + \langle A \rangle_\beta^2]^{1/2} \quad (۵۴-۳) \\ &= [\langle A^2 \rangle_\beta - \langle A \rangle_\beta^2]^{1/2}.\end{aligned}$$

تعریف می‌کنیم . عدم قطعیت عبارت است از ریشه دوم تفاضل بین میانگین مربعی و مربع میانگین  $\hat{A}$  .

اصل موضوع ۵\* - اگر بردار حالت سیستمی بر ویژه بردار  $|a_i\rangle$  ی مربوط به عملگر  $\hat{A}$  منطبق باشد، می‌گوئیم که سیستم در ویژه حالت عملگر  $\hat{A}$  قرار دارد . احتمال اینکه یک اندازه‌گیری منجر به مقدار  $a_i$  برای مشاهده‌پذیر  $\hat{A}$  شود برابر با یک است

$$|\langle a_i | \beta \rangle|^2 = |\langle a_i | a_i \rangle|^2 = 1$$

مقدار قابل انتظار  $\hat{A}$  در یکی از ویژه حالت‌های آن ، به‌طور بدیهی ، عبارت است از

$$\langle A \rangle_i = \langle a_i | \hat{A} | a_i \rangle = a_i$$

بعلاوه چون \*\*

$$\hat{A}^2 |a_i\rangle = \hat{A} \hat{A} |a_i\rangle = a_i^2 |a_i\rangle$$

نتیجه می‌گیریم که عدم قطعیت اندازه‌گیری باید برابر باشد با

$$\langle A^2 \rangle_i - \langle A \rangle_i^2 = a_i^2 - a_i^2 = 0$$

وقتی سیستمی در یک ویژه حالت یک مشاهده‌پذیر عملگری قرار دارد ، گفته می‌شود که این مشاهده‌پذیر بندادی "کامل" معین یا دقیق است .

عدم قطعیت‌های وابسته به اندازه‌گیریهایی همزمان دو مشاهده‌پذیر  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  با جابه‌جاگر عملگرها رابطه دارد . اگر  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  جابه‌جاپذیر باشند ، از قضیه ۶ نتیجه می‌شود که دارای

\* این یک اصل موضوع جدید نیست ، بلکه اساساً از اصل موضوع ۴ نتیجه می‌شود . به‌خاطر اهمیت آن ، ما آنرا جداگانه شماره‌گذاری کرده‌ایم .

\*\* رابطه  $\hat{A}^2 |a_i\rangle = a_i^2 |a_i\rangle$  را می‌توان به‌صورت  $\hat{A}^n |a_i\rangle = a_i^n |a_i\rangle$  تعمیم داد ، با استفاده از تعریف تابع عملگری غیر جبری ، داریم  $F(\hat{A}) |a_i\rangle = F(a_i) |a_i\rangle$

حداقل یک مجموعه ویژه حالت‌های مشترک هستند. در هر کدام از این حالت‌ها  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  هر دو می‌توانند با دقت کامل، یعنی، با عدم قطعیت صفر، اندازه‌گیری شوند (اصل موضوع ۵). از طرف دیگر، اگر  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  جابه‌جاپذیر نباشند، هیچ ویژه حالت مشترکی وجود ندارد (نتیجه قضیه ۴). در نتیجه، هیچ حالت فیزیکی‌ای که در آن  $A$  و  $B$  بتوانند به‌طور همزمان با دقت کامل اندازه‌گیری شوند وجود ندارد. به این دلیل گفته می‌شود که عملگرهای جابه‌جاپذیر سازگارند. بحث فوق به وسیله قضیه زیر به‌طور ریاضی فرمولبندی می‌شود.

قضیه ۷ (اصل عدم قطعیت هایزنبرگ) - اگر سه مشاهده‌پذیر عملگری هرمیتی در رابطه جابه‌جائی

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C} \quad (3-55)$$

صدق کنند، بدون توجه به حالت سیستم،  $|\beta\rangle$ ، نتایج اندازه‌گیری‌های این مشاهده‌پذیرها باید با نامساوی هایزنبرگ، یعنی

$$\Delta A_\beta \Delta B_\beta \geq \frac{1}{2} \langle C \rangle_\beta \quad (3-56)$$

مطابقت داشته باشند.

اثبات - با استفاده از نامساوی شوارتز<sup>۴</sup>

$$\langle \gamma | \gamma \rangle \langle \delta | \delta \rangle \geq |\langle \gamma | \delta \rangle|^2, \quad \text{برای هر } |\gamma\rangle \text{ و } |\delta\rangle \quad (3-57)$$

شروع می‌کنیم. اثبات این نامساوی را می‌توان در اغلب متن‌های متعارف در مورد فضاها برداری خطی پیدا کرد (رک مسئله ۳-۶). در یک فضای سه‌بعدی حقیقی، نامساوی شوارتز به‌صورت

$$a^2 b^2 \geq (a \cdot b)^2 = a^2 b^2 \cos^2 \theta$$

در می‌آید. این نامساوی مطمئناً "در فضای حقیقی معتبر است زیرا  $\cos^2 \theta \leq 1$  برای اثبات این قضیه قرار می‌دهیم

$$\begin{aligned} |\gamma\rangle &= (\hat{A} - \langle A \rangle_\beta) |\beta\rangle \\ |\delta\rangle &= (\hat{B} - \langle B \rangle_\beta) |\beta\rangle \end{aligned}$$

بنابراین

$$\langle \gamma | \gamma \rangle = \langle \beta | (\hat{A} - \langle A \rangle_\beta) (\hat{A} - \langle A \rangle_\beta) | \beta \rangle = \langle \beta | (\hat{A} - \langle A \rangle_\beta)^2 | \beta \rangle = (\Delta A_\beta)^2$$

و

$$\langle \delta | \delta \rangle = \langle \beta | (\hat{B} - \langle B \rangle_\beta) (\hat{B} - \langle B \rangle_\beta) | \beta \rangle = \langle \beta | (\hat{B} - \langle B \rangle_\beta)^2 | \beta \rangle = (\Delta B_\beta)^2$$

با استفاده از نامساوی شوارتز نتیجه می‌گیریم

$$\begin{aligned} (\Delta A_\beta)^2 (\Delta B_\beta)^2 &= \langle \gamma | \gamma \rangle \langle \delta | \delta \rangle \\ &\geq |\langle \gamma | \delta \rangle|^2 = |\langle \beta | (\hat{A} - \langle A \rangle_\beta) (\hat{B} - \langle B \rangle_\beta) | \beta \rangle|^2 \quad (58-3) \end{aligned}$$

عملگر غیر هرمیتی  $\hat{G} = (\hat{A} - \langle A \rangle_\beta) (\hat{B} - \langle B \rangle_\beta)$  را به صورت

$$\hat{G} = \hat{D} + \frac{1}{2}i\hat{C}$$

تجزیه می‌کنیم\*، که در آن

$$\hat{D} = \frac{(\hat{A} - \langle A \rangle_\beta)(\hat{B} - \langle B \rangle_\beta) + (\hat{B} - \langle B \rangle_\beta)(\hat{A} - \langle A \rangle_\beta)}{2}$$

و

$$\hat{C} = \frac{(\hat{A} - \langle A \rangle_\beta)(\hat{B} - \langle B \rangle_\beta) - (\hat{B} - \langle B \rangle_\beta)(\hat{A} - \langle A \rangle_\beta)}{i} = \frac{[\hat{A}, \hat{B}]}{i}$$

عملگرهای  $\hat{D}$  و  $\hat{C}$  هر دو هرمیتی‌اند. چون  $\langle D \rangle_\beta$  و  $\langle C \rangle_\beta$  هر دو حقیقی‌اند، (58-3) به صورت

$$\begin{aligned} (\Delta A_\beta)^2 (\Delta B_\beta)^2 &\geq |\langle G \rangle_\beta|^2 = |\langle D \rangle_\beta + \frac{1}{2}i\langle C \rangle_\beta|^2 \\ &= \langle D \rangle_\beta^2 + \frac{1}{4}\langle C \rangle_\beta^2 \geq \frac{1}{4}\langle C \rangle_\beta^2 \end{aligned}$$

یا، بالاخره، به صورت

\* حاصلضرب دو عملگر هرمیتی یک عملگر غیر هرمیتی است مگر اینکه دو عملگر جابه‌جایپذیر باشند

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = (\hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger) = (\hat{B}\hat{A}) \neq (\hat{A}\hat{B})$$

$$\Delta A_\beta \Delta B_\beta \geq \frac{1}{2} \langle C \rangle_\beta \quad (3-59)$$

در می‌آید .

اصل هایزنبرگ مقدار حاصل ضرب  $\Delta A \Delta B$  در یک حالت را معلوم نمی‌کند ، بلکه حد پائینی این حاصل ضرب را برابر با  $\frac{1}{4} \langle C \rangle$  به دست می‌دهد . اگر دو عملگر جابه‌جاپذیر باشند ( $\hat{C} = 0$ ) ، حد پائینی حاصل ضرب عدم قطعیت‌های وابسته به اندازه‌گیریهای  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  صفر است . این نتیجه با بحث فوق سازگار است .  
از روابط جابه‌جایی بنیادی

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij} \hat{1}$$

و

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$$

نتیجه می‌گیریم که  $\Delta x_i \Delta x_j \geq 0$  ،  $\Delta p_i \Delta p_j \geq 0$  و  $\Delta x_i \Delta p_j \geq \frac{1}{2} \hbar \delta_{ij}$  . بنابراین ، به‌عنوان مثال ، عملگرهای  $\hat{x}$  و  $\hat{p}_x$  کاملاً "ناسازگاراند" و حالتی وجود ندارد که در آن حاصل ضربهای عدم قطعیت‌های آنها کمتر از  $\frac{1}{2} \hbar$  باشد . این نکته ایجاب می‌کند که اگر تکرانه یک ذره را دقیقاً بدانیم ، قادر نخواهیم بود با هیچ دقتی موضع آن را تعیین کنیم .

اگر سیستم در یک حالتی که به‌وسیله  $|\beta\rangle$  مشخص شده‌است قرار داشته‌باشد ، ویژگیهای دینامیکی آن به‌طور احتمالاتی تعیین خواهند شد . فرض کنیم  $M$  سیستم اتمی یکسان داریم که همه در حالت  $|\beta\rangle$  قرار دارند . هم‌چنین فرض کنیم آشکارسازی داریم که مشاهده‌پذیر  $\hat{A}$  را اندازه‌گیری می‌کند . وقتی "سنج"  $A$  به‌اولین سیستم اعمال شود ، احتمال اینکه مقدار  $a_i$  را بخواند عبارت است از  $|\langle a_i | \beta \rangle|^2$  ، اما ، وقتی اندازه‌گیری انجام شد و آشکار ساز  $a_i$  را ثبت کرد ، در این صورت بعد از اندازه‌گیری ، می‌دانیم که اولین سیستم اتمی دارای مقدار معین  $a_i$  است . در نتیجه ، تاثیر اندازه‌گیری ، بعد از اینکه ثبت  $a_i$  انجام شد ، عبارت است از وادار کردن سیستم به انتقال از حالت اولیه آن  $|\beta\rangle$  به حالت جدید  $|a_i\rangle$  . به‌طور معادل ، تاثیر یک اندازه‌گیری واقعی  $\hat{A}$  عبارت است از انتقال اجباری سیستم به یک ویژه حالت  $\hat{A}$  که متناظر با مقدار خوانده شده است . بدین طریق ، یک دستگاه اندازه‌گیری مثل یک صافی عمل می‌کند و بردار حالت را روی ویژه حالت وابسته به مشاهده‌پذیر اندازه‌گیری شده تصویر می‌کند . ذهن دانشجو ممکن است با این واقعیت که وقتی اندازه‌گیری انجام می‌شود حالت سیستم به هم می‌خورد ، مغشوش شود . خوشبختانه این مسئله فقط آموزشی است

زیرا فرض کرده‌ایم که حالت اتمی تکرارپذیر است، یعنی  $M - 1$  سیستم اتمی دیگر داریم که درست مثل آن هستند. درحالی‌که حالت تعدادی از سیستم‌ها ممکن است در اثر اندازه‌گیری به هم خورده باشد، اطلاعات به دست آمده به آن سیستم‌هایی که هنوز اندازه‌گیری نشده‌اند قابل اعمال است\*.

## ۸- دینامیک کوانتومی

جهت بردار حالت در هر لحظه طبیعت آماری سیستم فیزیکی را تعیین می‌کند. وقتی این بردار در فضای مختلط می‌چرخد، مشخصه‌های فیزیکی سیستم با زمان تغییر می‌کنند. برای پیدا کردن معادله حرکت بردار حالت، که آنرا به صورت  $|\beta, t\rangle$  می‌نویسیم، نخست باید یک تناظر دینامیکی با مکانیک کلاسیکی برقرار کنیم. بنابراین، خواهیم خواست که تناظری بین مقدار قابل انتظار یک مشاهده‌پذیر کوانتومی و تابع کلاسیکی متناظر با آن وجود داشته باشد، یعنی،

$$\langle \beta, t | \hat{A} | \beta, t \rangle = \langle A(t) \rangle_{\beta} \leftrightarrow A_{\text{class}}(t) \quad (3-60)$$

به‌طور معادل، انتظار داریم که معادله حرکت  $\langle A(t) \rangle_{\beta}$ ، که در اثر چرخش  $|\beta, t\rangle$  ایجاد شده‌است، شبیه به معادله حرکت تابع کلاسیکی  $A_{\text{class}}(t)$  باشد. این شرط به قضیه اهرنفرست موسوم است. بنابراین، با قیاس با شکل کلاسیکی معادله حرکت (۲-۷۶)، معادله حرکت برای مقدار قابل انتظار یک عملگر را به صورت زیر وضع می‌کنیم

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle A(t) \rangle_{\beta} &= \frac{d}{dt} \langle \beta, t | \hat{A} | \beta, t \rangle \\ &= \langle \beta, t | \frac{[\hat{A}, \hat{\mathcal{H}}]}{i\hbar} | \beta, t \rangle + \langle \beta, t | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \beta, t \rangle \end{aligned} \quad (3-61)$$

\* برای یک بررسی مقدماتی بسیار جالب از فرایند اندازه‌گیری به کتاب زیر مراجعه کنید.

R.P. Feynman, R.B. Leighton and M. Sands, "The Feynman Lectures on physics", Vol.3, Chapters 1 and 2. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1964.

بستگی زمانی  $\langle A(t) \rangle_\beta$  از بستگی ضمنی، یعنی، تغییرات  $|\beta, t\rangle$  و هم چنین احیاناً "از بستگی صریح در خود عملگر، نشأت می‌گیرد. ما فقط در موارد نادری عملگرهایی با بستگی صریح به زمان در نظر خواهیم گرفت. برای تضمین (۳-۶۱)، اصل موضوع زیر را ارائه می‌دهیم.

اصل موضوع ۶- حرکت بردار حالت یک سیستم فیزیکی به وسیله معادله حرکت شرودینگر که، در شکل کت، عبارت است از

$$\mathcal{H} |\beta, t\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\beta, t\rangle \quad (۳-۶۲)$$

یا، در شکل برا، عبارت است از

$$\langle \beta, t | \mathcal{H} = -i\hbar \frac{d}{dt} \langle \beta, t | \quad (\mathcal{H} = \mathcal{H}^\dagger)$$

تعیین می‌شود که در آن  $\mathcal{H}$  عملگرهایمیلتونی سیستم است. برای تحقیق اینکه معادله حرکت شرودینگر واقعاً به (۳-۶۱) منجر می‌شود، مشتق گرفته و نتیجه می‌گیریم

$$\frac{d}{dt} \langle \beta, t | \hat{A} | \beta, t \rangle = \langle \beta, t | \hat{A} \left| \frac{d}{dt} |\beta, t\rangle \right\rangle + \left\langle \frac{d}{dt} \langle \beta, t | \right| \hat{A} | \beta, t \rangle + \langle \beta, t | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \beta, t \rangle$$

جمله آخری از بستگی صریح عملگر  $\hat{A}$  به زمان سرچشمه می‌گیرد. با به کارگرفتن شکلهای کت و برای معادله شرودینگر، خواهیم داشت

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \beta, t | \hat{A} | \beta, t \rangle &= \langle \beta, t | \hat{A} \left\{ \frac{1}{i\hbar} \mathcal{H} | \beta, t \rangle \right\} \\ &+ \left\{ -\frac{1}{i\hbar} \langle \beta, t | \mathcal{H} \right\} \hat{A} | \beta, t \rangle + \langle \beta, t | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \beta, t \rangle \end{aligned}$$

یا

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle_\beta = \left\langle \frac{[\hat{A}, \mathcal{H}]}{i\hbar} \right\rangle_\beta + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle_\beta \quad (۳-۶۳)$$

که همان چیزی است که می‌خواستیم.

باید تاکید شود که "تصویر" شرودینگر که در آن بردار حالت می‌چرخد (تحول می‌یابد م.) تنها یکی از چندطریقی است که با آن‌ها (۳-۶۳) حاصل می‌شود. هم چنین ممکن است تصویری

داشته باشیم که در آن بردار حالت مانا بماند و اجازه دهد که ویژه بردارهای  $\hat{A}$  (هم چنین خود  $\hat{A}$ ) طوری تغییرکنند که مقادیر قابل انتظار مطابق با (۶۳-۳) تغییر کنند. این نمایش حرکت کوانتومی به تصویرهای زنجبرگ مشهور است. در یک تصویر سوم، تصویر برهمکنشی، هم بردارهای حالت و هم ویژه بردارهای  $\hat{A}$  به طریقی حرکت می کنند که (۶۳-۳) را محفوظ نگاه می دارند (به پیوست ب مراجعه کنید). ما کلاً "در" تصویر شرودینگر کار خواهیم کرد. به عنوان یک نتیجه از (۶۳-۳) توجه کنیم که اگر یک عملگر  $\hat{A}$  به طور صریح به زمان بستگی نداشته باشد (یعنی،  $\partial \hat{A} / \partial t = 0$ ) مقدار قابل انتظار آن در صورتی ثابت خواهد بود که با هامیلتونی جابه جاپذیر باشد، یعنی، داشته باشیم  $[\hat{A}, \mathcal{H}] = 0$  جواب معادله شرودینگر (۶۲-۳) می تواند به طور صریح به صورت

$$|\beta, t\rangle = \left[ \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(t - t_0)\right) \right] |\beta, t_0\rangle \quad (64-3)$$

نوشته شود به شرط این که  $\mathcal{H}$  مستقل از زمان باشد. کت  $|\beta, t_0\rangle$  بیانگر حالت اولیه سیستم در  $t = t_0$  است. برای تحقیق این جواب، از هر دو طرف نسبت به زمان مشتق می گیریم و خواهیم داشت

$$\frac{d}{dt} |\beta, t\rangle = \left[ -\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(t - t_0)\right) \right] |\beta, t_0\rangle$$

با استفاده از (۶۴-۳)، معادله فوق خواهد شد

$$\frac{d}{dt} |\beta, t\rangle = -\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} |\beta, t\rangle$$

که همان معادله حرکت خواسته شده است.

تحول زمانی در (۶۴-۳) را می توان به صورت زیر نوشت

$$|\beta, t\rangle = U(t, t_0) |\beta, t_0\rangle$$

که در آن عملگر تحول عبارت است از

$$U(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(t - t_0)\right) \quad (65-3)$$



در موردی که  $\mathcal{H}$  به زمان بستگی داشته باشد عملگر تحول نمی‌تواند به صورت (۶۵-۳) نوشته شود. می‌توان نشان داد که عملگر تحول در معادله انتگرالی زیر صدق می‌کند

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t \mathcal{H}(\tau_1) \hat{U}(\tau_1, t_0) d\tau_1 \quad (۶۶-۳)$$

می‌توان "مستقیماً" ثابت کرد که وقتی  $\mathcal{H}$  مستقل از زمان باشد، (۶۵-۳) در (۶۶-۳) صدق می‌کند.

اصول موضوع و قضایای فوق را با یک مثال ساده ولی فرضی مصور می‌کنیم. دو مشاهده پذیر واپسته به یک ذره را به ترتیب عملگر  $S$  و عملگر  $I$  در نظر بگیریم. فرض کنیم که مقادیر مشخصه  $S$  عبارت باشند از  $s_1$  و  $s_2$ . هم چنین فرض کنیم دو حالت مشخصه  $I$  عبارت باشند از  $I_1$  و  $I_2$ . سپس فرض کنیم که این عملگرها در ویژه پایه  $S$  شکلهای زیر را به خود بگیرند

$$S = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{و} \quad I = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

چون در ویژه پایه  $S$  کار می‌کنیم ( $S$  قطری است)، ویژه بردارها و ویژه مقدارهای آن عبارت‌اند از

$$|s_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad , \quad s_1 = 0 \quad \text{برای}$$

و

$$|s_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad , \quad s_2 = 1 \quad \text{برای}$$

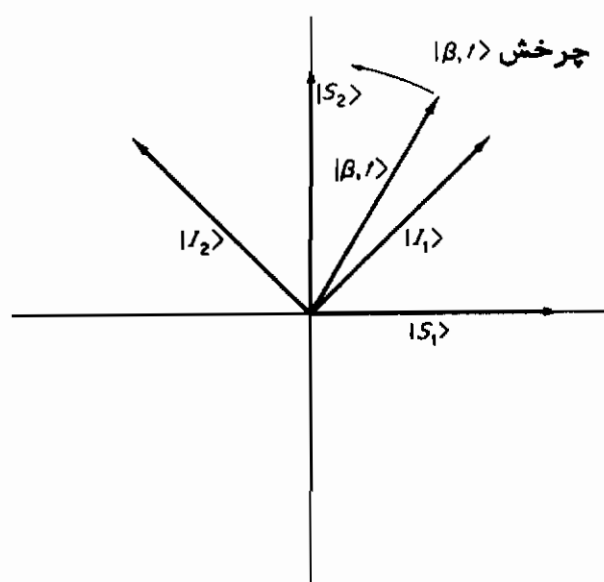
ویژه بردارهای  $I$  می‌توانند مستقیماً به صورت زیر به دست آیند

$$|I_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad , \quad I_1 = 0 \quad \text{برای}$$

و

$$|I_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad , \quad I_2 = 1 \quad \text{برای}$$

توجه کنیم که ویژه پایه‌های این دو عملگر هرمیتی نا تبهگن متعایزند (شکل ۳-۲). این مطلب می‌تواند از این واقعیت که ماتریسهای وابسته به  $\hat{I}$  و  $\hat{S}$  جابه‌جاپذیر نیستند پیش‌بینی شود. در نتیجه، این دو عملگر ناسازگاراند و حالتی وجود ندارد که در آن هر دو به‌طور همزمان با دقت کامل تعیین شوند.



شکل (۳-۲)

فرض کنیم که در یک لحظه بردار حالت  $|\beta, t\rangle$  به‌وسیله

$$|\beta, t\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} \end{pmatrix}$$

داده شده باشد. احتمالهای مشاهده سیستم در حالت‌های مختلف عبارتند از

$$\mathcal{P}_\beta(s_1) = |\langle s_1 | \beta, t \rangle|^2 = \left[ (1, 0) \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} \end{pmatrix} \right]^2 = \left( \frac{1}{2} \right)^2 = \frac{1}{4}$$

$$\mathcal{P}_\beta(s_2) = |\langle s_2 | \beta, t \rangle|^2 = \left[ (0, 1) \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} \end{pmatrix} \right]^2 = \left( \frac{1}{2}\sqrt{3} \right)^2 = \frac{3}{4}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_\beta(I_1) &= |\langle I_1 | \beta, t \rangle|^2 = \left[ \left( \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} \end{pmatrix} \right]^2 = \frac{1}{4} (1 + \sqrt{3})^2 \\ &= \frac{1}{4} (4 + 2\sqrt{3}) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{3} = 0.933 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{P}(I_2) &= |\langle I_2 | \beta, t \rangle|^2 = \left[ \left( -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} \end{pmatrix} \right]^2 = \frac{1}{8}(-1 + \sqrt{3})^2 \\ &= \frac{1}{8}(4 - 2\sqrt{3}) = \frac{1}{2} - \frac{1}{4}\sqrt{3} = 0.067.\end{aligned}$$

مقادیر قابل انتظار هر کدام از مشاهده‌پذیرها در این حالت عبارتند از

$$\langle \beta, t | \hat{S} | \beta, t \rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\sqrt{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} \end{pmatrix} = \frac{3}{4}$$

و

$$\langle \beta, t | \hat{I} | \beta, t \rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\sqrt{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} \end{pmatrix} = 0.067$$

این مقادیر قابل انتظار می‌توانند به‌عنوان نمایش‌دهنده مقادیر متوسط  $\hat{S}$  و  $\hat{I}$  تعبیر شوند. به تدریج که بردار حالت با زمان متحول می‌شود (می‌چرخد)، احتمالات و مقادیر قابل انتظار وابسته به  $\hat{S}$  و  $\hat{I}$  تغییر می‌کنند و اثرات حرکت کوانتومی را به دست می‌دهند. اگر  $\hat{S}$  و  $\hat{I}$  حقیقتاً متغیرهای بنیادی بودند، می‌توانستیم هامیلتونی و عملگرهای تحول سیستم را بسازیم و تحول حالت را پیشگویی کنیم.

## ۹ - حالت‌های مانا

اگر در  $t = t_0 = 0$  سیستم به وسیله یک بردار حالت  $|\beta, 0\rangle = |\beta, t_0\rangle$  مشخص شده باشد تحول بعدی آن با استفاده از عمل

$$|\beta, t\rangle = U(t, 0)|\beta, 0\rangle \quad (۶۷-۳)$$

به دست می‌آید که در آن  $U$  به وسیله رابطه

$$U(t, 0) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$

به هامیلتونی سیستم مرتبط می‌شود. فرض کنیم حالت اولیه در واقع یک ویژه حالت هامیلتونی که آنرا با  $|\beta, 0\rangle = |\varepsilon_i\rangle$  نمایش می‌دهیم، بوده باشد. در چنین حالتی انرژی دقیقاً "برابر با ویژه مقدار متناظر  $\varepsilon_i$  خواهد بود. با استفاده از (۶۷-۳) حالت را در زمان‌های بعد به صورت

$$|\beta, t\rangle = e^{-i\mathcal{H}t/\hbar}|\varepsilon_i\rangle$$

پیدا می‌کنیم. اما اگر  $|\varepsilon_i\rangle$  یک ویژه‌بردار  $\mathcal{H}$  با ویژه مقدار  $\varepsilon_i$  باشد، باید ویژه‌بردار  $e^{-i\mathcal{H}t/\hbar}$  با ویژه مقدار  $e^{-i\varepsilon_i t/\hbar}$  نیز باشد. تحول حالت خواهد شد

$$|\beta, t\rangle = e^{-i\omega_i t}|\varepsilon_i\rangle \quad (\omega_i = \varepsilon_i/\hbar)$$

ضریب نوسانی یک کمیت نرده‌ای مختلط با قدر مطلق یک است و تاثیری روی جهت بردار حالت اولیه ندارد. هم‌چنین توجه کنیم که

$$\begin{aligned}\langle\beta, t|\beta, t\rangle &= \langle\varepsilon_i|e^{i\varepsilon_i t/\hbar}e^{-i\varepsilon_i t/\hbar}|\varepsilon_i\rangle \\ &= \langle\varepsilon_i|\varepsilon_i\rangle = 1\end{aligned}$$

بنابراین هنجار حالت نیز برابر با یک باقی می‌ماند. حالت  $|\beta, t\rangle$  از نظر فیزیکی معادل با  $|\varepsilon_i\rangle$  است و اهدا "تحولی صورت نمی‌گیرد. در نتیجه به قاعده زیر هدایت خواهیم شد. قاعده: اگر سیستمی در آغاز در یک ویژه حالت هامیلتونی (انرژی) باشد، تا ابد در این حالت باقی خواهد ماند و تمام مقادیر قابل انتظار مشاهده‌پذیرها مانا خواهند بود. این قاعده توضیح می‌دهد چرا الکترون هیدروژنی در یکی از مدارهای بوه‌ر تا ابد مانا می‌ماند مگر اینکه یک عامل خارجی (به عنوان مثال، یک میدان الکترومغناطیسی) روی آن اثر کند. پراهمیت هامیلتونی و ویژه حالت‌های انرژی آن هرچه تاکید کنیم کم است. هامیلتونی تحول تمام حالت‌ها را تعیین می‌کند و به عنوان مولد جابه‌جایی در زمان نامیده می‌شود. ویژه حالت‌های آن ضمن اینکه حالت‌های انرژی مشخصه‌اند مانا نیز هستند.

### ۱۰- ابعاد "فضای کوانتومی"

قضایا و اصول موضوع فوق بدون اشاره به  $N$ ، تعداد ابعاد فضا، برقرار شدند. اکنون سه دلیل ارائه می‌کنیم که پیشنهاد می‌کنند تعداد این ابعاد باید بینهایت باشد. نخست، رابطه جابه‌جایی بنیادی

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \hat{1} \quad (۶۸-۳)$$

را در نظر بگیریم. به سادگی می‌توان ثابت کرد که در یک فضای محدود بعدی، رد حاصل ضرب هردو عملگری مستقل از ترتیب ضرب آنهاست. لذا نتیجه می‌شود که برای

هر دو عملگری باید داشته باشیم

$$\text{Tr } \hat{A}\hat{B} - \text{Tr } \hat{B}\hat{A} = \text{Tr}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) = \text{Tr}[\hat{A}, \hat{B}] = 0$$

اما رد عملگر همانی  $\hat{I}$  لزوماً عبارت است از

$$\text{Tr } \hat{I} = N \neq 0$$

با گرفتن رد دو طرف (۳-۶۸) به یک ناسازگاری خواهیم رسید که فقط در یک فضای بینهایت بعدی حل خواهد شد\*.

ثانیاً، تعداد مقادیر مشخصه یک مشاهده پذیر باید با تعداد ویژه مقدارهای متمایز، که به نوبه خود نمی تواند بیشتر از تعداد ابعاد فضائی باشد که عملگر در آن نمایش داده می شود، برابر باشد. اما تعداد مقادیر مشاهده شده یک مشاهده پذیر کلاسیکی عموماً<sup>۵</sup> بینهایت است. به عنوان مثال، انرژیهای مشخصه ای که توسط پلانک برای نوسانگر یک بعدی حدس زده شد عبارتند از

$$\epsilon_n = nh\nu$$

که در آن  $n$  عدد صحیحی است که از صفر تا بینهایت را می تواند اختیار کند. بنابراین، نمایش هامیلتونی نوسانگر، یک فضای بینهایت بعدی را طلب میکند. هنوز یک دلیل سوم، و شاید مهمتری، برای لزوم یک فضای بینهایت بعدی وجود دارد. حالت های مشخصه مکان را که با معادله

$$\hat{p}|\mathbf{r}_i\rangle = \mathbf{r}_i|\mathbf{r}_i\rangle \quad (۳-۶۹)$$

تعیین می شوند در نظر بگیریم. حرکت  $|\mathbf{r}_i\rangle$  حالتی را نمایش می دهد که در آن ذره به طور مشخص در نقطه  $\mathbf{r}_i$ ، یعنی،  $(x_i, y_i, z_i)$ ، در فضا قرار دارد. وقتی سیستم در یکی از این ویژه حالتها باشد عدم قطعیت ناظر بر مکان صفر است. از اصل عدم قطعیت نتیجه می شود که مشخصه های تکانه ای در این حالتها کاملاً نامعین هستند. لیکن، مشخصه بودن تمام نقاط در فضا، یعنی اینکه اندازه گیری دقیق مکان ذره در هر جا امکان پذیر است یک واقعیت عینی است

---

\* فضای بینهایت بعدی با ویژگیهایی که در بالا توصیف شد از نظر ریاضی به فضای برداری هیلبرت<sup>۵</sup> موسوم است.

به بیان دیگر، مکان کوانتیده نیست. معنی این مطلب این نیست که (۶۹-۳) معتبر نیست بلکه این است که طیف  $\hat{p}$  به جای گسسته بودن (شمارش پذیر بودن) پیوسته است\*. برای نشان دادن پیوستگی طیف در (۶۹-۳) شاخص را حذف کرده و می نویسیم

$$\hat{p}|\mathbf{r}\rangle = \mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle \quad (70-3)$$

چون  $\hat{p}$  و  $\hat{p}$  به طور متقارن در روابط جابه جایی بنیادی ظاهر می شوند، پیوستگی طیف تگانه خطی تعجب آور نخواهد بود و می توان نوشت

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle \quad (71-3)$$

در هر ویژه حالت  $\hat{p}$ ، ذره دقیقاً با سرعت  $v = p/m$  حرکت می کند، اما، البته، مکان آن مبهم است. یک فضای محدود بعدی نمی تواند برای نمایش عملگرهایی که دارای طیف پیوسته هستند به کار رود.

دانشجو در این مرحله باید قادر باشد بردارهای گسسته در یک فضای بینهایت بعدی را، با میل دادن  $N$  به سمت بینهایت،  $N \rightarrow \infty$ ، از نظر مفهوم تصور کند. در یک ویژه پایه گسسته عملگرها به صورت ماتریسهایی با بینهایت ستون و بینهایت سطر در می آیند. بردارهای کت به صورت ماتریس ستونی بینهایت در می آیند، یعنی، دارای بینهایت مولفه اند. ولی، نمایش یک بردار یا یک عملگر در یک ویژه پایه پیوسته نمی تواند مثل یک ماتریس عادی ارائه شود. بنابراین باید به یک چارچوب ریاضیاتی مطلق تکیه کنیم.

راست هنجار بودن دو ویژه بردار پیوسته عملگر  $\hat{p}$  به صورت

$$\langle \mathbf{r}_i | \mathbf{r}_j \rangle = \delta_{ij} \rightarrow \langle \mathbf{r}' | \mathbf{r} \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (72-3)$$

نوشته خواهد شد. تابع دلتای دیراک (۷۲-۳) تعمیم مستقیمی از دلتای کرونکر می باشد و دارای ویژگیهای زیر است

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \infty \quad , \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}' \quad \text{برای} \quad (\text{الف})$$

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = 0 \quad , \quad \mathbf{r} \neq \mathbf{r}' \quad \text{برای} \quad (\text{ب})$$

$$\int \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' = 1 = \text{سطح زیر منحنی} \quad (\text{ج})$$

\* ویژه بردارهای متعلق به طیف پیوسته دارای هنجار محدود نمی باشند و لذا به معنی متداول قابل بهنجار کردن نیستند. به طور دقیقتر، این بردارها جزئی از یک فضای هیلبرت نیستند.

$$\int f(r') \delta(r - r') dr' = f(r) \quad (د)$$

ناحیه انتگرال‌گیری تمام‌فضا را می‌پوشاند. ویژگی آخر به نام ویژگی "غربالی" نامیده می‌شود و بارها مورد استفاده قرار خواهد گرفت. به عنوان تمرینی که تابع دلتا را در برداشته‌باشد، به مسئله (۳-۱۰) مراجعه کنید.

### ۱۱- نمایش مختصه‌ای\*

بسط یک بردار در ویژه پایه پیوسته  $\hat{p}$  با به کارگرفتن

$$|\beta, t\rangle = \sum_i \langle r_i | \beta, t \rangle |r_i\rangle \rightarrow \int dr \langle r | \beta, t \rangle |r\rangle \quad (۳-۷۳)$$

انجام می‌گیرد. این یک تعمیم مستقیم (۳-۴۵) است که در آن به جای جمع انتگرال جایگزین شده است. چون ویژه مقدار  $\hat{p}$  متغیر پیوسته‌ای است، ضریب موجود در (۳-۷۳)، یعنی،

$$\Psi_\beta(r, t) = \langle r | \beta, t \rangle$$

می‌تواند به عنوان یک تابع پیوسته در نظر گرفته شود. با تعمیم اصل موضوع ۴، کمیت

$$|\langle r | \beta, t \rangle|^2 dr = |\Psi_\beta|^2 dr \quad (۳-۷۴)$$

احتمال این را که سیستم در یک حجم دیفرانسیلی  $dr$  فضا حول نقطه  $r$  یافت شود، بیان می‌کند. کمیت  $\mathcal{P}_\beta = |\Psi_\beta|^2$  عبارت است از چگالی احتمال یافتن ذره در نقطه  $r$  و در زمان  $t$ ، وقتی که سیستم به وسیله  $|\beta, t\rangle$  مشخص شده باشد. همان‌طور که در زیر خواهیم دید  $\Psi_\beta(r, t)$  تابع حالت سیستم نامیده می‌شود و حاوی تمام اطلاعات دینامیکی مربوط به سیستم در ویژه پایه  $\hat{p}$  است.

رابطه کامل‌بودن برای ویژه بردارهای  $\hat{p}$  به صورت

$$\sum_i |r_i\rangle \langle r_i| = \hat{1} \rightarrow \int dr |r\rangle \langle r| = \hat{1} \quad (۳-۷۵)$$

---

\* در نمایش تگانه‌ای، بردارها در ویژه پایه پیوسته عملگر  $\hat{p}$  بسط داده می‌شوند. به مسئله ۵-۱ مراجعه کنید.

نوشته می‌شود. همیشه فرض خواهیم کرد که  $\beta$  ناتبهن است و در نتیجه ویژه پایه  $\beta$  راست هنجار و یکتا است\*.

کار با ویژه پایه پیوسته عملگر  $\beta$  (نمایش مختصای) دارای یک مزیت برجسته است. در یک پایه گسسته  $|a_i\rangle$ ، یک بردار حالت دلخواه  $|\beta, t\rangle$  به وسیله یک مجموعه بینهایت از مولفه‌ها، یعنی

$$\beta^{(a_i)} = \langle a_i | \beta, t \rangle$$

مشخص می‌شود. از طرف دیگر، در نمایش مختصای یک بردار حالت تنها به وسیله یک تابع حالت پیوسته

$$\Psi_\beta(r, t) = \langle r | \beta, t \rangle$$

به طور کامل مشخص می‌شود. در مطالعه یک ذره، نمایش مختصای محتملاً خیلی مفیدتر است. مع ذلک، باید تاکید شود که این نمایش فقط وقتی امکان پذیر است که  $\beta$  یک مشاهده پذیر باشد.

در نمایش مختصای، هر بردار می‌تواند به صورت

$$|\beta\rangle = \int \Psi_\beta(r) |r\rangle dr \quad (۳-۷۶ \text{ الف})$$

یا، به شکل برا، به صورت

$$\langle\beta| = \int \Psi_\beta^*(r) \langle r| dr \quad (۳-۷۶ \text{ ب})$$

نمایش داده شود. حاصل ضرب داخلی دوبردار در نمایش مختصای خواهد شد

$$\begin{aligned} \langle\alpha|\beta\rangle &= \left\{ \int \langle r' | \Psi_\alpha^*(r') dr' \right\} \left\{ \int \Psi_\beta(r) |r\rangle dr \right\} \\ &= \iint dr dr' \Psi_\alpha^*(r') \Psi_\beta(r) \langle r' | r \rangle \end{aligned}$$

با استفاده از راست هنجار بودن ویژه پایه  $\beta$  (یعنی  $\langle r' | r \rangle = \delta(r - r')$ ) و ویژگی غربالی

\* کامل بودن ویژه پایه  $\beta$  هم چنین برای بسط حالت‌های دلخواهی که شامل خصوصیات فضائی ذره هستند، در نظر گرفته می‌شود.



تابع دلتا، خواهیم داشت

$$\langle \alpha | \beta \rangle = \int \Psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}) \Psi_{\beta}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (3-77)$$

قاعده - حاصل ضرب داخلی دوبردار حالت می تواند با انتگرال گیری از حاصل ضرب تابع حالت های آنها در نمایش مختصای محاسبه شود .

تابع وابسته به یک ویژه بردار  $|a_i\rangle$  از یک عملگر  $\hat{A}$ ، ویژه تابع  $\hat{A}$  نامیده می شود و به صورت

$$\psi_{a_i}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | a_i \rangle \quad (3-78)$$

نوشته می شود . این ویژه تابع یک ویژه حالت  $\hat{A}$  را مشخص می کند . بنابراین ، به جای پیدا کردن ویژه بردارهای مشاهده پذیرها ، کافی است ویژه تابعهای وابسته به حالت های مشخصه متناظر را پیدا کنیم .

پیدا کردن ویژه تابعهای یک عملگر ساده تر از پیدا کردن ویژه بردارهای مجرد آن است زیرا در حالی که ویژه بردارها در یک معادله ویژه مقداری برداری بینهایت بعدی صدق می کنند ، ویژه تابعها ، همان طور که نشان خواهیم داد ، در یک معادله دیفرانسیل صدق می کنند . نمایش مکانیک کوانتومی در ویژه پایه  $\phi$  مکانیک موجی نیز نامیده می شود و نخستین بار توسط شرودینگر توسعه داده شد . بعداً " فرمول بندی ریاضی نظریه کوانتومی را به زبان دیفرانسیلی مکانیک موجی بسط می دهیم . تمام کمیت های فیزیکی ، یعنی ، حاصل - ضرب های داخلی ، احتمالات ، مقادیر قابل انتظار ، عدم قطعیت ها و غیره ، بدون توجه به نوع نمایش ، دست نخورده می مانند . هر وقت ممکن باشد روی مکانیک موجی تکیه خواهیم کرد . در مسائلی که  $\phi$  مشاهده پذیر بندادی نیست ، به عنوان مثال ، در نمایش دادن اسپین ذاتی و در کوانتش میدان الکترومغناطیسی ، باید به جای مکانیک موجی شرودینگر فرمول بندی عمومی تر دیراک را به کار ببریم .

## ۱۲- گذار به مکانیک موجی

بحث حاضر را به یک ذره منفرد که مشاهده پذیرهای مربوط به آن تابعی از  $\hat{p}$  و  $\hat{q}$  هستند محدود می کنیم . می خواهیم ویژه مقدارها و ویژه تابعهای یک تابع عملگری  $\hat{A}(\hat{p}, \hat{q})$  را پیدا کنیم . معادله ویژه مقداری برداری عبارت است از

$$\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle \quad (۷۹-۳)$$

با ضرب داخلی  $\langle r|$  در دو طرف این معادله، معادله نرده‌ای

$$\langle r|\hat{A}|a_i\rangle = a_i\langle r|a_i\rangle = a_i\psi_{a_i}(r) \quad (۸۰-۳)$$

را به دست خواهیم آورد. با این که طرف راست شامل ویژه تابع است، هنوز روشن نیست طرف چپ چه چیزی را بیان می‌کند. برای تعیین عناصر ماتریسی  $\langle r|\hat{A}|a_i\rangle$  فرض می‌کنیم که عملگر به شکل

$$\hat{A}(\hat{p}, \hat{r}) = \hat{G}(\hat{p}) + \hat{K}(\hat{r}) \quad (۸۱-۳)$$

باشد (به عنوان مثال،  $\hat{A}$  می‌تواند عملگر هامیلتونی  $\hat{H}$  باشد که شامل یک جمله انرژی جنبشی و یک جمله انرژی پتانسیل است). گرچه این شکل تا اندازه‌ای حالت خاص است، ولی نتایج کاملاً عمومی باقی می‌مانند. با بردن (۸۱-۳) در (۸۰-۳)، نتیجه خواهیم گرفت

$$\langle r|\hat{G}(\hat{p})|a_i\rangle + \langle r|\hat{K}(\hat{r})|a_i\rangle = a_i\psi_{a_i}(r) \quad (۸۲-۳)$$

محاسبه جمله دوم طرف چپ ساده است. چون  $\langle r|$  یک ویژه برای  $\hat{r}$  است باید ویژه برای  $\hat{K}(\hat{r})$ ، با ویژگی

$$\langle r|\hat{K}(\hat{r}) = K(r)\langle r|$$

نیز باشد. معادله (۸۲-۳) خواهد شد

$$\langle r|\hat{G}(\hat{p})|a_i\rangle + K(r)\psi_{a_i}(r) = a_i\psi_{a_i}(r) \quad (۸۳-۳)$$

برای کامل کردن این تحلیل باید عنصر ماتریس  $\langle r|\hat{G}(\hat{p})|a_i\rangle$  را تعیین کنیم، و این کار وقتی انجام پذیر است که تاثیر  $\hat{p}$  روی یک ویژه بردار  $|a_i\rangle$  معلوم باشد. برای انجام این کار به قضیه زیر نیازمندیم.

قضیه ۸- عملگر  $\hat{p}_x$  مولد انتقالهای بینهایت کوچک در امتداد محور  $x$  است\*. به زبان ریاضی داریم

\* به فصل ۲ معادله (۸۱-۲) مراجعه کنید عملگر داخل پرانتز در واقع دو جمله اول بسط تیلور

$$U_{p,x}(x) = \exp(-i\hat{p}_x x/\hbar)$$

که یک انتقال محدود  $x$  در امتداد محور  $x$  ها ایجاد می‌کند، می‌باشد.

$$\left\{ \hat{1} + \frac{\hat{p}_x dx}{i\hbar} \right\} |x, y, z\rangle = |x + dx, y, z\rangle \quad (۳-۸۴)$$

یعنی، تاثیر عملگر داخل پراانتز روی یک بردار حالت،  $|x\rangle = |x, y, z\rangle$ ، عبارت است از انتقال ذره به اندازه  $dx$  در امتداد محور  $x$ .

اثبات - می‌خواهیم ثابت کنیم که جمله طرف چپ (۳-۸۴) در واقع یک ویژه بردار  $\hat{x}$  وابسته به ویژه مقدار  $x + dx$  است، یعنی،

$$\hat{x} \left[ \left\{ \hat{1} + \frac{\hat{p}_x dx}{i\hbar} \right\} |x, y, z\rangle \right] = (x + dx) \left[ \left\{ \hat{1} + \frac{\hat{p}_x dx}{i\hbar} \right\} |x, y, z\rangle \right] \quad (۳-۸۵)$$

طرف چپ، با استفاده از رابطه جابه‌جایی  $\hat{x}\hat{p}_x = i\hbar\hat{1} + \hat{p}_x\hat{x}$  می‌تواند به صورت

$$\left\{ \hat{x} + dx\hat{1} + \frac{\hat{p}_x\hat{x}dx}{i\hbar} \right\} |x, y, z\rangle = \left\{ x + dx + \frac{x dx \hat{p}_x}{i\hbar} \right\} |x, y, z\rangle$$

نوشته شود. اما، این دقیقاً برابر با طرف راست (۳-۸۵) است. این مطلب پس از انجام ضرب و حذف جمله‌های از مرتبه  $dx^2$ ، یعنی،

$$\left\{ x + \frac{x dx}{i\hbar} \hat{p}_x + dx + \frac{dx^2 \hat{p}_x}{i\hbar} \right\} |x, y, z\rangle \simeq \left\{ x + dx + \frac{x dx \hat{p}_x}{i\hbar} \right\} |x, y, z\rangle$$

حاصل می‌شود. رابطه فوق (۳-۸۵) را برقرار و قضیه ۸ را ثابت می‌کند.

معادله (۳-۸۴) را می‌توان، با نوشتن آن به صورت

$$\hat{p}_x |x, y, z\rangle = \frac{i\hbar(|x + dx, y, z\rangle - |x, y, z\rangle)}{dx}$$

یا، در شکل پرا، به صورت

$$\langle x, y, z | \hat{p}_x = \frac{-i\hbar(\langle x + dx, y, z | - \langle x, y, z |)}{dx}$$

به شکل مفیدتری درآورد. بالاخره عنصر ماتریس به صورت

$$\langle x, y, z | \hat{p}_x | a_i \rangle = - \frac{i\hbar(\langle x + dx, y, z | a_i \rangle - \langle x, y, z | a_i \rangle)}{dx}$$

یا

$$\langle \mathbf{r} | \hat{p}_x | a_i \rangle = - \frac{i\hbar(\psi_{a_i}(x + dx, y, z) - \psi_{a_i}(x, y, z))}{dx} = \left(\frac{\hbar}{i}\right) \left(\frac{\partial \psi_{a_i}}{\partial x}\right)$$

در خواهد آمد . به طور عمومی تر برای عملگر  $\hat{p}$  خواهیم داشت

$$\langle \mathbf{r} | \hat{p} | a_i \rangle = \frac{\hbar}{i} \nabla \psi_{a_i}$$

یا

$$\langle \mathbf{r} | \hat{G}(\hat{p}) | a_i \rangle = \hat{G}\left(\frac{\hbar}{i} \nabla\right) \psi_{a_i} \quad (۳-۸۶)$$

که در آن  $\hat{G}(\hbar/i \nabla)$  عبارت است از تابع عملگری دیفرانسیلی متناظر . بالاخره ، (۳-۸۵) به صورت معادله ویژه مقداری

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \hat{A} | a_i \rangle &= \hat{A}\left(\frac{\hbar}{i} \nabla, \mathbf{r}\right) \psi_{a_i} \\ &= \left\{ \hat{G}\left(\frac{\hbar}{i} \nabla\right) + K(\mathbf{r}) \right\} \psi_{a_i}(\mathbf{r}) = a_i \psi_{a_i}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (۳-۸۷)$$

در می آید .

قاعده - برای به دست آوردن عملگر (دیفرانسیلی) مکانیک موجی وابسته به یک مشاهده پذیر هندادی ، جایگزینی زیر را انجام می دهیم

$$\hat{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla, \quad \mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}, \quad \hat{A}(\hat{p}, \mathbf{r}) \rightarrow \hat{A}\left(\frac{\hbar}{i} \nabla, \mathbf{r}\right) \quad (۳-۸۸)$$

به عنوان مثال ، فرض کنیم می خواهیم ویژه تابعهای (حالت های مانا) انرژی هامیلتونی غیرنسبیتی  $\mathcal{H} = (\hat{p}^2/2m) + V(\mathbf{r})$  را پیدا کنیم . نخست عملگر مکانیک موجی

$$\mathcal{H} = \frac{\frac{\hbar}{i} \nabla \cdot \frac{\hbar}{i} \nabla}{2m} + V(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r})$$

را تشکیل می‌دهیم و سپس معادله ویژه مقداری

$$\mathcal{H} \psi_{\varepsilon_i} = \varepsilon_i \psi_{\varepsilon_i}$$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right\} \psi_{\varepsilon_i}(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_{\varepsilon_i}(\mathbf{r})$$

را برای ویژه تابعها و ویژه مقدارهای انرژی حل می‌کنیم.

عناصر ماتریس که به شکل  $\langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle$  هستند می‌توانند به طور کامل "ساده‌ای درمکانیک موجی محاسبه شوند. با استفاده از رابطه کامل بودن  $\int |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}| d\mathbf{r} = \hat{1}$  و (۳-۸۷) می‌نویسیم

$$\langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle = \int \langle \alpha | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \hat{A} | \beta \rangle d\mathbf{r} = \int \Psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}) \hat{A} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla, \mathbf{r} \right) \Psi_{\beta}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (۳-۸۹)$$

قاعده - عنصر ماتریس  $\langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle$  با تاثیر دادن عملگر  $\hat{A} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla, \mathbf{r} \right)$  روی  $\Psi_{\beta}(\mathbf{r})$  و ضرب آن در  $\Psi_{\alpha}^*(\mathbf{r})$  و انتگرال گیری روی تمام فضا به دست می‌آید.

به عنوان مثال، عنصر  $\langle \alpha | \hat{p} | \beta \rangle$  در مکانیک موجی به صورت زیر محاسبه می‌شود

$$\langle \alpha | \hat{p} | \beta \rangle = \int \Psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}) \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi_{\beta}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

### ۱۳- معادله موج شرودینگر

در مکانیک موجی، حالت یک سیستم توسط تابع حالت

$$\Psi_{\beta}(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r} | \beta, t \rangle$$

نمایش داده می‌شود. وقتی بردار حالت می‌چرخد، تابع حالت با زمان از مقدار اولیه‌اش  $\Psi_{\beta}(\mathbf{r}, t_0) = \langle \mathbf{r} | \beta, t_0 \rangle$  متحول می‌شود. می‌توان، با استفاده از تصویر شرودینگر، که در آن بردار حالت در رابطه

$$\mathcal{H}|\beta, t\rangle = i\hbar \frac{d|\beta, t\rangle}{dt}$$

صدق می‌کند، معادله حرکتی برای تابع حالت به دست آورد. با ضرب داخلی دوطرف رابطه فوق در  $\langle r|$  خواهیم داشت

$$\langle r|\mathcal{H}|\beta, t\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle r|\beta, t\rangle$$

یا

$$\mathcal{H}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla, \mathbf{r}\right)\Psi_\beta(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_\beta(\mathbf{r}, t)$$

با به کار بردن هامیلتونی به شکل عمومی  $\mathcal{H} = (\hat{p}^2/2m) + V(\hat{\mathbf{r}})$  معادله موج شرودینگر را برای تابع حالت (یا موج)  $\Psi_\beta(\mathbf{r}, t)$  به صورت زیر به دست خواهیم آورد

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi_\beta + V(\mathbf{r})\Psi_\beta = i\hbar \frac{\partial\Psi_\beta}{\partial t} \quad (3-90)$$

در حالی که خود  $\Psi_\beta$  مختلط و غیرقابل اندازه‌گیری است، توان دوم قدرمطلق آن با احتمال یافتن ذره در نواحی مختلف فضا مرتبط است. این واقعیت که  $\Psi_\beta$  در یک معادله موجی صدق می‌کند بیانگر وجود کیفیت‌های موج ماندی در ماده است که در فصل ۱ مورد بحث قرار گرفت. اکنون خواهیم دید که تابع موج یک ذره آزاد در اصل همان چیزی است که دوبروی در نظریه ابتدائی‌تر خود به آن اشاره کرده بود.

چون معادله موج نسبت به زمان از مرتبه اول است، تنها مقدار اولیه  $\Psi_\beta(\mathbf{r}, t_0)$  برای تعیین تحول تابع حالت کافی است. جواب معادله موج به آسانی، با ضرب داخلی دوطرف (۳-۶۵)، که عبارت است از

$$|\beta, t\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\beta, t_0\rangle$$

در  $\langle r|$  به صورت زیر به دست می‌آید.

$$\Psi_\beta(\mathbf{r}, t) = \langle r|\beta, t\rangle = \langle r|\hat{U}(t, t_0)|\beta, t_0\rangle$$

این رابطه می‌تواند با استفاده از رابطه بستاری  $\int dr' |r'\rangle \langle r'| = \hat{1}$  به صورت زیر بیان شود

$$\Psi_\beta(r, t) = \int dr' \langle r | \hat{U}(t, t_0) | r' \rangle \langle r' | \beta, t_0 \rangle \quad (۹۱-۳)$$

با تعریف هسته انتشار یا انتشاردهنده به وسیله

$$G(r, r', t, t') = \langle r | \hat{U}(t, t') | r' \rangle \quad (۹۲-۳)$$

(۹۱-۳) می‌تواند به صورت زیر بیان شود

$$\Psi_\beta(r, t) = \int dr' G(r, r', t, t_0) \Psi_\beta(r', t_0) \quad (۹۳-۳)$$

با استفاده از  $\hat{U} = \exp(-i\mathcal{H}(t - t_0)/\hbar)$ ، بستگی  $G$  به هامیلتونی کاملاً روشن می‌شود. وقتی هامیلتونی معلوم و تابع حالت اولیه مشخص باشد، تابع موج در زمانهای بعد می‌تواند با استفاده از (۹۳-۳) محاسبه شود.

محاسبه انتشاردهنده  $G$  به شکل بسته از رابطه تعریف کننده (۹۲-۳) معمولاً مشکل است. اگر شرط کامل بودن ویژه پایه  $\mathcal{H}$ ، یعنی  $\sum_i |\varepsilon_i\rangle \langle \varepsilon_i| = \hat{1}$  را به کار ببریم بسط به سری آن امکان پذیر خواهد بود. با قراردادن

$$\hat{U} = \exp[-i\mathcal{H}(t - t_0)/\hbar]$$

(۹۲-۳) خواهد شد

$$\begin{aligned} G(r, r', t, t') &= \sum_i \langle r | \exp[-i\mathcal{H}(t - t_0)/\hbar] | \varepsilon_i \rangle \langle \varepsilon_i | r' \rangle \\ &= \sum_i \exp[-i\varepsilon_i(t - t_0)/\hbar] \langle r | \varepsilon_i \rangle \langle \varepsilon_i | r' \rangle \quad (۹۴-۳) \\ &= \sum_i \exp[-i\varepsilon_i(t - t_0)/\hbar] \psi_{\varepsilon_i}(r) \psi_{\varepsilon_i}^*(r') \end{aligned}$$

وقتی که ویژه مقدارها و ویژه تابعهای هامیلتونی پیدا شدند، انتشاردهنده می‌تواند با استفاده از (۹۴-۳) ساخته شود.

## ۱۴ - معادله موج شرودینگر و جریان احتمال

به تدریج که تابع حالت با زمان تحول می‌یابد، چگالی احتمال وابسته به سیستم در سرتاسر فضا تغییر می‌کند. چون احتمال کلی همیشه برابر با یک است، چگالی از یک ناحیه به ناحیه دیگر، خیلی شبیه به یک سیال، جریان پیدا می‌کند. ارتباط بین جریان احتمال و معادله شرودینگر با کاربرد این معادله،

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right\} \Psi_\beta = i\hbar \frac{\partial \Psi_\beta}{\partial t}$$

و مزدوج آن،

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right\} \Psi_\beta^* = -i\hbar \frac{\partial \Psi_\beta^*}{\partial t}$$

برقرار می‌شود. با ضرب معادله اول در  $\Psi_\beta^*$ ، و معادله دوم در  $\Psi_\beta$ ، و کم کردن آنها از یکدیگر، خواهیم داشت

$$\frac{-\hbar^2}{2m} (\Psi_\beta^* \nabla^2 \Psi_\beta - \Psi_\beta \nabla^2 \Psi_\beta^*) = i\hbar \left( \Psi_\beta^* \frac{\partial \Psi_\beta}{\partial t} + \Psi_\beta \frac{\partial \Psi_\beta^*}{\partial t} \right)$$

یا به‌طور معادل

$$\nabla \cdot \frac{i\hbar}{2m} (\Psi_\beta^* \nabla \Psi_\beta - \Psi_\beta \nabla \Psi_\beta^*) = \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_\beta|^2 \quad (۹۵-۳)$$

با تعریف شار احتمال یا بردار جریان احتمال به‌وسیله

$$\mathbf{J}_\beta(r, t) = \frac{-i\hbar}{2m} (\Psi_\beta^* \nabla \Psi_\beta - \Psi_\beta \nabla \Psi_\beta^*) \quad (۹۶-۳)$$

و استفاده از تعریف چگالی احتمال،  $\mathcal{P}_\beta(r, t) = |\Psi_\beta|^2$ ، معادله (۹۵-۳) به‌صورت یک معادله پیوستگی در می‌آید، یعنی،

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_\beta + \frac{\partial \mathcal{P}_\beta}{\partial t} = 0 \quad (۹۷-۳)$$



معادله (۳-۹۷) ایجاب می‌کند که احتمال به‌طور موضعی پایسته باشد، یعنی، نه ایجاد می‌شود و نه از بین می‌رود. به بیان دیگر، هر کاهش (یا افزایش) احتمال به ناحیه‌ای از فضا با یک جریان خروجی (یا جریان ورودی) احتمال همراه است. هم‌چنین، اگر سیستم در یک حالت مانا باشد،  $\partial \mathcal{P}_\theta / \partial t = 0$  و جریان احتمال سیملوله‌ای است، یعنی،  $\nabla \cdot \mathbf{J}_\theta = 0$ . اگر تابع حالتی حقیقی باشد، در این صورت از (۳-۹۶) نتیجه می‌شود که  $\mathbf{J} = 0$ .

توجه کنیم که نتیجه‌گیری معادله پیوستگی برای جریان احتمال بستگی به حقیقی بودن تابع انرژی پتانسیل دارد. در حالی که پتانسیل‌های مختلط، به‌خاطر این که به‌ویژه مقدارهای مختلط انرژی منجر می‌شوند، قدری غیرفیزیکی هستند، مع ذلک به‌طور گسترده‌ای در مدل سازی برهم‌کنش‌های هسته‌ای مورد استفاده قرار گرفته‌اند. تحقیق این که قسمت موهومی پتانسیل مستقیماً "منجر به یک جمله فروکشنده در (۳-۹۷) می‌شود، که به‌نوبه خود منجر به کاهش احتمال می‌شود، ساده است (مسئله ۳-۱۴). این کاهش احتمال به‌عنوان جذب ذرات توسط هسته‌ها تعبیر می‌شود.

محدودیت‌هایی وجود دارند که باید به‌تابع حالت یک سیستم تحمیل شوند، زیرا توان دوم آن معرف یک چگالی احتمال است. این محدودیت‌ها در اصل موضوع زیرگنجانده شده‌اند.

اصل موضوع ۷- یک تابع حالت، که نمایانگر یک سیستم فیزیکی حقیقی است، و مشتق آن باید در همه جا متناهی، پیوسته\*، و تک مقداری باشند.

در فصل ۴ توجه خود را به‌ویژه تابع‌های مانا و ویژه مقدارهای (انرژی) هامیلتونی‌های یک بعدی گوناگونی معطوف می‌کنیم. چون با سیستم‌های تک ذره‌ای سروکار خواهیم داشت، نمایش مکانیک موجی مورد استفاده قرار خواهد گرفت. در جدول (۳-۱) ارتباط بین صورتبندی دیراک و مکانیک موجی شرودینگر خلاصه شده است. ویژگی آخر (کامل بودن) با کاربرد

$$\langle \mathbf{r} | \sum_i |a_i\rangle \langle a_i| | \mathbf{r}' \rangle = \langle \mathbf{r} | \hat{1} | \mathbf{r}' \rangle$$

$$\sum_i \psi_{a_i}^*(\mathbf{r}') \psi_{a_i}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

برقرار می‌شود.

---

\* در وضعیت غیرفیزیکی که تابع انرژی پتانسیل یک ناپیوستگی بینهایت دارد، شرط پیوستگی روی مشتق  $\Psi_\theta$  بایستی رها شود.

جدول (۳-۱): ارتباط بین صورتبندیهای دیراک (برداری) و شرودینگر (تابعی)  
مکانیک کنتومی در نمایش مختصای (مکانیک موجی).

مکانیک کوانتومی در نمایش مختصای (مکانیک موجی)	مکانیک کوانتومی در یک فضای برداری	عملگر حالت مشخصه ویژه مقدار معادله ویژه مقدار حالت غیرمشخص حاصل ضرب داخلی عنصر ماتریس ویژگی هرمیتی معادله حرکت شرودینگر تحول زمانی یک ویژه حالت انرژی تحول زمانی یک حالت غیر مشخص بسط رابطه کامل بودن
$\hat{A}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla, \mathbf{r}\right)$ $\psi_a(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r}   a_i \rangle, \psi_a^*(\mathbf{r}) = \langle a_i   \mathbf{r} \rangle$ $a_i$ $\hat{A}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla, \mathbf{r}\right)\psi_a(\mathbf{r}) = a_i\psi_a(\mathbf{r})$ $\Psi_B(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r}   \beta, t \rangle, \Psi_B^*(\mathbf{r}, t) = \langle \beta, t   \mathbf{r} \rangle$ $\int \psi_a^*(\mathbf{r})\psi_B(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ $\int d\mathbf{r} \psi_a^*(\mathbf{r})\hat{A}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla, \mathbf{r}\right)\psi_B(\mathbf{r})$ $\int d\mathbf{r} \psi_a^*(\mathbf{r})\hat{A}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla, \mathbf{r}\right)\psi_B(\mathbf{r}) = \left[ \int d\mathbf{r} \psi_B^*(\mathbf{r})\hat{A}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla, \mathbf{r}\right)\psi_a(\mathbf{r}) \right]^*$ $\mathcal{H}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla, \mathbf{r}\right)\Psi_B(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi_B(\mathbf{r}, t)}{\partial t}$ $\Psi_{E_i}(\mathbf{r}, t) = \exp\left[-\frac{iE_i(t-t_0)}{\hbar}\right]\Psi_{E_i}(\mathbf{r}, t_0)$ $\Psi_B(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{r}' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t-t_0)\Psi_B(\mathbf{r}', t_0)$ $\left\{ \begin{array}{l} \psi_B(\mathbf{r}) = \sum_i \beta^{(in)}_i \psi_{a_i}(\mathbf{r}) \\ \beta^{(in)}_i = \int \psi_{a_i}^*(\mathbf{r})\psi_B(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad L_i \\ \sum_i \psi_{a_i}^*(\mathbf{r})\psi_{a_i}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \end{array} \right.$	$\hat{A}(\beta, \mathbf{r})$ $ a_i\rangle, \langle a_i $ $a_i$ $\hat{A} a_i\rangle = a_i a_i\rangle$ $ \beta, t\rangle, \langle \beta, t $ $\langle \alpha   \beta \rangle$ $\langle \alpha   \hat{A}   \beta \rangle$ $\langle \alpha   \hat{A}   \beta \rangle = (\langle \beta   \hat{A}   \alpha \rangle)^*$ $\mathcal{H}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{r}}) \beta, t\rangle = i\hbar \frac{d \beta, t\rangle}{dt}$ $ \varepsilon_i, t\rangle = \exp\left[-\frac{i\varepsilon_i(t-t_0)}{\hbar}\right] \varepsilon_i, t_0\rangle$ $ \beta, t\rangle = \exp\left[-\frac{i\mathcal{H}(t-t_0)}{\hbar}\right] \beta, t_0\rangle$ $\left\{ \begin{array}{l}  \beta\rangle = \sum_i \beta^{(in)}_i  a_i\rangle \\ \beta^{(in)}_i = \langle a_i   \beta \rangle \quad L_i \\ \sum_i  a_i\rangle \langle a_i  = I \end{array} \right.$	

### مسائل

۱-۳ (الف) ویژه‌مقدارها و یک مجموعه از ویژه‌بردارهای راست هنجار ماتریس هرمیتی

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

را پیدا کنید .

(ب) تحقیق کنید که ویژه‌بردارها متعامداند .

۲-۳ ماتریس زیر را در نظر بگیرید

$$\hat{B} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

(الف) نشان دهید که این ماتریس با ماتریس  $\hat{A}$  ی داده شده در مسئله (۱-۳) جابه‌جاپذیر است .

(ب) حداقل یک مجموعه از ویژه‌بردارهای راست هنجار مشترک  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  را پیدا کنید .

(ج) ماتریسها را در این ویژه پایه مشترک نمایش دهید .

۳-۳ با استفاده از قواعد جبر برا-کت تحقیق کنید که به‌طور کلی داریم

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger \quad \text{و} \quad (\hat{A}\hat{B})^{-1} = \hat{B}^{-1} \hat{A}^{-1}$$

۴-۳ یک مجموعه بردار راست هنجار در یک پایه داده شده در نظر بگیرید

$$|\beta_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad |\beta_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad |\beta_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

(الف) ماتریسهای تصویرگر متناظر  $\hat{P}_1$ ،  $\hat{P}_2$  و  $\hat{P}_3$  را پیدا کنید .

(ب) نشان دهید که  $\hat{P}_1 + \hat{P}_2 + \hat{P}_3 = \hat{1}$

(ج) فرض کنید

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

تحقیق کنید که  $\hat{P}_2$  آنرا روی  $|\beta_2\rangle$  تصویر می‌کند، یعنی،  $\hat{P}_2|a\rangle = (\langle\beta_2|a\rangle)|\beta_2\rangle$ ، توضیح دهید چرا رابطه  $e^{A+B} = e^A e^B$  برای هر عملگری معتبر نیست. تحت چه شرایطی رابطه مذکور برقرار است؟ ماتریس  $e^{i\lambda}$  را تا مرتبه  $\lambda^2$  برای

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$$

بیان کنید.

۶-۳ اتحاد برداری

$$\langle\gamma|\gamma\rangle\langle\delta|\delta\rangle - |\langle\gamma|\delta\rangle|^2 \equiv \langle\beta|\beta\rangle\langle\delta|\delta\rangle$$

را که در آن

$$|\beta\rangle = |\gamma\rangle - \left[ \frac{\langle\delta|\gamma\rangle}{\langle\delta|\delta\rangle} \right] |\delta\rangle$$

تحقیق کنید. از این اتحاد برای اثبات نامساوی شوارتز، (۵۷-۳)، استفاده کنید. با استفاده از رابطه جابه‌جایی  $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \hat{1}$ ، رابطه

$$\hat{p}_x = \frac{m}{i\hbar} [\hat{x}, \mathcal{H}]$$

را، که در آن  $\mathcal{H}$  هامیلتونی‌ای به شکل

$$\mathcal{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + V(x)$$

است، تحقیق کنید.

۸-۳ نشان دهید که برای هر حالت مقید مانا داریم  $\langle p_x \rangle_n = 0$ . (راهنمایی: مقدار قابل انتظار دوطرف رابطه به دست آمده در مسئله (۷-۳) را برای یک ویژه حالت  $\mathcal{H}$ ، به عنوان مثال،  $|\varepsilon_n\rangle$ ، به دست آورید.)

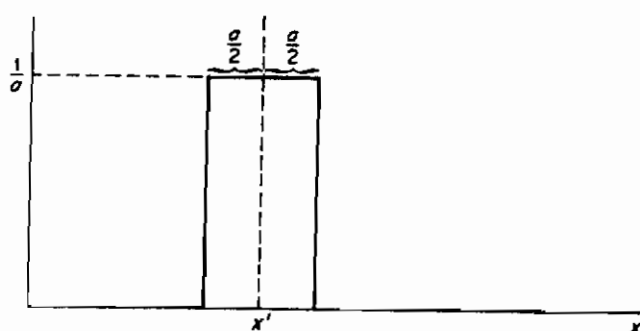
۹-۳ با استفاده از قواعد ضرب ماتریسها نشان دهید که در فضای سه بعدی داریم

$$\text{Tr } \hat{A}\hat{B} = \text{Tr } \hat{B}\hat{A}$$

۱۰-۳ تابعی را (شکل ۳-۳) که با

$$f(x, x') = 1/a \quad -\frac{1}{2}a + x' \leq x \leq \frac{1}{2}a + x'$$

$$= 0 \quad (\text{در جاهای دیگر})$$



شکل (۳-۳)

تعریف می شود در نظر بگیرید .

(الف) نشان دهید که وقتی  $a \rightarrow 0$  ، این تابع به تابع دلتای دیراک تبدیل

می شود ، یعنی

$$\lim_{a \rightarrow 0} f(x, x') \rightarrow \delta(x - x')$$

(ب) با به کارگیری  $g(x) = bx^2$  تحقیق کنید که این تابع دلتا دارای ویژگی "غربالی" زیر است

$$g(x') = \int_{-\infty}^{\infty} g(x) \delta(x - x') dx$$

(راهنمایی: انتگرال گیری را برای مقدار متناهی  $a$  انجام دهید و سپس قرار دهید

$$(a \rightarrow 0)$$

۱۱-۳ نشان دهید که اگر یک کت حالت را در مقدار اولیه اش نگاه داریم ، یعنی ،

$$|\beta\rangle \equiv |\beta, 0\rangle$$

می توانیم شکل کلاسیکی معادله حرکت برای  $\langle A(t) \rangle$  در

معادله (۶۱-۳) را محفوظ نگاه داریم به شرط این که فرض کنیم عملگرها طبق

$$\hat{A}_H(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$

تغییر کنند. در اینجا  $\hat{A}_H(t)$  و  $\hat{A}$  به ترتیب عملگرها در تصویر هایزنبرگ و تصویر شرودینگر هستند (رک پیوست ب)

۱۲-۳ با تاثیر دوطرف

$$\left[ x, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right] = i\hbar \hat{1}$$

روی یک تابع دلخواه  $\psi$  نشان دهید که رابطه به دست آمده در مکانیک موجی برقرار است.

۱۳-۳ عملگر  $1/\hat{p}_x$  را در نظر بگیرید. روی شکل عمومی این عملگر در مکانیک موجی بحث کنید. (راهنمایی: عملگری را پیدا کنید که در رابطه

$$\frac{1}{\hat{p}_x} \psi(x) = \varphi(x)$$

صدق کند مشروط بر آنکه داشته باشیم  $\varphi(-\infty) = 0$ . همین کار را با تاثیر دادن  $\hat{p}_x$  روی دو طرف انجام دهید.

۱۴-۳ نشان دهید که اگر پتانسیل تابع مختلطی باشد یک جمله فروکشنده به شکل

$$\text{احتمال جذب} = -2 \operatorname{Im} V |\Psi|^2 / \hbar$$

در (۹۷-۳) ظاهر می شود.

### مراجع پیشنهادی

- Borowitz, S., "Fundamentals of Quantum Mechanics." Benjamin, New York, 1967.
- Dirac, P. A. M., "The Principles of Quantum Mechanics," 4th ed., 1958. Oxford Univ. Press, London and New York, 1958.
- (This text is one of the great classic works on modern quantum theory. While it is mathematically sophisticated it is nevertheless unique in its approach, style, and notation, and much of the material in Chapter 3 can be found in Dirac's book.)
- Feynman R. P., Leighton, R. B., and Sands, M., "The Feynman Lectures on Physics," Vol. 3. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1964.
- Gottfried, K., "Quantum Mechanics," Vol. I. Benjamin, New York, 1966.
- Merzbacher, E. "Quantum Mechanics," 2nd ed. Wiley, New York, 1970.
- Messiah, A., "Quantum Mechanics," Vol. I. Wiley, New York, 1958.
- Stehle, P. "Quantum Mechanics." Holden-Day, San Francisco, 1966.





# ۴

## مکانیک موجی در يك بعد

هر سیستم فیزیکی به وسیله هامیلتونی آن، که معمولاً "توسط تابع انرژی پتانسیل  $V(r)$  تعیین می شود، مشخص می گردد. برای روشن کردن نظرات مطرح شده در فصل ۳، خواص سیستمهای یک ذره ای یک بعدی را که هامیلتونی آنها مستقل از زمان است، با تأکید خاصی بر روی جوابهای ویژه حالت مانا مورد بررسی قرار می دهیم. ویژه حالت های مانا، به دلائل زیر، دارای اهمیتی اساسی هستند:

(الف) هر حالت دارای یک انرژی مشخصه  $E_i$  است.  
(ب) اگر سیستم در آغاز در چنین حالتی باشد، تا ابد در این حالت باقی خواهد ماند.

(ج) وقتی ویژه مقادارها و ویژه تابعهای انرژی به دست آمدند، انتشار دهنده  $G(r, r', t, t_0)$  می تواند با استفاده از (۳-۹۳) ساخته شده، و تحول حالت های غیر مشخص تعیین شود.

### ۱- طبقه بندی حالت های مانا در مکانیک موجی

ویژه تابعها و ویژه مقادارهای حالت های مانا به وسیله جوابهای معادله شرودینگر\* (معادله ویژه مقاداری انرژی)

---

\* معادله شرودینگر مستقل از زمان نباید با معادله موج شرودینگر (معادله وابسته به زمان) اشتباه شود. (۳-۹۵)

$$\mathcal{H}\psi_{\epsilon_i}(\mathbf{r}) = \left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right\} \psi_{\epsilon_i}(\mathbf{r}) = \epsilon_i \psi_{\epsilon_i}(\mathbf{r}) \quad (1-4)$$

تعیین می‌شوند.

یک حالت را، بسته به اینکه تابع متناظر (یا چگالی احتمال) آن در بینهایت صفر باشد یا نه مقید یا نامقید گوئیم. اگر تابع حالت وابسته به  $|\beta\rangle$  دارای ویژگی

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \langle \mathbf{r} | \beta \rangle = \lim_{r \rightarrow \infty} \Psi_{\beta}(\mathbf{r}) \rightarrow 0 \quad (2-4)$$

باشد حالت مقید است، در غیر این صورت نامقید. به‌زودی خواهیم دید که قاعده زیربرقرار است.

قاعده - یک ویژه حالت انرژی عموماً "جزء یک طیف گسسته است اگر مقید باشد، و جزء یک طیف پیوسته است اگر نامقید باشد.

هم‌چنین داشتن قاعده‌ای که نوع طیف وابسته به یک هامیلتونی معین را تعیین کند مهم است.

قاعده - ویژه حالت‌های یک عملگر هامیلتونی، بسته به اینکه هم‌تای کلاسیکی آن مربوط به مدارهای مقید باشد یا نه، مقید (گسسته) اند یا نامقید (پیوسته).

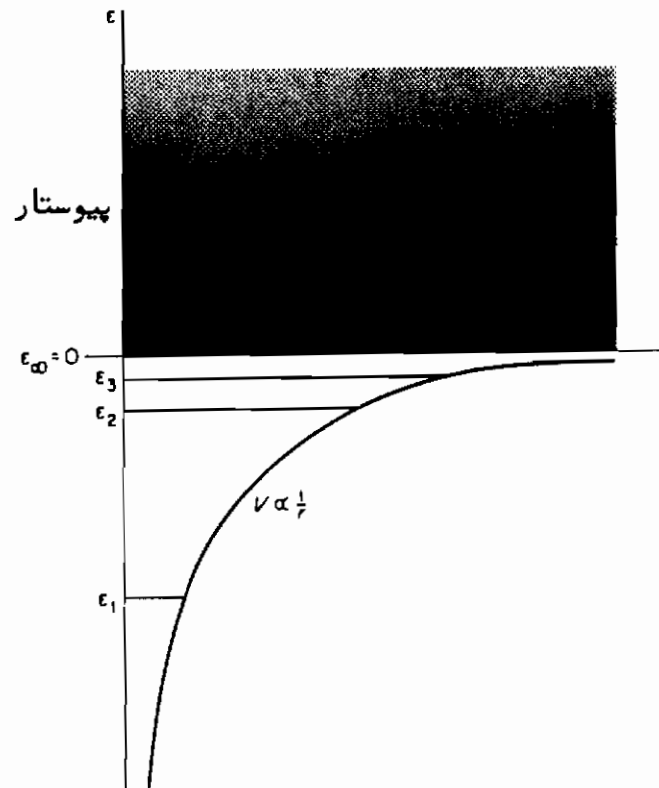
به‌عنوان مثال، از نظر کلاسیکی، ذره آزادی که توسط هامیلتونی با  $V=0$  اداره می‌شود روی یک خط مستقیم با سرعت ثابت حرکت می‌کند و سرانجام تا بینهایت می‌رود. هامیلتونی مکانیک کوانتومی متناظر آن دارای فقط یک طیف پیوسته است. از طرف دیگر، هامیلتونی کلاسیکی نوسانگر  $(V = \frac{1}{2}kr^2)$ ، صرف‌نظر از مقدار انرژی، فقط حرکات مقید را مجاز می‌داند. برای تمام انرژی‌های معین، یک جا به‌جایی پیشینه‌ای از مبدأ به نام دامنه نوسان وجود دارد. در نتیجه، نوسانگر کوانتومی شامل فقط حالت‌های مقید بوده و برای تمام انرژی‌ها دارای یک طیف گسسته است. هامیلتونی کپلری یا کولنی  $(V = -k/r)$  برای  $\epsilon < 0$  حرکات مقید (بیضی) و برای  $\epsilon \geq 0$  حرکات نامقید (سه‌می و هذلولی) را به‌دست می‌دهد. بنابراین باید برای  $\epsilon < 0$  یک طیف گسسته و برای  $\epsilon \geq 0$  یک طیف پیوسته انتظار داشته باشیم\*.

نظریه‌های وابسته به ویژه حالت‌های مانای مقید و نامقید به‌طور اساسی با یکدیگر متفاوتند. برای حالت‌های مقید، صفرشدن ویژه تابعها در بینهایت مستقیماً "به یک طیف گسسته

---

\* در اینجا  $\epsilon$  معرف انرژی است و نباید با خروج از مرکز تعریف شده در فصل ۲ اشتباه شود.

منجر می‌شود. لذا مسئله عبارت‌است از پیدا کردن ویژه تابعها و ویژه مقدارهای انرژی متناظر آنها و محاسبه مقادیر قابل انتظار عملگرهای متناظر با مشاهده پذیرهای مختلف. از طرف دیگر، برای حالت‌های نامقید، ویژه مقدارهای انرژی پیوسته‌اند، یعنی، کوانتیده نیستند. به علاوه، شکل ویژه تابعهای مربوط به حالت‌های نامقید معمولاً "منجر به روشهای بهنجاری می‌شود که مقادیر قابل انتظار بعضی عملگرها را نامعین باقی می‌گذارد. مهمترین آنها، جریان احتمال است زیرا این جریان به حالت ایستای فرایند پراکندگی ارتباط دارد. در واقع همان‌طور که در فصل ۸ خواهیم دید، نسبت بین شارهایسی که در جهات مختلف و نواحی مختلف فضا عبور می‌کنند مقطع موثر پراکندگی یک فرایند برخورد را تعیین می‌کند. به این دلیل حالت‌های نامقید یا حالت‌های پیوسته، حالت‌های پراکندگی نیز نامیده می‌شوند.



شکل (۱-۴) طیف مقید (گسسته) برای  $\epsilon < 0$  و نامقید (پیوسته) برای  $\epsilon > 0$ ، وابسته به انرژیهای با پتانسیل  $1/r$ .

در موردی که ممکن نباشد بخواهیم که ویژه تابع مربوط به یک حالت نامقید در بینهایت صفر شود، لازم است که بعضی شرایط جانبی را که به وسیله آزمایش خاص پراکندگی پیشنهاد می‌شوند تحمیل کنیم. این شرایط طبیعت عمومی ویژه تابع را وقتی به بینهایت نزدیک می‌شویم معین می‌کنند.

اکنون مسئله ویژه مقداری انرژی برای سیستمهای یک بعدی را بررسی خواهیم کرد. در حالی که مسائل یک بعدی معمولاً بیانگر فقط تقریبهایی از وضعیتهای فیزیکی هستند، در اینجا اصولاً به این جهت آنها را مورد بحث قرار می دهیم که فن ریاضیاتی مکانیک کوانتومی را جلوه گر می کنند. این مسائل اغلب اوقات به آسانی می توانند به مسائل سه بعدی تعمیم داده شوند. بحث ما با حالت های پیوسته هامیلتونی ها در یک بعد شروع می شود و ارتباط آنها را با پراکندگی از سدهای پتانسیل بررسی می کند.

## ۲ - ذره آزاد در یک بعد

با در نظر گرفتن یک ذره آزاد، یعنی ذره ای که برای آن  $V=0$  است، شروع می کنیم. هامیلتونی این سیستم عبارت است از  $\mathcal{H} = \hat{p}^2/2m$  و منجر به معادله ویژه مقداری انرژی شرودینگر، یعنی

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi = \varepsilon \psi$$

یا

$$\psi'' + k^2 \psi = 0 \quad , \quad k = \left( \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} \right)^{1/2}$$

می شود. این معادله دارای دو جواب مستقل خطی

$$\psi_k^+ = e^{ikx} \quad \text{و} \quad \psi_k^- = e^{-ikx}$$

است.

هر دو جواب به طور همزمان ویژه تابع عملگر  $\hat{p}$  هستند. با تأیید دادن  $\hat{p}$  روی  $\psi_k^\pm$  داریم

$$\hat{p} \psi_k^\pm = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi_k^\pm = \pm \frac{\hbar}{i} ik \psi_k^\pm = \pm \hbar k \psi_k^\pm$$

به طوری که ویژه مقدارهای تکانه های متناظر عبارتند از  $p^\pm = \pm \hbar k$ . بنابراین، حالت  $\psi_k^+ = e^{ikx}$  ذره ای با تکانه  $\hbar k$  را نشان می دهد که در جهت مثبت محور  $x$  حرکت می کند.

همین‌طور  $\psi_k^-$  ذره آزادی با تکانه  $\hbar k$  - را نشان می‌دهد که در جهت منفی محور  $x$  حرکت می‌کند. هردو حالت در انرژی تبهگن‌اند، زیرا هردو دارای انرژی

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

هستند.

شار احتمال وابسته به  $\psi_k^\pm$ ، از (۳-۹۶)، عبارت است از

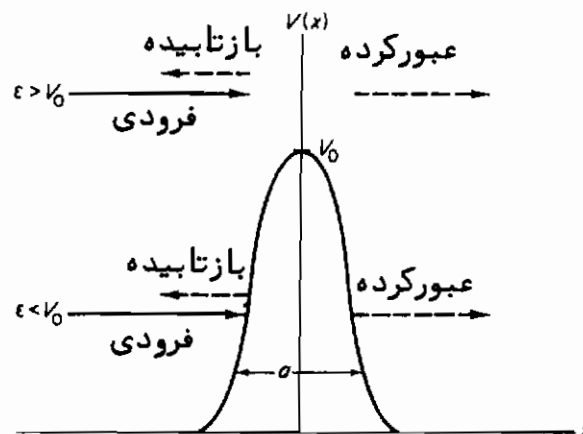
$$J^\pm = -\frac{i\hbar}{2m} \left[ \psi_k^{\pm*} \frac{d}{dx} \psi_k^\pm - \psi_k^\pm \frac{d}{dx} \psi_k^{\pm*} \right] = \pm \frac{\hbar k}{m} = \pm \frac{p}{m} = \pm v$$

بنابراین شار برابر است با سرعت ذره و برای  $\psi_k^+$  به‌طرف راست و برای  $\psi_k^-$  به‌طرف چپ جریان دارد. جواب عمومی معادله ویژه مقداری انرژی شرو딩نگر عبارت است از

$$\psi_{\text{gen}} = A\psi_k^+ + B\psi_k^-$$

### ۳ - پراکندگی از سدهای یک بعدی

در مسئله پراکندگی یک بعدی، یک باریکه از ذرات از یک جهت معین به‌طرف یک سد پتانسیل  $V(x)$  می‌تابد. قسمتی از آن بازتابیده می‌شود و باقیمانده باریکه عبور می‌کند (شکل ۴-۲).



شکل (۴-۲) پراکندگی از سد یک بعدی

سد ممکن است دافعه باشد ( $V > 0$ ) یا جاذبه ( $V < 0$ )؛ با این وجود، پتانسیلهایی که ما در نظر خواهیم گرفت آنهایی هستند که وقتی  $x \rightarrow \pm \infty$  به سمت صفر میل کنند. بنابراین ذرات باریکه در فاصله‌های زیاد از مبدأ اصولاً آزادند. در حالی که شکل سد دارای اهمیت ویژه‌ای نیست، ممکن است از نظر کیفی به وسیله یک ارتفاع  $V_0$  و یک پهنای  $a$ ، مثل شکل (۲-۴)، مشخص شود. انرژی ذرات باریکه ممکن است بزرگتر یا کوچکتر از  $V_0$  باشد. ویژه تابعهای انرژی وابسته به این پتانسیل از حل معادله شرودینگر یک بعدی

$$\mathcal{H}\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}, x\right) \psi_\epsilon(x) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right\} \psi_\epsilon(x) = \epsilon \psi_\epsilon(x) \quad (۳-۴)$$

به دست می‌آیند. برای حالت‌های پراکندگی، ویژه مقدارهای انرژی پیوسته است و (۳-۴) را برای هر  $\epsilon > 0$  حل خواهیم کرد. وقتی  $|x| \rightarrow \infty$  پتانسیل صفر می‌شود و می‌توان ثابت کرد که  $e^{ikx}$  و  $(k = (2m\epsilon/\hbar^2)^{1/2})e^{-ikx}$  دوجوابی هستند که به‌طور خطی مستقل‌اند. همان‌طوری که قبلاً نشان داده شد این جوابها معرف ذراتی هستند که به ترتیب به طرف راست و به طرف چپ حرکت می‌کنند. فرض خواهیم کرد که باریکه از طرف چپ می‌تابد. در این صورت انتظار داریم در فاصله دور در طرف چپ یک باریکه فرودی ( $\sim e^{ikx}$ ) و یک باریکه بازتابیده ( $\sim e^{-ikx}$ ) داشته باشیم. اما در فاصله زیاد در طرف راست بایستی فقط یک باریکه عبور کرده ( $\sim e^{ikx}$ ) داشته باشیم. بنابراین، شرایط مجانبی زیر را به جوابهای قابل قبول (۳-۴) تحمیل می‌کنیم

$$\begin{aligned} \psi_\epsilon(x) &\sim A e^{ikx} + B e^{-ikx} && (\text{فرودی و بازتابیده}) \\ \psi_\epsilon(x) &\sim E e^{ikx} && (\text{عبور کرده}) \end{aligned} \quad (۴-۴)$$

$$\left( k = \left( \frac{2m\epsilon}{\hbar^2} \right)^{1/2} \right)$$

مسئله پراکندگی به پیدا کردن آن جوابهای دقیق (برای مقدار داده شده  $\epsilon$ ) معادله شرودینگر (۳-۴) که دارای شکل مجانبی مورد نظر باشند تقلیل پیدا می‌کند. وقتی جواب دقیق به دست آمد، و شکل مجانبی برقرار شد، ضرایب  $A$ ،  $B$  و  $E$  می‌توانند برای پیش‌بینی آهنگی که با آن باریکه بازتابیده می‌شود و یا عبور می‌کند به کار روند.

شار فرودی که به ویژه تابع مجانبی  $\psi_{\text{inc}} = A e^{ikx}$  مربوط است، با استفاده از (۳-۹۶)، می‌دهد

$$J_{\text{inc}} = \frac{-i\hbar}{2m} \left( \psi_{\text{inc}}^* \frac{d}{dx} \psi_{\text{inc}} - \psi_{\text{inc}} \frac{d}{dx} \psi_{\text{inc}}^* \right) = \frac{\hbar k}{m} |A|^2$$

اعمال این روش به توابع بازتابیده و عبور کرده نتیجه می‌دهد

$$J_{\text{refl}} = \frac{\hbar k}{m} |B|^2 \quad \text{و} \quad J_{\text{trans}} = \frac{\hbar k}{m} |E|^2$$

مناسب خواهد بود که ضرایب بازتاب و عبور را به صورت زیر تعریف کنیم

$$\mathcal{R} = \frac{J_{\text{refl}}}{J_{\text{inc}}} = \left| \frac{B}{A} \right|^2 \quad (4-5)$$

و

$$\mathcal{T} = \frac{J_{\text{trans}}}{J_{\text{inc}}} = \left| \frac{E}{A} \right|^2 \quad (4-6)$$

به بیان دقیق‌تر،  $\mathcal{R}$  و  $\mathcal{T}$  به جریان احتمال اشاره دارند، اما، معرف بخشهایی از باریکه فرودی که بازتابیده و عبور کرده‌اند نیز هستند. چون احتمال پایسته است، انتظار داریم که  $\mathcal{R} + \mathcal{T} = 1$  باشد. توجه کنیم که  $\mathcal{R}$  و  $\mathcal{T}$  هم به  $\varepsilon$  و هم به مشخصات سد،  $V_0$  و  $a$ ، بستگی دارد.

#### ۴- سد مستطیلی

جنبه‌های اساسی پراکندگی در یک بعد را با به کار بردن سد پتانسیل مستطیلی،  $V(x) = V_0$  برای  $0 \leq x \leq a$  و  $V(x) = 0$  برای جاهای دیگر (شکل ۴-۳)، روشن می‌سازیم. ناپیوستگی در  $x = 0$  و  $x = a$  این سد را تا اندازه‌ای غیرفیزیکی می‌سازد. معادله شرودینگر باید در سه ناحیه زیر حل شود

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_{\varepsilon}^{\text{I}}(x) = \varepsilon \psi_{\varepsilon}^{\text{I}}(x) \quad (x < 0)$$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0 \right\} \psi_{\varepsilon}^{\text{II}}(x) = \varepsilon \psi_{\varepsilon}^{\text{II}}(x) \quad (0 \leq x \leq a)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_{\varepsilon}^{\text{III}}(x) = \varepsilon \psi_{\varepsilon}^{\text{III}}(x) \quad (a < x) \quad (۷-۴)$$

جوابهای "خارجی" به آسانی به صورت عمومی زیر به دست می آیند

$$\psi_{\varepsilon}^{\text{I}}(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad \left( k = \left( \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} \right)^{1/2} \right) \quad (۸-۴)$$

$$\psi_{\varepsilon}^{\text{III}}(x) = E e^{ikx} + F e^{-ikx}.$$

جواب "داخلی" برای  $\varepsilon > V_0$  به صورت

$$\psi_{\varepsilon}^{\text{II}}(x) = C e^{ik'x} + D e^{-ik'x} \quad \left( k' = \left( \frac{2m(\varepsilon - V_0)}{\hbar^2} \right)^{1/2} \right) \quad (۹-۴ \text{ الف})$$

و برای  $\varepsilon < V_0$  به صورت

$$\psi_{\varepsilon}^{\text{II}}(x) = C e^{Kx} + D e^{-Kx} \quad \left( K = \left( \frac{2m(V_0 - \varepsilon)}{\hbar^2} \right)^{1/2} \right) \quad (۹-۴ \text{ ب})$$

به دست می آید .

مشاهده می کنیم که شرط مجانبی  $\psi_{\varepsilon} \sim e^{ikx}$  فقط وقتی می تواند تأمین شود که در ناحیه III داشته باشیم  $F=0$  . ضرایب باقی مانده می توانند با استفاده از شرایط پیوستگی (اصل موضوع ۷) روی  $\psi_{\varepsilon}$  ، مبنی بر اینکه  $\psi_{\varepsilon}$  و مشتق آن باید در  $x=0$  و  $x=a$  پیوسته باشند ، محاسبه شوند . بنابراین برای پنج ضریب باقی مانده به چهار معادله خواهیم رسید (جدول ۴-۱) . این معادلات به طور یکتائی نسبتهای  $B/A$  و  $E/A$  را ، که توان دوم آنها به ترتیب ضرایب بازتاب و عبور را می دهند ، تعیین می کنند .

جزئیات محاسبات به عنوان تمرین واگذار می شود ولی نتایج در زیر آورده می شوند .  
برای  $\varepsilon > V_0$  خواهیم داشت

$$\mathcal{R} = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \frac{\sin^2 k'a}{(4\varepsilon/V_0)(\varepsilon/V_0 - 1)} \left[ 1 + \frac{\sin^2 k'a}{(4\varepsilon/V_0)(\varepsilon/V_0 - 1)} \right]^{-1}$$

$$\mathcal{T} = \left| \frac{E}{A} \right|^2 = \left[ 1 + \frac{\sin^2 k'a}{(4\varepsilon/V_0)(\varepsilon/V_0 - 1)} \right]^{-1} \quad (۱۰-۴ \text{ الف})$$

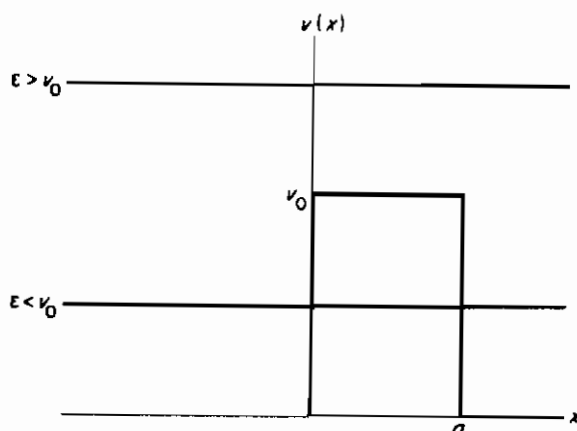


در حالی که برای  $\varepsilon < V_0$  داریم

$$\mathcal{R} = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \frac{\sinh^2 Ka}{(4\varepsilon/V_0)(1 - \varepsilon/V_0)} \left[ 1 + \frac{\sinh^2 Ka}{(4\varepsilon/V_0)(1 - \varepsilon/V_0)} \right]^{-1}$$

$$\mathcal{T} = \left| \frac{E}{A} \right|^2 = \left[ 1 + \frac{\sinh^2 Ka}{(4\varepsilon/V_0)(1 - \varepsilon/V_0)} \right]^{-1} \quad (۴-۱۵ \text{ ب})$$

خاطر نشان کنیم که  $\mathcal{R} + \mathcal{T} = 1$  در هر دو مورد برقرار است.



شکل (۴-۳). سد مستطیلی و دو انرژی پراکندگی ممکن

#### جدول (۴-۱)

استنتاج چهار معادله برای  $A, B, C, D$  و  $E$  با استفاده از شرایط پیوستگی روی  $\psi_\varepsilon$  (برای  $\varepsilon > V_0$ ).

$x = 0$	$x = a$
$\psi_\varepsilon^I(0) = \psi_\varepsilon^{II}(0)$ $A + B = C + D$	$\psi_\varepsilon^{II}(a) = \psi_\varepsilon^{III}(a)$ $C e^{ik'a} + D e^{-ik'a} = E e^{ika}$
$\psi_\varepsilon^{I'}(0) = \psi_\varepsilon^{II'}(0)$ $ik(A - B) = ik'(C - D)$	$\psi_\varepsilon^{II'}(a) = \psi_\varepsilon^{III'}(a)$ $ik'(C e^{ik'a} - D e^{-ik'a}) = ikE e^{ika}$

جوابهایی که برای مسئله سد به دست آورده ایم دارای ویژگیهای جالب زیراند:

(الف) حتی وقتی  $\varepsilon > V_0$  باشد بازتاب امکان پذیر است. این یک اثر کاملاً مکانیک کوانتومی است و باید به رفتار موج ماندی ذره نسبت داده شود. حد کلاسیکی در انرژیهای

تابشی خیلی زیاد  $^{*}(1 \gg \varepsilon/V_0)$  به دست می آید. در این مورد، (۴-۱۰)، همان طوری که انتظار می رود، دقیقاً به  $\mathcal{R} \rightarrow 0$  و  $\mathcal{T} \rightarrow 1$  تقلیل می یابد.

(ب) حتی وقتی  $\varepsilon < V_0$  باشد عبور امکان پذیر است، دلیل آن شبیه به دلیل مذکور در قسمت (الف) می باشد. حد کلاسیکی  $^{*}$  در (۴-۱۰) برای  $V_0/\varepsilon \gg 1$  رخ خواهد داد و، همان طور که انتظار می رود، منجر به  $\mathcal{T} \rightarrow 0$  و  $\mathcal{R} \rightarrow 1$  خواهد شد. امکان نفوذ به ناحیه ای که از نظر کلاسیکی ممنوع است ( $p^2 < 0$ ) پدیده مکانیک کوانتومی تونل زنی است و در تجربهای متعددی مشاهده شده است. توجه کنیم که احتمال یافتن ذره در ناحیه ای که از نظر کلاسیکی ممنوع است صفر نیست، با اینکه این احتمال در حد کلاسیکی کوچک می شود و به سمت صفر میل می کند. حالت پراکندگی که توسط (۴-۸) و (۴-۹) توصیف می شود، وضعیتی را نشان می دهد که در آن بازتاب و عبور در فاصله بسیار دوری از سد اندازه گیری می شوند. هر اندازه گیری واقعی از مشخصات ذره در ناحیه ای که از نظر کلاسیکی ممنوع است، ذره را جایگزیده می کند، سد را تغییر می دهد، و کل طبیعت مسئله را عوض می کند.

(ج) برای  $\varepsilon > V_0$ ، مجموعه ای از انرژیهای فرودی وجود دارد که برای آنها  $\mathcal{T} = 1$  ( $\mathcal{R} = 0$ ) و در نتیجه سد برای آنها "نامرئی" می شود (شکل ۴-۴). از (۴-۱۰) نتیجه می شود که این انرژیها جوابهای معادله

$$\frac{\sin^2 k'_n a}{4 \frac{\varepsilon_n}{V_0} \left( \frac{\varepsilon_n}{V_0} - 1 \right)} = 0 \quad \left( k'_n = \frac{[2m(\varepsilon_n - V_0)]^{1/2}}{\hbar} \right)$$

هستند زیرا در این حالت  $\mathcal{T}$  برابر با یک است. طرف چپ وقتی صفر می شود که داشته باشیم

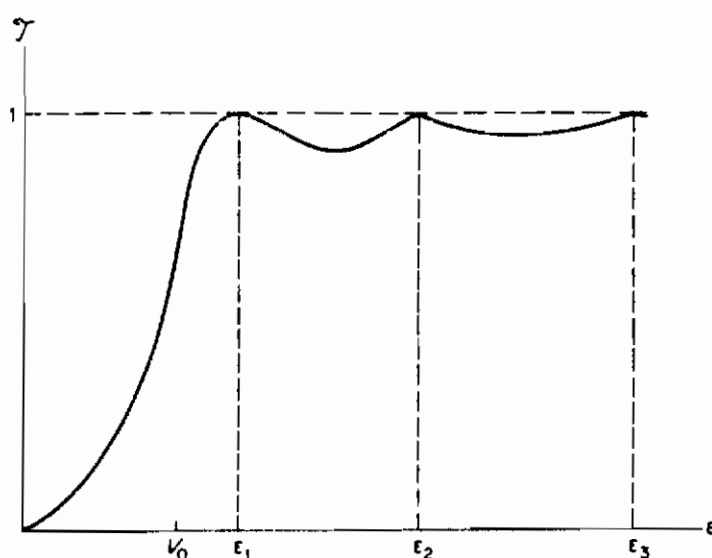
$$\frac{2\pi}{\lambda'} a = k'_n a = n\pi \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

\* به بیان دقیقتر، حد کلاسیکی باید وقتی  $\hbar \rightarrow 0$  حاصل شود. در این حد انتظار داریم که برای  $\varepsilon < V_0$  داشته باشیم  $\mathcal{T} = 0$ ،  $\mathcal{R} = 1$ ، و برای  $\varepsilon > V_0$  داشته باشیم  $\mathcal{T} = 1$ ،  $\mathcal{R} = 0$ . در موردی که  $\varepsilon < V_0$  باشد، (۴-۱۰ ب)، ملاحظه می کنیم که در حد  $\hbar \rightarrow 0$  داریم  $\sinh Ka \rightarrow \infty$  و در واقع به نتیجه کلاسیکی می رسم. اما برای  $\varepsilon > V_0$  (۴-۱۰ الف)، در موقع گرفتن حد با مشکلاتی مواجه می شویم. این مشکلات به ناپیوستگی غیرفیزیکی پتانسیل در  $x = a$  و  $x = 0$  مربوط می شود و عموماً "برای یک سد" ملایم وجود ندارد.

یا ، به بیان دیگر، که داشته باشیم

$$a = \frac{1}{2}n\lambda$$

یعنی ، وقتی که پهنای سد ضربی از نصف طول موج دوبروی در داخل سد است . این یک اثر تداخلی مکانیک کوانتومی است . بعداً خواهیم دید که با الکترونهاى که توسط اتمهای گازهای اصیل در سه بعد پراکنده می شوند پدیده مشابهی رخ خواهد داد . شفاف بودن پراکنده های اتمی برای بعضی از انرژیهای فرودی به اثر رامسور<sup>۱</sup> موسوم است .



شکل (۴-۴) . انرژیهای تشدیدى  $E_n$  در ضریب عبور . توجه کنیم که وقتی  $\mathcal{T} \rightarrow 1$  ،  $E \rightarrow \infty$  (حد کلاسیکی)

سدى که در بالا بررسی شد دارای طبیعت دافعه ( $V_0 > 0$ ) است و فقط حالت های پراکندگی را می دهد . سد جاذبه یا چاه ( $V_0 < 0$ ) نیز می تواند برای  $E > 0$  حالت های پراکندگی را بدهد . ضرایب عبور با روشی شبیه به روش مورد استفاده در سد دافعه به دست می آیند . برای انرژیهای منفی ( $E < 0$ ) ، در بخش ۹ خواهیم دید که فقط حالت های مقید در داخل چاه وجود دارند . برای این حالتها باید بخواهیم که  $\psi$  در  $x = \pm \infty$  صفر شود .

## ۵ - حالت‌های مانای مقید در یک بعد

در مسائل حالت مقید، با پیدا کردن ویژه تابعها و انرژیهای مجاز یک هامیلتونی سروکار داریم. اکنون آن جوابهایی از معادله شرودینگر

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right\} \psi_i(x) = \varepsilon_i \psi_i(x) \quad (4-11)$$

را جستجو می‌کنیم که تابع شرط مرزی  $\psi_i \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} 0$  باشند. خواهیم دید که اگر  $\varepsilon_i$  رادلخواه انتخاب کنیم جواب (4-11)، وقتی به بینهایت نزدیک می‌شویم، به سمت صفر میل نخواهد کرد. فقط برای بعضی انتخابهای  $\varepsilon = \varepsilon_i$  جوابهای قابل قبولی وجود دارد. این مطلب در واقع بیان می‌کند که چگونه طبیعت مقید بودن ویژه تابعها منجر به طیفی گسسته می‌شود. وقتی که مجموعه قابل قبول  $\varepsilon_i$  و  $\psi_i$  به دست آمد، مقادیر قابل انتظار عملگرهای متناظر با مشاهده پذیرهای مختلف می‌توانند محاسبه شوند.

در مناسبت‌های متعددی نشان خواهیم داد که طبیعت عمومی ویژه حالت‌های انرژی می‌توانند از تحلیل مشخصات هامیلتونی متناظر (به عنوان مثال، ویژگیهای تقارنی آن) پیش‌بینی شوند. مسئله را با اثبات قضیه زیر در رابطه با تبهگنی هامیلتونیهای یک بعدی شروع می‌کنیم.

قضیه ۹ - حالت‌های مقید یک هامیلتونی یک بعدی همیشه ناتبهگن‌اند\*.

اثبات (خلف) - فرض کنیم  $\psi_i$  و  $\psi_j$  دو ویژه جواب معادله شرودینگر باشند که تبهگن بوده و به طور خطی از یکدیگر مستقل‌اند، یعنی

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right\} \psi_i(x) = \varepsilon_i \psi_i(x)$$

و

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right\} \psi_j(x) = \varepsilon_j \psi_j(x)$$

---

\* این قضیه نمی‌تواند به سد بعد تعمیم داده شود. بعلاوه پتانسیلهای یک بعدی تکیه غیر فیزیکی‌ای (به عنوان مثال  $V = -1/|x|$ ) وجود دارند که دارای حالت‌های مقید می‌باشند ولی تبهگن‌اند. این پتانسیلها در اینجا مورد بحث قرار نخواهند گرفت.

با  $\varepsilon_j = \varepsilon_i = \varepsilon$  . با ضرب معادله اول در  $\psi_j$  و معادله دوم در  $\psi_i$  و کم کردن آنها از یکدیگر، خواهیم داشت

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi_i \psi_j'' - \psi_j \psi_i'') = 0$$

یا

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} (\psi_i \psi_j' - \psi_j \psi_i') = 0$$

که از آن نتیجه می‌شود\*

$$(\psi_i \psi_j' - \psi_j \psi_i') = \text{const} \quad (4-12)$$

چون، همان‌طور که برای حالت‌های مقید لازم است، داریم  $\psi_j(\infty) = \psi_i(\infty) = 0$ ، نتیجه می‌شود که ثابت فوق صفر است و برای تمام  $x$  ها خواهیم داشت

$$\psi_i \psi_j' - \psi_j \psi_i' = 0 \quad (4-13)$$

معادله (۴-۱۳) می‌تواند به صورت زیر حل شود

$$\frac{\psi_j'}{\psi_j} = \frac{\psi_i'}{\psi_i}, \quad \frac{d\psi_j}{\psi_j} = \frac{d\psi_i}{\psi_i},$$

$$\ln \psi_j = \ln \psi_i + \ln C, \quad \psi_j = C\psi_i \quad (4-14)$$

اما چون  $\psi_i$  و  $\psi_j$  هر دو بهنجار شده فرض شده‌اند نتیجه می‌شود که باید  $C$  را برابر با یک قرار دهیم و  $\psi_i$  و  $\psi_j$  در واقع یکسان‌اند، و بدین ترتیب قضیه با روش خلف اثبات می‌شود.

\* کمیت

$$W = \psi_i \psi_j' - \psi_j \psi_i' = \begin{vmatrix} \psi_i & \psi_j \\ \psi_i' & \psi_j' \end{vmatrix}$$

رنسگین<sup>۲</sup> تابعهای  $\psi_i$  و  $\psi_j$  نامیده می‌شود.

در واقع، می‌توانستیم در اثبات قضیه ۹،  $\psi_j$  را به وسیله  $\psi_i^*$  جایگزین کنیم و نتیجه بگیریم که  $\psi_i^* = \psi_i$ ، که ثابت می‌کند ویژه تابعهای مقید یک هامیلتونی یک بعدی نیز علی‌الاصول حقیقی‌اند.

از قضیه ۲ در فصل ۳ نتیجه می‌شود که ویژه تابعهای مقید یکتا هستند و دوبه‌دو متعامداند یعنی

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_j^*(x) \psi_i(x) dx = \delta_{ji}$$

## ۶- چاه نامتناهی

یک چاه نامتناهی به وسیله یک پتانسیل  $V(x)$ ، که برای  $0 \leq x \leq a$  داشته باشیم  $V(x) = 0$  و برای جاهای دیگر  $V(x) = \infty$ ، توصیف می‌شود (شکل ۴-۵). هامیلتونی یک ذره در این چاه عبارت است از  $\mathcal{H} = (p^2/2m) + V(x)$ . از نظر کلاسیکی، حرکت در اثر بازتابهای متوالی از دیوارهای چاه، در داخل چاه باقی می‌ماند. عملگر هامیلتونی متناظر فقط حالت‌های مقید را دارا می‌باشد و دارای یک طیف گسسته است. چون  $V$  برای  $x > a$  و  $x < 0$  بینهایت است، خواهیم خواست که  $\psi_n$  در همه جا در خارج از چاه صفر باشد. بنابراین باید فقط جواب داخلی  $\psi_n$  را که در رابطه

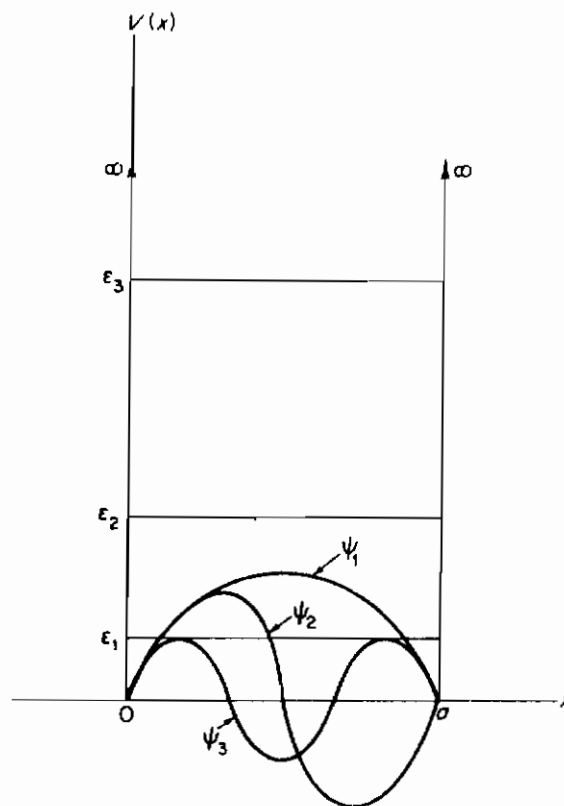
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_n = \varepsilon_n \psi_n$$

صدق می‌کند و در روی مرزها صفر می‌شود،  $\psi_n(0) = \psi_n(a) = 0$ ، پیدا کنیم. جواب عمومی عبارت است از

$$\psi_n = A_n \sin k_n x + B_n \cos k_n x \quad \left( k_n = \left( \frac{2m\varepsilon_n}{\hbar^2} \right)^{1/2} \right)$$

با اعمال شرط پیوستگی در مبدأ، یعنی،  $\psi_n(0) = 0$ ، نتیجه می‌گیریم  $B_n = 0$ . در  $x = a$  باید داشته باشیم  $\psi_n(a) = 0$  که نتیجه می‌گیریم

$$\psi_n(a) = A_n \sin k_n a = 0 \quad (4-15)$$



شکل (۵-۴). چاه بینهایت و چند ویژه مقدار و ویژه تابع آن

معادله (۱۵-۴) فقط در صورتی می‌تواند حل (غیربدیهی،  $A_n \neq 0$ ) شود که شناسه تابع سینوسی محدود به مقادیر

$$k_n a = n\pi \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

یا

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \quad (۴-۱۶)$$

باشد. این مقادیر ویژه تابعهائی به شکل  $\psi_n = A_n \sin(n\pi/a)x$  ایجاد می‌کنند. ضرایب توسط شرط بهنجارش زیر تعیین خواهند شد\*

$$\int \psi_n^* \psi_n dx = |A_n|^2 \int_0^a dx \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) = |A_n|^2 \frac{1}{2} a = 1$$

---

\* ثابت بهنجارش همواره حقیقی و مثبت در نظر گرفته خواهد شد.

یا  $A_n = (2/a)^{1/2}$  . ویژه تابعهای وابسته به چاه اکسون به شکل زیراند \*

$$\psi_n = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin \frac{n\pi}{a} x \quad (0 \leq x \leq a)$$

$$\psi_n = 0 \quad (\text{در جاهای دیگر}) \quad (۴-۱۷)$$

و ویژه مقدارهای آن ، با توجه به (۴-۱۶) ، به صورت

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}\right) n^2 \quad (۴-۱۸)$$

در می آیند . چندویژه تابع و ویژه مقدار اول در شکل (۴-۱۵) رسم شده اند . خاطرنشان کنیم که این ویژه تابعها ، همان طور که انتظار می رفت ، حقیقی و ناتبهنگانند . یک محاسبه ساده نشان می دهد که این توابع دو به دو متعامداند . جالب توجه است که انرژی حالت پایه ( $n=1$ ) صفر نیست . بعداً خواهیم دید که این پدیده یک نتیجه مستقیم از اصل عدم قطعیت است .

یک محاسبه نشان می دهد که مقدار قابل انتظار  $\hat{p}$  در حالت پایه برابر است با

$$\begin{aligned} \langle p \rangle_1 &= \langle \varepsilon_1 | \hat{p} | \varepsilon_1 \rangle = \int_0^a \psi_1^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi_1(x) dx \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{\pi}{a} x\right) \cos\left(\frac{\pi}{a} x\right) dx = 0 \end{aligned}$$

مع الوصف ، چون  $\hat{p}^2 = 2m\mathcal{H}$  (در داخل چاه) ، داریم

$$\langle p^2 \rangle_1 = 2m \langle \mathcal{H} \rangle_1 = 2m\varepsilon_1$$

لذا ، عدم قطعیت در حالت پایه خواهد شد

$$\Delta p_1 = [\langle p^2 \rangle_1 - \langle p \rangle_1^2]^{1/2} = (\langle p^2 \rangle_1)^{1/2} = (2m\varepsilon_1)^{1/2} = \frac{\hbar\pi}{a} \quad (۴-۱۹)$$

---

\* توجه کنید که مشتق  $\psi_n$  در  $x=0$  و  $x=a$  پیوسته نیست ، این امر به ناپیوستگی بینهایت  $V(x)$  در این نقاط نسبت داده می شود . به پانوشت صفحه ۹۷ رجوع کنید .



توجه کنیم که، هرچه پهنای چاه، که ذره در آن جایگزیده است، کاهش یابد، عدم قطعیت  $\beta$ ، همان طور که از اصل عدم قطعیت بر می آید، افزایش می یابد. اما چون  $\Delta p_1$  نمی تواند (برای مقدار متناهی  $a$ ) صفر شود، (۴-۱۹) ایجاب می کند که  $\varepsilon_1$  نمی تواند صفر باشد. در واقع، تساوی آخر در (۴-۱۹) می تواند برای محاسبه انرژی حالت پایه یک ذره در داخل چاهی با پهنای  $a$ ، بدون توجه به شکل مشخص آن، مورد استفاده قرار گیرد. استفاده از ویژه تابعها و انرژیهای که توسط (۴-۱۷) و (۴-۱۸) داده شده اند، ساختن "انتشار دهنده"  $G(x, x', t - t_0)$  را ممکن می سازد. حرکت یک حالت دلخواه در داخل چاه می تواند با استفاده از (۳-۹۳) تعیین شود.

#### ۷- چاه متقارن نامتناهی

تقارن هامیلتونی اغلب اوقات در ویژه حالت های آن منعکس است. این نکته را با انتقال چاه مذکور در بخش قبل به فاصله  $a/2$  در جهت منفی محور  $x$  نشان می دهیم. احساس فیزیکی به ما می گوید که در این انتقال ویژه مقدارهای انرژی دست نخورده باقی می مانند. پتانسیل جدید  $V(x)$  و ویژه تابعها با استفاده از تبدیل  $x \rightarrow x + a/2$  به دست می آیند. پتانسیل (که اینک متقارن است) و ویژه تابعها خواهند شد (شکل ۴-۶)

$$\begin{aligned} V(x) &= 0, \quad -a/2 \leq x \leq a/2 \quad \text{برای} \\ V(x) &= \infty \quad \text{در جاهای دیگر} \end{aligned}$$

و

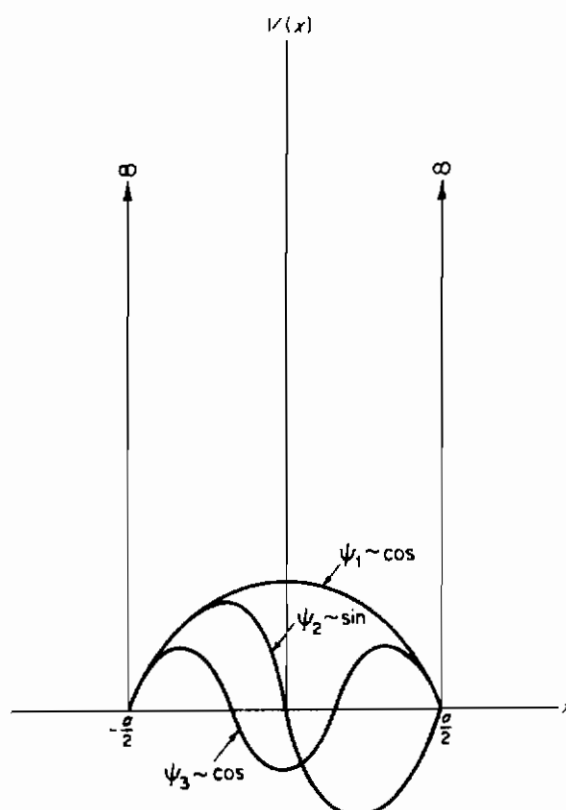
$$\psi_n(x) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin \frac{n\pi}{a} \left(x + \frac{a}{2}\right) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin \left(\frac{n\pi x}{a} + \frac{n\pi}{2}\right)$$

می بینیم که دو مجموعه جواب داریم، یعنی،

$$\psi_n(x) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \cos \frac{n\pi}{a} x \quad (n = 1, 3, 5, \dots)$$

$$(-a/2 \leq x \leq a/2)$$

$$\psi_n(x) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin \frac{n\pi}{a} x \quad (n = 2, 4, 6, \dots)$$



شکل (۴-۶). چاه متقارن نامتناهی و تقارن و پاد تقارن ویژه تابعهای آن

ویژه تابعهای کسینوسی دارای ویژگی  $\psi_n(-x) = \psi_n(x)$  هستند، یعنی، نسبت به انعکاسهای نسبت به مبدأ متقارن اند. توابع سینوسی دارای ویژگی  $\psi_n(-x) = -\psi_n(x)$  می باشند و پاد متقارن اند. در بخش بعدی خواهیم دید که توابع متقارن و پاد متقارن به ترتیب توابع با پاریته زوج و با پاریته فرد نامیده می شوند. در هر دو حالت فرد و زوج، چگالی  $|\psi_n|^2$  یک تابع زوج است. این تقارن انعکاسی تصادفی نیست، بلکه، همان طور که در زیر نشان خواهیم داد، از خاصیت تقارنی هامیلتونی ناشی می شود.

## ۸- پاریته

عملگر (هرمیتی) پاریته  $\hat{p}^*$  را که با خاصیت جابه جایی

\* عملگر پاریته یک تابع بندادی از  $\hat{p}$  و  $\hat{p}$  نیست و لذا مشابه کلاسیکی ندارد. این مثالی از یک عملگر تقارنی است.

$$\hat{P}\hat{F} = -\hat{F}\hat{P} \quad (۲۰-۴)$$

یا

$$[r, \hat{P}]_+ = 0$$

تعریف شده است وارد می‌کنیم، که در آن پاد جابه‌جاگر توسط

$$[\hat{A}, \hat{B}]_+ = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$$

تعریف شده است. معادله (۲۰-۴) وقتی  $\hat{F}$  را به وسیله  $\hat{P}$  جایگزین کنیم (رک مسئله ۴-۸) نیز صادق است. از (۲۰-۴) نتیجه می‌شود

$$\hat{P}\hat{F}(\hat{r}, \hat{p}) = \hat{F}(-\hat{r}, -\hat{p})\hat{P}$$

که در آن  $\hat{F}$  تابع دلخواهی از  $\hat{r}$  و  $\hat{p}$  است. اگر یادآوری شود که  $\hat{F}$  به وسیله یک سری تیلور تعریف شده است رابطه اخیر روشن‌تر می‌شود. اگر  $\hat{F}$  تابع زوجی از  $\hat{r}$  و  $\hat{p}$  باشد داریم  $\hat{F}(-\hat{r}, -\hat{p}) = \hat{F}(\hat{r}, \hat{p})$ . بنابراین  $\hat{P}$  با هر تابع زوجی از  $\hat{r}$  و  $\hat{p}$  جابه‌جاپذیر است، یعنی،

$$[\hat{P}, \hat{F}_{\text{even}}(\hat{r}, \hat{p})] = 0 \quad (۲۱-۴)$$

با استفاده از خواص جابه‌جاپذیری عملگر پارسته می‌توان تأثیر  $\hat{P}$  روی ویژه‌کت  $|r\rangle$  را تعیین کرد. با تأیید دادن  $\hat{P}$  روی معادله ویژه مقداری  $\hat{P}|r\rangle = r|r\rangle$  و استفاده از (۲۰-۴) خواهیم داشت

$$\begin{aligned} \hat{P}\hat{P}|r\rangle &= r\hat{P}|r\rangle \\ -\hat{r}\{\hat{P}|r\rangle\} &= r\{\hat{P}|r\rangle\} \end{aligned}$$

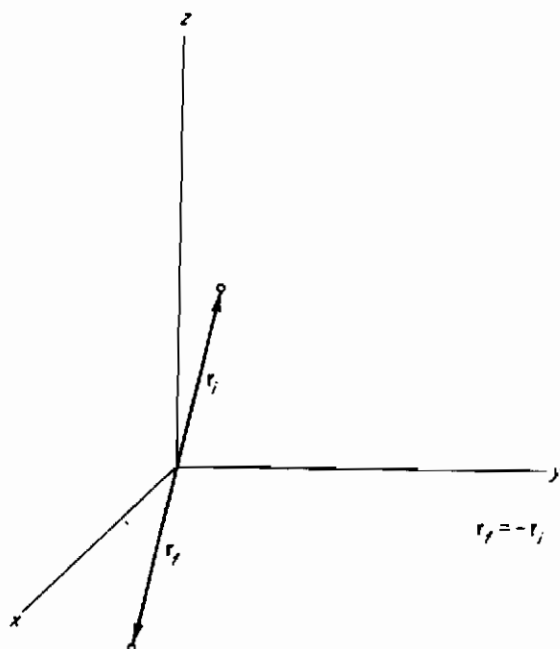
یا

$$\hat{r}\{\hat{P}|r\rangle\} = -r\{\hat{P}|r\rangle\} \quad (۲۲-۴)$$

بردار داخل پوانت‌ها یک ویژه‌کت  $\hat{r}$  با ویژه مقدار  $-r$  است، بدین ترتیب می‌توانیم اتحاد زیر را بسازیم

$$\hat{P}|r\rangle = |-r\rangle \quad (۲۳-۴)$$

بنابراین تأثیر عملگر پاریته ایجاد حالتی است که در آن ذره نسبت به مبدأ<sup>۲</sup> منعکس شده باشد (شکل ۷-۴).



شکل (۷-۴). اثر انعکاسی عملگر پاریته روی ذره‌ای که در ابتدا در  $r_i$  قرار داشته است.

با دوبار تأثیر دادن  $\hat{P}$  روی  $|r\rangle$ ، و با توجه به این که دو انعکاس متوالی معادل با یک عمل همانی است، می‌توان نوشت

$$\hat{P}\hat{P}|r\rangle = \hat{P}^2|r\rangle = |r\rangle$$

در نتیجه\*

$$\hat{P}^2 = \hat{P}\hat{P} = \hat{I} \quad (۲۴-۴)$$

از (۲۴-۴) می‌توان نتیجه گرفت (رک مسئله ۴-۱۴) که ویژه‌مقدارهای  $\hat{P}$  عبارتند از  $\pm 1$ . آن ویژه‌حالت‌های  $\hat{P}$  که وابسته به ویژه‌مقدار  $+1$  هستند حالت‌های با پاریته زوج می‌باشند. ویژه‌مقدار  $-1$  متناظر با حالت‌های با پاریته فرد است. از نظر ریاضی می‌توان نوشت

$$\hat{P}|\beta(\text{even})\rangle = +1|\beta(\text{even})\rangle$$

\* توجه کنیم که  $\hat{P}$  هم هرمیتی است و هم یکانی زیرا  $\hat{P} = \hat{P}^\dagger$  و  $\hat{P}\hat{P} = \hat{P}^\dagger\hat{P} = \hat{I}$

و

$$\hat{P}|\beta(\text{odd})\rangle = -1|\beta(\text{odd})\rangle \quad (۴-۲۵)$$

چون هامیلتونی ای که در اثر انعکاس تغییرناپذیر باشد\*  $\mathcal{H}(-\mathbf{r}) = \mathcal{H}(\mathbf{r})$  با عملگر پاریت،  $\hat{P}$ ، جابه‌جاپذیر است نتیجه می‌شود که دو عملگر باید دارای حداقل یک مجموعه ویژه بردارهای مشترک باشند. می‌توان نتیجه گرفت که هر پتانسیل متقارنی دارای حداقل یک مجموعه ویژه حالتی است که پاریته معینی دارند، یعنی، فرد یا زوج‌اند. ویژه تابع یک حالت با پاریته زوج دارای ویژگی زیر است

$$\begin{aligned} \psi_{\beta\text{even}}(\mathbf{r}) &= \langle \mathbf{r} | \beta(\text{even}) \rangle = \langle \mathbf{r} | \{ \hat{P} | \beta(\text{even}) \rangle \rangle \\ &= \{ \langle \mathbf{r} | \hat{P} \rangle | \beta(\text{even}) \rangle \} \\ &= \langle -\mathbf{r} | \beta(\text{even}) \rangle = \psi_{\beta\text{even}}(-\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (۴-۲۶)$$

یعنی، در اثر انعکاس نسبت به مبدأ تغییرناپذیر است. به‌طریق مشابهی می‌توان نشان داد که برای حالت‌های با پاریته فرد داریم

$$\psi_{\beta\text{odd}}(\mathbf{r}) = -\psi_{\beta\text{odd}}(-\mathbf{r}) \quad (۴-۲۷)$$

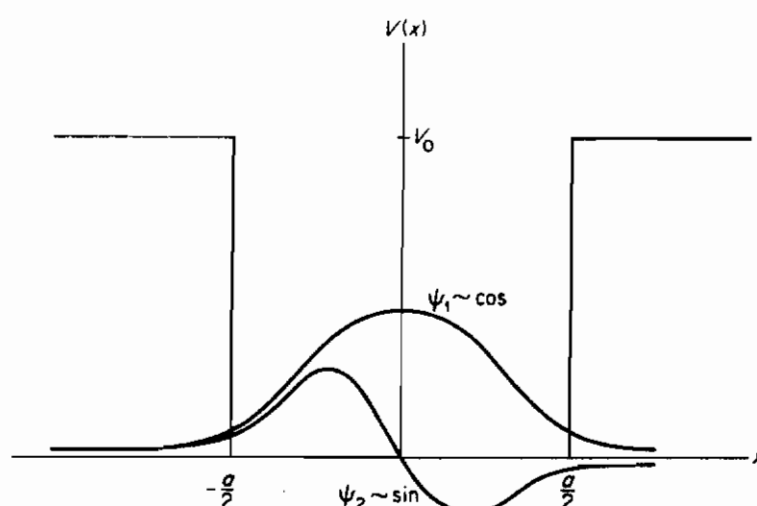
چون ویژه‌حالت‌های مقید یک بعدی ناتبه‌گن و بنابراین یکتا هستند، نتیجه می‌شود که حالت‌هایی که متعلق به یک هامیلتونی متقارن هستند لزوماً "پاریته معینی دارند؛ زوج یا فرداند."

## ۹- چاه متقارن متناهی

برای نشان دادن اینکه چگونه تقارن برای ساده‌کردن مسئله مورد استفاده قرار می‌گیرد، ذره‌ای را که در یک چاه متقارن متناهی،  $V(x) = 0$  برای  $-a/2 \leq x \leq a/2$  و  $V(x) = V_0$  در جاهای دیگر (شکل ۴-۸)، مقید است در نظر می‌گیریم.

---

\* چون فرض می‌کنیم هامیلتونی به‌صورت  $\mathcal{H} = (\hat{p}^2/2m) + \hat{V}(\mathbf{r})$  است،  $\mathcal{H}$  خودبخود نسبت به جایگزینی  $\hat{p}$  به‌وسیله  $-\hat{p}$  تغییرناپذیر است. به عبارت دیگر انرژی جنبشی همیشه با عملگر پاریته جابه‌جاپذیر است.



شکل (۴-۸). چاه متقارن متناهی و تعدادی از ویژه تابعهای آن

بحث خود را به حالت‌های مقیدی که برای آن‌ها  $V_0 < \epsilon$  است محدود می‌کنیم. معادله شرودینگر دارای جوابهای عمومی زیر است

$$\begin{aligned}\psi_n^I(x) &= C_n e^{K_n x} + E_n e^{-K_n x} & (x < -a/2) \\ \psi_n^{II}(x) &= A_n \sin k_n x + B \cos k_n x & (-a/2 \leq x \leq a/2) \\ \psi_n^{III}(x) &= D_n e^{-K_n x} + F_n e^{K_n x} & (a/2 < x)\end{aligned} \quad (28-4)$$

که در آن‌ها

$$k_n = \left( \frac{2m\epsilon_n}{\hbar^2} \right)^{1/2} \quad \text{و} \quad K_n = \left( \frac{2m(V_0 - \epsilon_n)}{\hbar^2} \right)^{1/2} \quad (29-4)$$

چون حالت‌های مقید ایجاب می‌کنند که  $\psi_n(\pm\infty) = 0$ ، باید در جوابهای خارجی قرار دهیم  $E_n = F_n = 0$ . سپس، خاطرنشان می‌کنیم که ویژه تابعهای مقیدیک هامیلتونی متقارن یک بعدی باید یا دارای پاریته فرد (پاد متقارن) باشند یا دارای پاریته زوج (متقارن). توابع زوج را می‌توان، با توجه به اینکه رابطه  $\psi_n(-x) = \psi_n(x)$  در صورتی برقرار است که داشته باشیم  $A_n = 0$  و  $C_n = D_n$ ، ایجاد کرد. بهتر است که به این حالتها اعداد کوانتومی فرد را نسبت دهیم، دلیل این کار به زودی روشن خواهد شد. بنابراین ویژه تابعهای زوج دارای شکل زیراند

$$\begin{aligned}\psi_n^I &= D_n e^{K_n x} \\ \psi_n^{II} &= B_n \cos k_n x \quad (n = 1, 3, 5, \dots; \text{پارितه زوج}) \\ \psi_n^{III} &= D_n e^{-K_n x}\end{aligned} \quad (30-4 \text{ الف})$$

با نسبت دادن اعداد زوج به توابع فرد و با توجه به اینکه  $\psi_n(-x) = -\psi_n(x)$  ایجاب می‌کند که  $B_n = 0$  و  $C_n = -D_n$  باشد، خواهیم داشت

$$\begin{aligned}\psi_n^I &= C_n e^{K_n x} \\ \psi_n^{II} &= A_n \sin k_n x \quad (n = 2, 4, 6, \dots; \text{پاریته فرد}) \\ \psi_n^{III} &= -C_n e^{-K_n x}\end{aligned} \quad (30-4 \text{ ب})$$

برای هر حالت پاریته، می‌خواهیم که ویژه تابع و مشتق آن در  $x = \pm a/2$  پیوسته باشد. به علت تقارن  $\psi_n$ ، پیوستگی در  $x = +a/2$  خود به خود پیوستگی در  $x = -a/2$  را تأمین می‌کند. شرایط لازم برای پیوستگی در  $x = a/2$  در جدول (۲-۴) خلاصه شده‌اند. با تقسیم (ب) بر (الف) در جدول (۲-۴)، روابط زیر را به دست می‌آوریم

$$k_n \tan \frac{1}{2} k_n a = K_n \quad (31-4 \text{ الف})$$

$$k_n \cot \frac{1}{2} k_n a = -K_n \quad (31-4 \text{ ب})$$

به علاوه، می‌توان از (الف) برای بیان  $C_n$  یا  $D_n$  بر حسب  $B_n$  یا  $A_n$  استفاده کرد. در این صورت ویژه تابعها به صورت زیر در خواهند آمد

$$\begin{aligned}\psi_n^I &= B_n (e^{K_n a/2} \cos \frac{1}{2} k_n a) e^{K_n x} \\ \psi_n^{II} &= B_n \cos k_n x \quad (n = 1, 3, 5, \dots; \text{پاریته زوج}) \\ \psi_n^{III} &= B_n (e^{K_n a/2} \cos \frac{1}{2} k_n a) e^{-K_n x}\end{aligned} \quad (32-4 \text{ الف})$$

و

$$\begin{aligned}\psi_n^I &= -A_n (e^{K_n a/2} \sin \frac{1}{2} k_n a) e^{K_n x} \\ \psi_n^{II} &= A_n \sin k_n x \quad (n = 2, 4, 6, \dots; \text{پاریته فرد}) \\ \psi_n^{III} &= A_n (e^{K_n a/2} \sin \frac{1}{2} k_n a) e^{-K_n x}\end{aligned} \quad (32-4 \text{ ب})$$

جدول (۲-۴)

پارितه زوج		پارितه فرد	
a.	$\psi_n''(a/2) = \psi_n'''(a/2)$ $B_n \cos \frac{1}{2}k_n a = C_n e^{-K_n a/2}$	a.	$\psi_n''(a/2) = \psi_n'''(a/2)$ $A_n \sin \frac{1}{2}k_n a = D_n e^{-K_n a/2}$
b.	$\psi_n''(a/2) = \psi_n'''(a/2)$ $-k_n B_n \sin \frac{1}{2}k_n a = -K_n C_n e^{-K_n a/2}$	b.	$\psi_n''(a/2) = \psi_n'''(a/2)$ $k_n A_n \cos \frac{1}{2}k_n a = -K_n D_n e^{-K_n a/2}$

ضرایب  $A_n$  و  $B_n$  به وسیله شرایط بهنجارش تعیین می‌شوند. وقتی  $\epsilon_n$  ( $k_n$  و  $K_n$ ) تعیین شد، ویژه تابعها به طور یکتائی به دست خواهند آمد. این ویژه مقادیرهای انرژی از (۳۱-۴ الف) و (۳۱-۴ ب) به دست می‌آیند. چون این معادلات غیرجبری هستند، بهترین روش برای حل آنها روش ترسیمی است. قرار می‌دهیم

$$R = \left( \frac{mV_0 a^2}{2\hbar^2} \right)^{1/2} \quad \text{و} \quad \xi_n = \left( \frac{m\epsilon_n a^2}{2\hbar^2} \right)^{1/2} \quad (۳۳-۴)$$

(۳۱-۴ الف) و (۳۱-۴ ب) برحسب آنها خواهند شد

$$\xi_n \tan \xi_n = (R^2 - \xi_n^2)^{1/2} \quad \text{و} \quad -\xi_n \cot \xi_n = (R^2 - \xi_n^2)^{1/2}$$

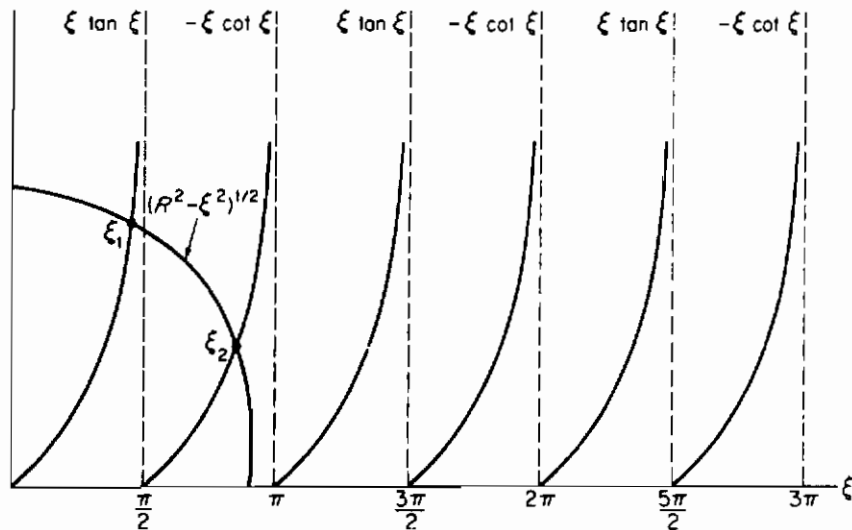
جوابهای  $\xi_n$  ویژه مقادیرهای انرژی  $\epsilon_n$  در (۳۳-۴) را به دست می‌دهند و خودشان به وسیله نقاط تقاطع تابع دایره‌ای  $(R^2 - \xi^2)^{1/2}$  با توابع مثلثاتی  $\xi \tan \xi$  و  $\xi \cot \xi$  (شکل ۹-۴) به دست می‌آیند.

بنابراین می‌توانیم ویژه تابعها را با تناوب حالت‌های با پاریته زوج و فرد، یعنی، برای  $n=1, 2, 3, \dots$  برای حالت‌های با پاریته زوج و  $n=2, 4, 6, \dots$  برای حالت‌های با پاریته فرد، مرتب کنیم. ملاحظه می‌کنیم که اولین جواب  $\xi_1$  (پاریته زوج) متناظر است با حالت پایه، در حالی که دومین جواب  $\xi_2$  (پاریته فرد) متعلق است به اولین حالت برانگیخته، و سومین جواب  $\xi_3$  باز هم متعلق است به پاریته زوج، و الی آخر.

هرچه چاه عمیق‌تر، یعنی  $V_0$  بزرگتر باشد، شعاع  $R$  تابع دایره‌ای بزرگتر است، و بنابراین نقاط تقاطع زیادتری با توابع مثلثاتی داریم، و در نتیجه، حالت‌های مقیدزیادتری خواهیم داشت. از شکل (۹-۴) می‌توان نشان داد که همیشه حداقل یک نقطه تقاطع وجود دارد، به طوری که حتی در تنگترین چاهها حداقل یک حالت مقید وجود دارد، و پاریته آن



زوج است.



شکل (۹-۴). حل ترسیمی برای ویژه مقادیرهای یک چاه متقارن متناهی

بالاخره، با در نظر گرفتن حد  $V_0 \rightarrow \infty$ ، ارتباط آنرا با چاه بینهایت تحقیق می‌کنیم از (۲۹-۴) نتیجه می‌شود که  $K_n \rightarrow \infty$  و جوابهای خارجی در (۳۰-۴) در حقیقت هم برای حالتهای زوج و هم برای حالتهای فرد صفر می‌شوند. به علاوه، شعاع تابع دایره‌ای (شکل ۹-۴) به سمت بینهایت میل می‌کند، و توابع  $\xi \tan \xi$  و  $\xi \cot \xi$  را در نقاط مجانبی  $\xi_n = \frac{1}{2}n\pi$  قطع می‌کند. ویژه مقادیرها، از (۳۳-۴)، به صورت

$$\frac{m\varepsilon_n a^2}{2\hbar^2} = \xi_n^2 = \frac{1}{4}n^2\pi^2$$

یا

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2$$

به دست می‌آیند. این نتیجه با نتایج قبلی برای ویژه مقادیرهای انرژی یک چاه بینهایت مطابقت می‌کند.

## ۱۰ - نوسانگر هماهنگ

مکانیک کوانتومی یک ذره که به وسیله یک پتانسیل کشسان  $\frac{1}{2}kx^2$  به طرف مرکزکشیده

می‌شود هم دارای اهمیت عملی و هم دارای اهمیت آموزشی است. در مسائل فیزیکی که تابش الکترومغناطیسی، ارتعاشات شبکه‌ای در جامدات، و ارتعاشات مولکولی را در بر دارند، حرکات می‌توانند به نوسانات ساده یک‌بعدی تجزیه شوند. نخست ویژه مقادارها و ویژه تابعها را در مکانیک موجی شرودینگر به دست می‌آوریم، سپس ثابت می‌کنیم که این جوابها می‌توانستند با استفاده از صورتبندی عملگری به دست آیند. معادله شرودینگر برای نوسانگر عبارت است از

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right\} \psi_n = \varepsilon_n \psi_n \quad (۴-۳۴)$$

که در آن  $\omega^2 = k/m$ . همان‌طور که قبلاً ثابت کردیم، این هامیلتونی متقارن فقط حالت‌های مقید را تأمین می‌کند و بنابراین دارای یک طیف گسسته است. ویژه تابعها نیز حقیقی، ناتبه‌گن، یکتا، متقابل، متعامد، و با پاریمت معین می‌باشند.

با وارد کردن متغیر بدون بعد  $\xi = \sqrt{\alpha} x$ ، که در آن  $\alpha = m\omega/\hbar$  است، (۴-۳۴) خواهد

شد

$$\frac{d^2 \psi_n(\xi)}{d\xi^2} + \left( \frac{\lambda_n}{\alpha} - \xi^2 \right) \psi_n(\xi) = 0 \quad (۴-۳۵)$$

با  $\lambda_n = 2m\varepsilon_n/\hbar^2$ . فقط آن جوابهایی که در شرط  $\psi_n(\pm\infty) = 0$  صدق‌کنند قابل قبول‌اند. خواهیم دید که اگر  $\varepsilon$  را به دلخواه انتخاب کنیم، جواب (۴-۳۵) معمولاً در بینهایت واگرا می‌شود. بنابراین، ویژه مقادارهای انرژی برای مسئله، آنهایی هستند که برای آنها (۴-۳۵) دارای جوابهایی باشد که در بینهایت صفر شوند.

روش حل (۴-۳۵) بر نظریه متعارف معادلات دیفرانسیل، که برای دانشجویان ریاضی شناخته شده است، پایه‌گذاری شده است. ما با این فرض شروع می‌کنیم که جوابی به شکل

$$\psi = G(\xi)H(\xi) \quad (۴-۳۶)$$

وجود دارد که در آن  $G(\xi)$  تابعی است که رفتار  $\psi$  را برای مقادیر بزرگ  $|\xi|$  تشریح می‌کند و  $H(\xi)$  یک سری بینهایت است. تابع  $G(\xi)$  جواب مجانبی نامیده می‌شود و می‌تواند با بررسی رفتار معادله دیفرانسیل در فاصله بسیار دور از مبدأ به دست آید. برای مقدار مجانبی  $\xi (|\xi| \rightarrow \infty)$  می‌توان قرار داد  $\lambda_n/\alpha \gg \xi^2$  و (۴-۳۵) را به صورت

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} - \xi^2\psi \simeq 0$$

نوشت که دوجواب مجانبی آن که به طور خطی از یکدیگر مستقل اند عبارتند از  $e^{\xi^2/2}$  و  $e^{-\xi^2/2}$ . جواب اول در بینهایت واگرا می شود و منجر به ویژگی تابعی می شود که برای حالت های مقید غیرقابل قبول اند. معادله (۴-۳۶) پیشنهاد می کند که یک جواب آزمایشی به شکل  $\psi = e^{-\xi^2/2} H(\xi)$  به کار ببریم، که در آن صورت (۴-۳۵) خواهد شد

$$\frac{d^2 H(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH(\xi)}{d\xi} + \left(\frac{\lambda_n}{\alpha} - 1\right) H(\xi) = 0 \quad (4-37)$$

معادله (۴-۳۷) معادله دیفرانسیل هرمیت است. بنا به فرض،  $H(\xi)$  باید بتواند به صورت یک سری بینهایت به شکل

$$H = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j \quad (4-38)$$

بیان شود. با قراردادن (۴-۳۸) در معادله هرمیت و مشتق گیری از هر جمله سری، خواهیم داشت

$$\sum_{j=2}^{\infty} j(j-1)a_j \xi^{j-2} - 2\xi \sum_{j=1}^{\infty} j a_j \xi^{j-1} + \left(\frac{\lambda_n}{\alpha} - 1\right) \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j = 0$$

یا، با مجتمع کردن توان های یکسان  $\xi^j$ ،

$$\sum_{j=0}^{\infty} \left\{ (j+1)(j+2)a_{j+2} + \left[ \frac{\lambda_n}{\alpha} - (1+2j) \right] a_j \right\} \xi^j = 0 \quad (4-39)$$

چون (۴-۳۹) باید برای تمام مقادیر  $\xi$  صادق باشد نتیجه می شود که هر کدام از ضرایب باید جداگانه صفر شود، و بدین ترتیب معادله بازگشتی دوجمله ای زیر را به دست می آوریم

$$a_{j+2} = - \left[ \frac{(\lambda_n/\alpha) - (1+2j)}{(j+1)(j+2)} \right] a_j \quad (4-40)$$

با انتخاب مقدار دلخواهی برای  $a_0$ ، یک جواب برای (۴-۳۷) به دست می آوریم. معادله

(۴-۴) می‌تواند برای بیان تمام ضرایب زوج متوالی برحسب  $a_0$  مورد استفاده قرار گیرد. به عنوان مثال، برای  $j = 0$  و  $j = 2$ ، به ترتیب داریم

$$a_2 = - \left[ \frac{(\lambda_n/\alpha) - 1}{2} \right] a_0$$

و

$$a_4 = \frac{-[(\lambda_n/\alpha) - 5]}{12} a_2 = \frac{[(\lambda_n/\alpha) - 5]}{12} \frac{[(\lambda_n/\alpha) - 1]}{2} a_0$$

به این طریق یک سری زوج به شکل

$$H^{\text{even}}(\xi) = a_0 \left[ 1 - \frac{((\lambda_n/\alpha) - 1)}{2} \xi^2 + \frac{((\lambda_n/\alpha) - 5)((\lambda_n/\alpha) - 1)}{(12)(2)} \xi^4 - \dots \right] \quad (41-4)$$

ایجاد می‌کنیم. اگر برای  $a_1$  مقدار دلخواهی انتخاب کنیم، جوابی به صورت سری فرد

$$H^{\text{odd}}(\xi) = a_1 \left[ \xi - \frac{((\lambda_n/\alpha) - 3)}{6} \xi^3 + \frac{((\lambda_n/\alpha) - 3)((\lambda_n/\alpha) - 7)}{(6)(20)} \xi^5 - \dots \right] \quad (42-4)$$

به دست می‌آوریم. چون  $a_0$  و  $a_1$  دلخواه هستند، و دوسری به طور خطی از یکدیگر مستقل‌اند، جواب عمومی معادله هرمیت به شکل  $H_{\text{general}}(\xi) = H^{\text{even}}(\xi)$  است. در این صورت جواب معادله شرودینگر (۳۵-۴) عبارت است از

$$\psi_{\text{general}}(\xi) = e^{-\xi^2/2} [H_{\text{even}}(\xi) + H_{\text{odd}}(\xi)] \quad (43-4)$$

و برای هر مقداری از  $\lambda_n/\alpha$  معتبر است.

متأسفانه، تا اینجا هنوز کوانتش ظاهر نشده است. علت آن این است که (۴۳-۴) هنوز در شرایط مرزی مطلوب در بینهایت صدق نمی‌کند. در واقع، یک مقایسه آزمایشی نشان می‌دهد که برای  $|\xi| \gg 1$ ، هم سری زوج و هم سری فرد حداقل با سرعت تابع  $e^{\xi^2}$  به سمت بینهایت میل می‌کنند. در نتیجه، برای مقادیر بزرگ  $\xi$  داریم

$$\psi = e^{-\xi^2/2} H(\xi) \sim e^{-\xi^2/2} e^{\xi^2} \rightarrow \infty \quad |\xi| \rightarrow \infty$$

و نتیجه می‌شود که  $\psi$  در بینهایت واگرا است و بنابراین غیرقابل قبول است.

اکنون جواب (۴-۳۵) را وقتی که

$$\frac{\lambda_n}{\alpha} = 2n + 1 \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

باشد بررسی می‌کنیم. اگر  $n$  زوج باشد، معادله بازگشتی (۴-۳۵) نشان می‌دهد که  $a_{n+2}$  و تمام ضرایب بالاتر صفر می‌شوند. در این صورت، جواب وابسته به  $n$  زوج به صورت

$$\psi = e^{-\xi^2/2} (H_n(\text{چند جمله‌ای زوج از درجه } n) + H^{\text{odd}}(\text{سری}))$$

در می‌آید. چون دیدیم که سری (فرد) منجر به جواب غیرقابل قبولی می‌شود، فقط چند جمله‌ای (زوج) را نگه می‌داریم (یعنی، قرار می‌دهیم  $a_1 = 0$ ). به همین طریق اگر  $n$  فرد باشد، فقط جملات فرد را، که منجر به یک چندجمله‌ای (فرد) از درجه  $n$  می‌شوند، نگاه می‌داریم. کاملاً معلوم است که  $e^{-\xi^2/2}$  برای مقادیر بزرگ  $|\xi|$  به هر چند جمله‌ای غلبه می‌کند؛ در نتیجه، فقط برای وقتی که  $\lambda_n/\alpha = 2n + 1$  باشد ویژه تابعهای قابل قبولی به دست خواهیم آورد. با استفاده از تعریفهای  $\lambda_n$  و  $\alpha$  نتیجه می‌گیریم که ویژه تابعهای مقید فقط برای انرژیهای

$$\frac{\lambda_n}{\alpha} = \frac{2\varepsilon_n}{\hbar\omega} = 2n + 1$$

یا

$$\varepsilon_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (۴-۴۴)$$

وجود دارند. ویژه تابعها به شکل

$$\psi_n(\xi) = e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) \quad (۴-۴۵)$$

که در آن  $H_n(\xi)$  یک چندجمله‌ای زوج یا فرد از درجه  $n$  است، در می‌آیند. چون  $e^{-\xi^2/2}$  تابع زوجی است، زوج یا فرد بودن پارامتر بستگی به مقدار  $n$  دارد. ضرایب به کمک (۴-۴۵) وقتی که  $a_0$  و  $a_1$  مشخص شده باشند، تعیین می‌شوند. به طور قراردادی قرار می‌دهیم

$$a_0^{(n)} = \frac{(-1)^{n/2} n!}{[\frac{1}{2}n]!} \quad (n \text{ زوج})$$

$$a_1^{(n)} = \frac{(-1)^{(n-1)/2} 2(n!)}{[\frac{1}{2}(n-1)]!} \quad (n \text{ فرد})$$

که در این حالت،  $H_n(\xi)$  تبدیل به چند جمله‌ای هرمیت می‌شود. تعدادی از چند جمله‌ایهای اول عبارتند از

$$\begin{aligned} H_0 &= 1 & H_1 &= 2\xi \\ H_2 &= -2 + 4\xi^2 & H_3 &= -12\xi + 8\xi^3 \\ H_4 &= 12 - 48\xi^2 + 16\xi^4 & H_5 &= 120\xi - 160\xi^3 + 32\xi^5 \end{aligned} \quad (4-46)$$

ویژه تابعها برحسب این چندجمله‌ایهای هرمیت به شکل

$$\psi_n(\xi) = N_n e^{-\xi^2/2} H_n(\xi)$$

یا

$$\psi_n(x) = N_n e^{-\alpha x^2/2} H_n(\sqrt{\alpha} x), \quad (4-47 \text{ الف})$$

در می‌آیند، که در آنها ثابت بهنجارش عبارت است از

$$N_n = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \left(\frac{1}{2^n n!}\right)^{1/2} \quad (4-47 \text{ ب})$$

چند ویژه تابع بهنجار شده و ویژه مقدارهای اول نوسانگر عبارتند از

$$\begin{aligned} \psi_0 &= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2} [1] & (\varepsilon_0 &= \frac{1}{2} \hbar \omega) \\ \psi_1 &= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{1}{2}} e^{-\alpha x^2/2} [2\sqrt{\alpha} x] & (\varepsilon_1 &= \frac{3}{2} \hbar \omega) \\ \psi_2 &= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{1}{8}} e^{-\alpha x^2/2} [4\alpha x^2 - 2] & (\varepsilon_2 &= \frac{5}{2} \hbar \omega) \end{aligned} \quad (4-48)$$

توجه کنیم که ویژه مقدارهای متوالی به‌طور مساوی به‌وسیله انرژی  $\hbar\omega$  از یکدیگر جدا شده‌اند. بنابراین، طبیعت عمومی طیف با فرضیه پلانک که در فصل اول مورد بحث قرار گرفت مطابقت دارد. در ذیل ثابت خواهیم کرد که وجود یک انرژی نقطه صفر،  $\varepsilon_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$ ، که در

نظریه پلانک غایب است، در اینجا به عنوان نتیجه مستقیمی از اصل عدم قطعیت ظاهر می شود، همان طور که در مورد چاه پتانسیل ظاهر شد.

### ۱۱ - خواص ویژه تابعهای نوسانگر

محاسبات عناصر ماتریس، با استفاده از خواص چند جمله ایهای هرمیت که در زیر آمده اند، آسان می شود

$$(۱) \quad e^{\xi^2 - (z - \xi)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(\xi) \frac{z^n}{n!} \quad (\text{تابع مولد})$$

$$(۲) \quad H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2}) \quad (\text{فرمول رودریگز})$$

$$(۳) \quad H_{n+1}(\xi) - 2\xi H_n(\xi) + 2n H_{n-1}(\xi) = 0 \quad (۴۹ - ۴)$$

$$(۴) \quad H_n'(\xi) = 2n H_{n-1}(\xi)$$

$$(۵) \quad H_n''(\xi) = 4n(n-1)H_{n-2}(\xi).$$

به عنوان مثال، عناصر ماتریس  $\hat{x}$  می توانند به صورت

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon_m | \hat{x} | \varepsilon_n \rangle &= \int \psi_m^*(x) x \psi_n(x) dx \\ &= \frac{1}{\alpha} \int \psi_m^*(\xi) \xi \psi_n(\xi) d\xi \end{aligned} \quad (۵۰ - ۴)$$

بیان شوند. با ضرب کردن دو طرف خاصیت (۳)ی بالا در  $e^{-\xi^2/2}$  رابطه زیر را به دست می آوریم

$$\xi e^{-\xi^2/2} H_n = n e^{-\xi^2/2} H_{n-1} + \frac{1}{2} e^{-\xi^2/2} H_{n+1}$$

$$\xi \frac{\psi_n}{N_n} = n \frac{\psi_{n-1}}{N_{n-1}} + \frac{1}{2} \frac{\psi_{n+1}}{N_{n+1}}$$

یا

$$\xi \psi_n = n \frac{N_n}{N_{n-1}} \psi_{n-1} + \frac{1}{2} \frac{N_n}{N_{n+1}} \psi_{n+1} \quad (۵۱ - ۴)$$

با قراردادن (۵۱-۴) در (۵۰-۴)، عنصر ماتریس خواهد شد

$$\begin{aligned}\langle \varepsilon_m | \hat{x} | \varepsilon_n \rangle &= \frac{N_n}{N_{n-1}} \frac{n}{\alpha} \int \psi_m^* \psi_{n-1} d\xi + \frac{N_n}{2N_{n+1}\alpha} \int \psi_m^* \psi_{n+1} d\xi \\ &= \frac{N_n}{N_{n-1}} \frac{n}{\sqrt{\alpha}} \int \psi_m^* \psi_{n-1} dx + \frac{N_n}{2N_{n+1}\sqrt{\alpha}} \int \psi_m^* \psi_{n+1} dx \\ &= \frac{N_n}{N_{n-1}} \frac{n}{\sqrt{\alpha}} \delta_{m,n-1} + \frac{N_n}{2N_{n+1}} \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \delta_{m,n+1} \quad (52-4)\end{aligned}$$

بنابراین تنها عناصر غیرصفر ماتریس عبارتند از

$$\langle \varepsilon_{n-1} | \hat{x} | \varepsilon_n \rangle = \frac{N_n n}{N_{n-1}\sqrt{\alpha}} = \left(\frac{n}{2\alpha}\right)^{1/2} = \left(\frac{n\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2} \quad (53-4 \text{ الف})$$

و

$$\langle \varepsilon_{n+1} | \hat{x} | \varepsilon_n \rangle = \frac{N_n}{N_{n+1}} \frac{1}{2\sqrt{\alpha}} = \left(\frac{n+1}{2\alpha}\right)^{1/2} = \left[\frac{(n+1)\hbar}{2m\omega}\right]^{1/2} \quad (53-4 \text{ ب})$$

عملگر  $\hat{x}$  می‌تواند در ویژه پایه  $\mathcal{H}$  به صورت

$$\hat{x} \rightarrow \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

ویژه پایه  $\mathcal{H}$

نمایش داده شود. از (۵۲-۴) دیده می‌شود که عناصر قطری ماتریس صفراند و داریم  $\langle \varepsilon_n | \hat{x} | \varepsilon_n \rangle = 0$ ؛ بنابراین مکان متوسط ذره‌ای که در یک ویژه حالت نوسانگر قرار دارد در مبداء است. یک محاسبه که خاصیت (۴) فوق را درگیر می‌کند نشان می‌دهد که متوسط تکانه در هر حالت نیز صفر است (رک مسئله ۳-۸)، یعنی،  $\langle p \rangle_n = 0$ . محاسبه مقادیر قابل انتظار



$\langle x^2 \rangle_n$  و  $\langle p^2 \rangle_n$  به این سادگیها نیست. از قضیه ویریا<sup>\*</sup> در مکانیک کلاسیکی، که بیان می‌کند میانگین‌های زمانی  $T$  و  $V$  برای یک نوسانگر با یکدیگر برابرند، استفاده خواهیم کرد. با تعمیم این قضیه به مقادیر قابل انتظار کوانتومی، می‌توانیم برای تمام حالت‌های نوسانگر قرار دهیم  $\langle T \rangle_n = \langle V \rangle_n$ . اما چون  $\langle T + V \rangle_n = \langle \mathcal{H} \rangle_n = \epsilon_n$  نتیجه می‌شود  $\langle T \rangle_n = \langle V \rangle_n = \frac{1}{2}\epsilon_n$  که از آن نتیجه می‌گیریم

$$\langle T \rangle_n = \frac{1}{2m} \langle p^2 \rangle_n = \frac{1}{2}\epsilon_n = \frac{1}{2}\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$$

و

$$\langle V \rangle_n = \frac{1}{2}m\omega^2 \langle x^2 \rangle_n = \frac{1}{2}\epsilon_n = \frac{1}{2}\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$$

با استفاده از این نتایج عدم قطعیت متغیرهای بندادی می‌توانند به صورت

$$\Delta p_n = [\langle p^2 \rangle_n - \langle p \rangle_n^2]^{1/2} = [(n + \frac{1}{2})\hbar m\omega]^{1/2}$$

و

$$\Delta x_n = [\langle x^2 \rangle_n - \langle x \rangle_n^2]^{1/2} = [(n + \frac{1}{2})\hbar/m\omega]^{1/2}$$

بیان شوند. بنابراین حاصل ضرب عدم قطعیتها در  $n$  امین حالت نوسانگر عبارت است از

$$\Delta x_n \Delta p_n = (n + \frac{1}{2})\hbar \quad (۴-۵۴)$$

توجه کنیم که در هیچ حالتی این حاصل ضرب، همان‌طور که اصل عدم قطعیت ایجاب می‌کند، کوچکتر از  $\frac{1}{2}\hbar$  نخواهد بود، در واقع حد پائینی در حالت پایه ( $n=0$ ) حاصل می‌شود. اگر انرژی نقطه صفر  $\frac{1}{2}\hbar\omega$  نبود ( $۴-۵۴$ ) به صورت  $\Delta p_n \Delta x_n = n\hbar$  در می‌آمد، که در این صورت اصل عدم قطعیت در حالت پایه نقض می‌شد.

\* برای بحث در باره "قضیه ویریا" به کتاب زیر مراجعه کنید

J. Marion, "Classical Dynamics of Particles" 2nd ed.

Academic Press, New York, 1970

یا به مسائل ۲-۳ و ۴-۱۰ مراجعه کنید.

## ۱۲ - نوسانات در حالت‌های غیرمانا - تناظر کلاسیکی

اگر ذره‌ای تحت تاثیر یک نیروی بازگرداننده کشسان قرار داشته باشد و حالت اولیه آن به وسیله یک ویژه حالت (مانای)  $\psi$  مشخص شود، مقادیر قابل انتظار  $\hat{p}$  و  $\hat{x}$  مانا هستند و در تمام زمانها داریم  $\langle p \rangle = 0$  و  $\langle x \rangle = 0$ . با این وجود اگر حالت اولیه ذره (در  $t = t_0 = 0$ ) یک حالت دلخواه  $\psi_n \neq \Psi(x)$  باشد تحول آن به وسیله

$$\Psi(x, t) = \int G(x, x', t) \Psi(x') dx' \quad (4-55)$$

تعیین می‌شود، که در آن "انتشاردهنده"  $*$ ، با توجه به (۳-۴۹)، (۴-۴۴) و (۴-۴۷)، عبارت است از

$$\begin{aligned} G(x, x', t) &= \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n^*(x') \psi_n(x) \exp \frac{-i\varepsilon_n t}{\hbar} \\ &= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{2^n n!}\right) \exp\left[-\frac{1}{2}\alpha(x^2 + x'^2)\right] H_n(\sqrt{\alpha}x) \\ &\quad \cdot H_n(\sqrt{\alpha}x') \exp[-i(n + \frac{1}{2})\omega t] \end{aligned}$$

به علت وجود ضریب نیمه صحیح  $(n + \frac{1}{2})$  در توان عامل نوسانی، نتیجه می‌شود که انتشاردهنده دارای دوره تناوبی است که دو برابر دوره تناوب کلاسیکی  $\tau_{\text{class}} = 2\pi/\omega$  است. در واقع، بعد از گذشت زمان  $\tau_{\text{class}}$ ، انتشاردهنده و در نتیجه تابع حالت  $\psi$  در (۴-۵۵)، یک ضریب اضافی  $\exp[i(n + \frac{1}{2})2\pi] = -1$  ایجاد می‌کند؛ بنابراین، بعد از یک دوره تناوب کلاسیکی علامت آنها عوض می‌شود. با این وجود، چون مقادیر قابل انتظار به جای انتگرال  $\psi$  شامل انتگرال  $|\psi|^2$  می‌باشند در واقع مشاهده پذیرها با فرکانس طبیعی  $\omega$  نوسان می‌کنند. فرکانسهای نوسان  $\langle x \rangle$  و  $\langle p \rangle$  را می‌توانیم با استفاده از معادلات حرکت (۳-۶۱) که عبارتند از

\* این انتشاردهنده را می‌توان به صورت بسته زیر نیز بیان کرد

$$G(x, x', t) = \left[\frac{m\omega}{2\pi\hbar i \sin \omega t}\right]^{1/2} \exp\left\{\frac{i m \omega}{2\hbar \sin \omega t} [(x^2 + x'^2) \cos \omega t - 2xx']\right\}$$

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = -\frac{\langle [\mathcal{H}, \hat{x}] \rangle}{i\hbar} \quad \text{و} \quad \frac{d\langle p \rangle}{dt} = -\frac{\langle [\mathcal{H}, \hat{p}] \rangle}{i\hbar}$$

به دست آوریم که در آنها  $\mathcal{H} = (\hat{p}^2/2m) + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$  . چون  $\hat{x}$  با انرژی پتانسیل، و  $\hat{p}$  با انرژی جنبشی، در  $\mathcal{H}$ ، جابه‌جایزیراند معادلات فوق خواهند شد

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = -\frac{1}{2mi\hbar} \langle [\hat{p}^2, \hat{x}] \rangle = -\frac{1}{2mi\hbar} \langle (\hat{p}\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p}\hat{p}) \rangle \quad (۴-۵۶)$$

و

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = -\frac{m\omega^2}{2i\hbar} \langle [\hat{x}^2, \hat{p}] \rangle = -\frac{m\omega^2}{2i\hbar} \langle (\hat{x}\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}\hat{x}) \rangle \quad (۴-۵۷)$$

با دوبار کاربرد متوالی رابطه جابه‌جایزیری  $\hat{x}\hat{p} = i\hbar\hat{1} + \hat{p}\hat{x}$ ، خواهیم داشت

$$\begin{aligned} \hat{x}\hat{p}\hat{p} &= (\hat{x}\hat{p})\hat{p} = (i\hbar\hat{1} + \hat{p}\hat{x})\hat{p} \\ &= i\hbar\hat{p} + \hat{p}(\hat{x}\hat{p}) \\ &= i\hbar\hat{p} + \hat{p}(i\hbar\hat{1} + \hat{p}\hat{x}) = 2i\hbar\hat{p} + \hat{p}\hat{p}\hat{x} \end{aligned}$$

به همین طریق می‌توان ثابت کرد که

$$\hat{p}\hat{x}\hat{x} = 2i\hbar\hat{x} + \hat{x}\hat{x}\hat{p}$$

در این صورت (۴-۵۶) و (۴-۵۷) خواهند شد

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{\langle p \rangle}{m} \quad \text{و} \quad \frac{d\langle p \rangle}{dt} = -m\omega^2\langle x \rangle$$

با مشتق‌گیری از هر دو معادله نسبت به زمان و تفکیک آنها از یکدیگر دو معادله مرتبه دوم

$$\frac{d^2}{dt^2}\langle p \rangle = -\omega^2\langle p \rangle \quad \text{و} \quad \frac{d^2}{dt^2}\langle x \rangle = -\omega^2\langle x \rangle$$

با جوابهای

$$\langle p \rangle = \langle p \rangle_0 \cos(\omega t + \phi_p) \quad (۴-۵۸)$$

$$\langle x \rangle = \langle x \rangle_0 \cos(\omega t + \phi_x) \quad (4-59)$$

به دست می آوریم. بنابراین، با تایید قضیه اهرنفت، مقادیر قابل انتظار، در واقع، یک حرکت هارمونیک ساده با فرکانس کلاسیکی را نشان می دهند، اما فقط در صورتی که حالت اولیه یک ویژه حالت انرژی نباشد. نشان داده ایم که در چنین حالتی  $\langle p \rangle_0 = \langle x \rangle_0 = 0$ ، و (4-58) و (4-59) نشان می دهند که  $\langle x \rangle$  و  $\langle p \rangle$  متحد با صفر باقی می مانند.

حائز اهمیت است که توجه کنیم که اگر  $\langle p \rangle$  و  $\langle x \rangle$  را به  $p_{\text{class}}$  و  $x_{\text{class}}$  وابسته کنیم، در حالت های نوسانی مانا هیچ ارتعاشی رخ نخواهد داد. اگر نوسانگر یک ذره باردار باشد، مادامی که سیستم در یک ویژه حالت انرژی باقی بماند، هیچ تابشی گسیل نخواهد شد. همان طوری که در فصل ۷ نشان خواهیم داد، ارتعاشاتی که با گسیل پرتوزا همراه هستند وقتی رخ می دهند که ذره بین حالت های مانا گذارهایی انجام دهد.

### ۱۳ - مسئله نوسانگر در نمادگذاری دیراک - روش نردبانی

در این بخش آخر می خواهیم نشان دهیم که مکانیک موجی فقط یکی از نمایش های زیاد مکانیک کوانتومی است و طیف هامیلتونی اساساً به وسیله بستگی آن به  $\hat{p}$  و  $\hat{m}$  و به روابط جابه جایی بین این متغیرها تعیین می شود. ما اکنون ویژه مقدارهای هامیلتونی نوسانگر و عناصر ماتریس  $\hat{p}$  در ویژه پایه  $\psi_0$  را بدون توسل به نمایش مختصای به دست می آوریم. می خواهیم ویژه مقدارهای معادله

$$\mathcal{H}|n\rangle = \left\{ \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}^2 \right\} |n\rangle = \epsilon_n |n\rangle \quad (4-60)$$

را که در آن متغیرهای بندادی در رابط  $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \hat{1}$  صدق می کنند، به دست آوریم. عملگرهای "کاهش یافته" (بدون بعد) مختصه و تکانه

$$\hat{x}' = \left( \frac{m\omega}{2\hbar} \right)^{1/2} \hat{x} \quad \text{و} \quad \hat{p}' = \left( \frac{1}{2m\hbar\omega} \right)^{1/2} \hat{p}$$

را که برحسب آنها (4-60) خواهد شد

$$\mathcal{H}|n\rangle = \hbar\omega(\hat{p}'^2 + \hat{x}'^2)|n\rangle = \epsilon_n |n\rangle$$

وارد می‌کنیم . توجه کنیم که هامیلتونی می‌تواند به صورت

$$\mathcal{H} = \hbar\omega\{(\hat{x}' - i\hat{p}')(\hat{x}' + i\hat{p}') - i[\hat{x}', \hat{p}']\} \quad (۴-۶۱)$$

تجزیه شود . چون  $\hat{x}'$  و  $\hat{p}'$  جابه‌جاپذیر نیستند ، لازم است جمله آخر جمله‌های ضربدری حاصل ضرب را خنثی کند . جابه‌جاگر عبارت است از

$$[\hat{x}', \hat{p}'] = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2} \left(\frac{1}{2m\hbar\omega}\right)^{1/2} [\hat{x}, \hat{p}] = \frac{1}{2} i\hat{1} \quad (۴-۶۲)$$

سپس عملگر

$$\hat{\eta} = \hat{x}' + i\hat{p}' \quad (۴-۶۳ الف)$$

و الحاقی آن

$$\hat{\eta}^\dagger = \hat{x}' - i\hat{p}' \quad (۴-۶۳ ب)$$

را وارد می‌کنیم . هامیلتونی (۴-۶۱) برحسب آنها خواهد شد

$$\mathcal{H} = \hbar\omega(\hat{N} + \frac{1}{2}) \quad (۴-۶۴)$$

که در آن  $\hat{N} = \hat{\eta}^\dagger \hat{\eta}$  . می‌توان هامیلتونی را به صورت تابعی از مختصه جدید  $\hat{\eta}$  و تکانه همیوگ بندادی آن  $\hat{\eta}^\dagger$  در نظر گرفت . از (۴-۶۴) می‌توان نشان داد که رابطه جابه‌جاپذیری برای این متغیرها عبارت است از  $[\hat{\eta}, \hat{\eta}^\dagger] = \hat{1}$  . توجه کنیم که این متغیرهای جدید هرمیتی نیستند ( $\hat{\eta}^\dagger \neq \hat{\eta}$ ) و در نتیجه مشاهده‌پذیر نیستند ، ولی با این وجود به ما امکان می‌دهند که  $\varepsilon_n$  را به دست بیاوریم .

برای پیدا کردن ویژه‌بردارها و ویژه مقدارهای هامیلتونی در (۴-۶۴) کافی است معادله ویژه مقداری

$$\hat{N}|n\rangle = N_n|n\rangle \quad (۴-۶۵)$$

را حل کنیم . کتهای  $|n\rangle$  معرف ویژه بردارهای مشترک  $\hat{\eta}$  و  $\hat{N}$  هستند که ویژه مقدارهای آنها به وسیله رابطه

$$\varepsilon_n = \hbar\omega(N_n + \frac{1}{2}) \quad (۴-۶۶)$$

به یکدیگر مربوط می‌شوند. اکنون باید ثابت کرد که ویژه مقدارهای  $\hat{N}$  اعداد صحیح غیر منفی اند، یعنی،  $N_n = n$  که در آن  $n = 1, 2, \dots$ . با تأیید دادن  $\hat{a}$  روی (۴-۶۵) خواهیم داشت

$$\hat{a}\hat{N}|n\rangle = \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = N_n\hat{a}|n\rangle$$

با کاربرد رابطه جابه‌جاپذیری  $\hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{1} + \hat{a}^\dagger\hat{a}$ ، رابطه فوق به صورت

$$\{\hat{1} + \hat{a}^\dagger\hat{a}\}\hat{a}|n\rangle = N_n\hat{a}|n\rangle$$

یا، با ترانهادن، به صورت

$$\hat{N}\{\hat{a}|n\rangle\} = (N_n - 1)\{\hat{a}|n\rangle\} \quad (۴-۶۷)$$

در می‌آید. از رابطه اخیر، (۴-۶۷)، نتیجه می‌شود که اگر  $N_n$  یک ویژه مقدار باشد  $N_n - 1$  نیز ویژه مقدار است، که نشان می‌دهد ویژه مقدارها با هم به اندازه یک عدد صحیح اختلاف دارند. به علاوه، جمله داخل پرانتز باید متناسب با ویژه بردار متناظر با ویژه مقدار  $N_n - 1$  باشد، یعنی،

$$\hat{a}|n\rangle = C_n^-|n-1\rangle$$

که در آن  $C_n^-$  یک ثابت تناسب است. استدلال مشابهی در مورد عملگر  $\hat{a}^\dagger$  منجر به نتیجه\*

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = C_n^+|n+1\rangle$$

می‌شود. با ضرب کردن هر دو رابطه در برای آنها خواهیم داشت

$$\begin{aligned} \langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle &= |C_n^-|^2\langle n-1|n-1\rangle \\ \langle n|\hat{N}|n\rangle &= N_n = |C_n^-|^2 \end{aligned} \quad (۴-۶۸ \text{ الف})$$

و

$$\begin{aligned} \langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle &= |C_n^+|^2\langle n+1|n+1\rangle \\ \langle n|1 + \hat{N}|n\rangle &= 1 + N_n = |C_n^+|^2 \end{aligned} \quad (۴-۶۸ \text{ ب})$$

---

\* عملگرهای  $\hat{a}$  و  $\hat{a}^\dagger$  به ترتیب عملگرهای پایین‌آورنده (یا مخرب) و بالا برنده (یا مولد) نام گذاری می‌شوند.

از ۴-۶۸ الف) نتیجه می‌شود  $N_n \geq 0$ ، بنابراین باید یک ویژه مقدار کمینه غیر منفی،  $N_{n_{\min}}$ ، وجود داشته باشد. عمل پائین‌آوری روی پائین‌ترین ویژه حالت نباید هیچگونه حالت جدیدی ایجاد کند، یعنی

$$\hat{n}|n_{\min}\rangle = C_{n_{\min}}^-|n-1\rangle = 0$$

یا، با استفاده از  $C_n^-$  از ۴-۶۸ الف)،

$$\hat{n}|n_{\min}\rangle = (N_{n_{\min}})^{1/2}|n-1\rangle = 0$$

رابطه اخیر در صورتی می‌تواند صادق باشد که داشته باشیم  $N_{n_{\min}} = 0$ . عملهای بالابری متوالی نشان می‌دهد که طیف  $\hat{n}$  باید از یک مجموعه اعداد صحیح مثبت و صفر تشکیل شده باشد. با قراردادن  $N_n = n$ ، از ۴-۶۶ نتیجه می‌شود که طیف  $\hat{n}$  عبارت است از

$$\epsilon_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

که با روش مکانیک موجی در توافق است.

ضرایب  $C_n$  اکنون می‌توانند از ۴-۶۸ الف) و ۴-۶۸ ب) به صورت  $C_n^- = \sqrt{n}$  و  $C_n^+ = (n+1)^{1/2}$  تعیین شوند و عملهای پائین‌آوری و بالابری به صورت

$$|n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{n}|n\rangle \quad (۴-۶۹)$$

و

$$|n+1\rangle = \frac{1}{(n+1)^{1/2}} \hat{n}^+|n\rangle \quad (۴-۷۰)$$

نوشته شوند.

بدین ترتیب طیف  $\hat{n}$  معین می‌شود. وقتی یکی از ویژه بردارها پیدا شد، تمام ویژه بردارهای دیگر می‌توانند با استفاده از عملهای بالابری و پائین‌آوری به دست آیند. بخصوص اولین حالت برانگیخته می‌تواند از حالت پایه به وسیله عمل بالابری  $|1\rangle = (1/\sqrt{1})\hat{n}^+|0\rangle$  به دست آید. در واقع، با اعمال  $n$  عمل بالابری متوالی روی  $|0\rangle$ ،  $n$  امین ویژه بردار، یعنی

$$|n\rangle = \frac{1}{(n!)^{1/2}} (\hat{n}^+)^n|0\rangle \quad (۴-۷۱)$$

را ایجاد می‌کنیم .

برای کامل کردن بحث ، عناصر ماتریس  $\langle m | \hat{x} | n \rangle$  را محاسبه می‌کنیم . با استفاده از (۴-۶۳) ، عملگر  $\hat{x}$  می‌تواند بر حسب عملگرهای بالابرنده و پائین‌آورنده به صورت

$$\hat{x} = (2\hbar/m\omega)^{1/2} \hat{x}' = (2\hbar/m\omega)^{1/2} (\hat{a}^\dagger + \hat{a})/2$$

نوشته شود ، و عناصر ماتریس خواهند شد

$$\begin{aligned} \langle m | \hat{x} | n \rangle &= \frac{1}{2} (2\hbar/m\omega)^{1/2} [\langle m | \hat{a}^\dagger | n \rangle + \langle m | \hat{a} | n \rangle] \\ &= \frac{1}{2} (2\hbar/m\omega)^{1/2} [(n+1)^{1/2} \langle m | n+1 \rangle + \sqrt{n} \langle m | n-1 \rangle] \\ &= \frac{1}{2} (2\hbar/m\omega)^{1/2} [(n+1)^{1/2} \delta_{m,n+1} + \sqrt{n} \delta_{m,n-1}] \end{aligned}$$

بنابراین می‌توان عناصر غیرصفر را به صورت

$$\langle n+1 | \hat{x} | n \rangle = \left[ \frac{(n+1)\hbar}{2m\omega} \right]^{1/2}$$

و

$$\langle n-1 | \hat{x} | n \rangle = \left[ \frac{n\hbar}{2m\omega} \right]^{1/2}$$

که هردوی آنها با نتایج قبلی ، (۴-۵۳) ، مطابقت دارند ، نوشت .  
مجدداً تأکید می‌کنیم که این عناصر ماتریس و ویژه مقادیرها با استفاده از خواص عملگرهای متناظر ، بدون توسل به هیچ نمایش بخصوصی به دست آمده‌اند . در مسائل یک جسمی که پیچیده‌تر از مسئله مورد بحث در اینجا است ، معمولاً ساده‌تر است که روی نمایش مختصه‌ای تکیه شود ، به شرط اینکه این نمایش وجود داشته باشد .  
بالاخره نشان خواهیم داد که ویژه تابعهای نوسانگر نیز می‌توانند با استفاده از روش نردبانی ایجاد شوند . در نمایش مختصه‌ای قرار می‌دهیم  $|n\rangle \rightarrow \psi_n$  ،  $\hat{x} \rightarrow x$  و  $\hat{p} \rightarrow (\hbar/i) d/dx$  عملهای پائین‌آوری و بالابری در (۴-۶۹) و (۴-۷۵) به شکل

$$\hat{a} \psi_n = \left\{ \left( \frac{m\omega}{2\hbar} \right)^{1/2} x + i \left( \frac{1}{2m\hbar\omega} \right)^{1/2} \hbar \frac{d}{dx} \right\} \psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1} \quad (۴-۷۲)$$



$$\hat{H}^+ \psi_n = \left\{ \left( \frac{m\omega}{2\hbar} \right)^{1/2} x - i \left( \frac{1}{2m\hbar\omega} \right)^{1/2} \hbar \frac{d}{dx} \right\} \psi_n = (n+1)^{1/2} \psi_{n+1} \quad (۷۳-۴)$$

در می‌آیند. با قراردادن  $n=0$  در معادله اول، معادله دیفرانسیلی برای ویژه تابع حالت پایه، یعنی

$$\frac{1}{(2\alpha)^{1/2}} \left( \frac{d}{dx} + \alpha x \right) \psi_0 = 0 \quad \left( \alpha = \frac{m\omega}{\hbar} \right)$$

را به دست می‌آوریم که جواب آن عبارت است از

$$\psi_0 = \left( \frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2}$$

ضریب طوری انتخاب شده است که بهنجارش را تأمین کند. مقایسه با (۴۸-۴) نشان می‌دهد که نتیجه فعلی ما با نتیجه مکانیک موجی یکسان است. اولین حالت برانگیخته می‌تواند با قراردادن  $n=0$  در معادله بالابرنده (۷۳-۴) ایجاد شود. از این معادله نتیجه می‌شود

$$\begin{aligned} \frac{1}{(2\alpha)^{1/2}} \left( \frac{d}{dx} - \alpha x \right) \psi_0 &= \sqrt{1} \psi_1 \\ \frac{1}{(2\alpha)^{1/2}} \left( \frac{d}{dx} - \alpha x \right) \left( \frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2} &= \psi_1 \end{aligned}$$

یا

$$\psi_1 = \left( \frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\alpha x^2/2} [2\sqrt{\alpha} x]$$

که با نتایج قبلی نیز مطابقت دارد. بنابراین، تمام ویژه تابعهای بهنجارشده می‌توانند به کمک عملهای بالابری متوالی ایجاد شوند.

مثالهای یک بعدی بحث شده در بالا، در حالی که به اندازه کافی جالباند، به خصوص وقتی که نتایج آنها می‌توانند در مورد جهان سه بعدی به کار روند اهمیت پیدا می‌کنند. در فصل ۵، توجه خود را به ویژه حالت‌های هامیلتونیها در سه بعد معطوف خواهیم کرد. چون حالت‌های مقید و نامقید اساساً روشهای متفاوتی را ایجاد می‌کنند، بحث در مورد حالت‌های پیوسته را به فصل ۸ (پراکندگی) موکول می‌کنیم.

### مسائل

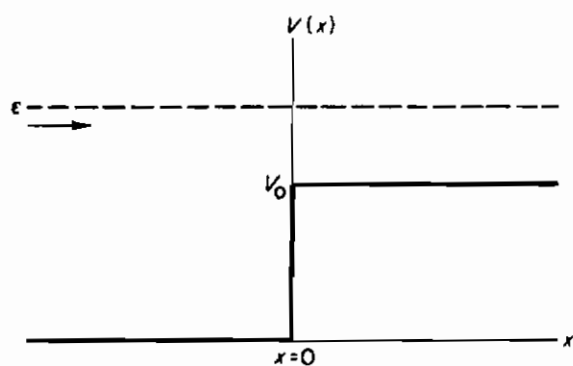
- ۱-۴ ضریب بازتاب یک باریکه از ذرات فرودی روی پتانسیل پله‌ای در شکل (۴-۱۰) را پیدا کنید .
- ۲-۴ ثابت کنید که ضرایب بازتاب و عبور از یک سد دافعه دقیقاً "به وسیله معادله (۴-۳۴) داده می‌شوند .
- ۳-۴ (الف) نشان دهید که برای  $V_0 \ll \varepsilon$  و  $a \gg 1$  (یعنی  $Ka \gg 1$ ) ضریب عبور در معادله (۴-۱۰) دارای شکل مجانبی  $\mathcal{T} \sim e^{-2Ka}$  است .
- (ب) با فرض اینکه ضریب عبور تقریبی برای یک مجموعه از سدهای مجاور یکدیگر (شکل ۴-۱۱) برابر است با حاصل ضرب ضرایب انفرادی، نشان دهید که برای  $N$  تا از چنین سدهایی داریم

$$\mathcal{T} \sim \exp\left(-2 \sum_{i=1}^N K_i a_i\right) \quad , \quad K_i = \frac{[2m(V_{0i} - \varepsilon)]^{1/2}}{\hbar}$$

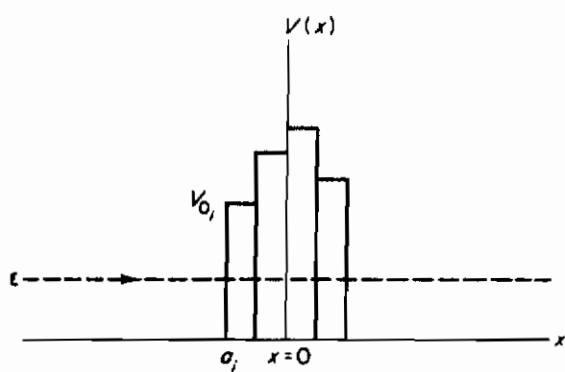
- (ج) با به کار بردن نتیجه فوق نشان دهید که برای یک سد دافعه دلخواه، ولی با تغییرات آرام، ضریب عبور تقریبی به وسیله

$$\mathcal{T} \sim \exp\left\{-2 \int_{x_1}^{x_2} \frac{[2m(V(x) - \varepsilon)]^{1/2}}{\hbar} dx\right\}$$

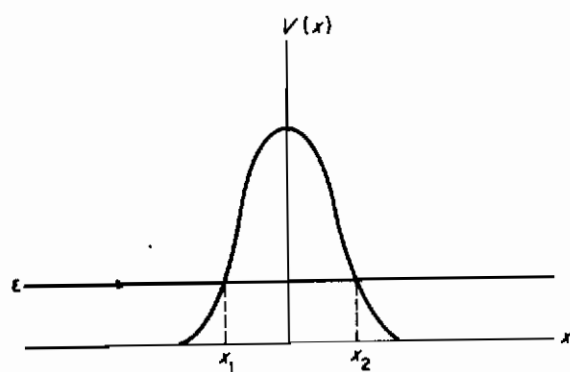
- که در آن  $x_1$  و  $x_2$  نقاط کلاسیکی بازگشت حرکت (شکل ۴-۱۲) هستند، داده می‌شود . چه فرضهائی برای به دست آوردن این عبارت به کار رفته‌اند؟ (رک پیوست الف) .
- ۴-۴ با به کار بردن نتیجه "نیمه کلاسیکی" داده شده در مسئله (۴-۳ ج) ضریب عبور تقریبی برای یک پتانسیل مثلثی (شکل ۴-۱۳) را وقتی  $\varepsilon = \frac{1}{4}V_0$  باشد پیدا کنید .
- ۵-۴ ضریب بازتاب را برای یک سد "دوگانه" در شکل (۴-۱۴)، وقتی  $\varepsilon < V_0$  باشد محاسبه کنید .
- ۶-۴ ضریب عبور را برای یک باریکه از ذرات فرودی روی یک پتانسیل به شکل تابع دلتا،  $V = A\delta(x)$ ، پیدا کنید . (راهنمایی: معادله (۴-۱۰ ب) را به کار ببرید و در حالی که حاصل ضرب  $V_0 a$  را ثابت نگاه می‌دارید،  $V_0 a = A = \text{const}$ ، قرار دهید  $a \rightarrow 0$  و  $V_0 \rightarrow \infty$ )



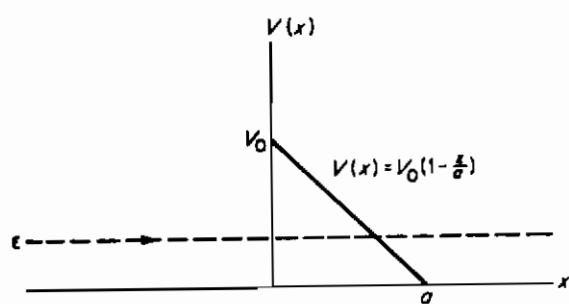
شکل ۴-۱۰



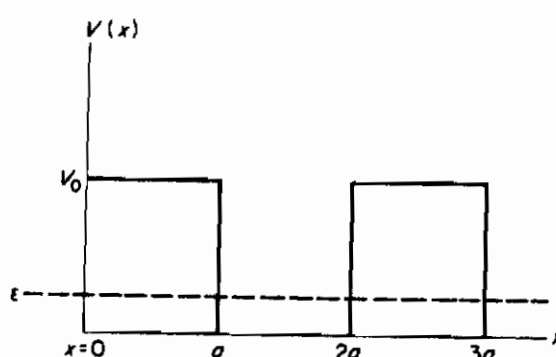
شکل ۴-۱۱



شکل ۴-۱۲



شکل ۴-۱۳



شکل ۴-۱۴

۷-۴ (الف) با انجام انتگرالهای لازم برای ذره‌ای که در یک چاه بینهایت غیرمتقارن قرار دارد روابط زیر را تحقیق کنید

$$\begin{aligned} \langle x \rangle_n &= \frac{1}{2}a & \langle p \rangle_n &= 0 \\ \langle x^2 \rangle_n &= \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2\pi^2 n^2} & \langle p^2 \rangle_n &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{a^2} n^2 \quad (n = 1, 2, \dots) \end{aligned}$$

(ب) نشان دهید که  $\Delta p_n^2 \Delta x_n^2 \geq \frac{1}{4} \hbar^2$  برای تمام مقادیر  $n$  صادق است. مقدار  $\Delta p_n \Delta x_n$  در حالت پایه،  $n = 1$ ، چقدر است؟

۸-۴ با استفاده از رابطه  $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \hat{1}$ ، نشان دهید که اگر عملگر پاریته با  $\hat{x}$  پادجا-به‌جاپذیر باشد (یعنی،  $\hat{p}\hat{x} = -\hat{x}\hat{p}$ ) با  $\hat{p}_x$  نیز پادجا‌به‌جاپذیر است (راهنمایی: عملگر همانی با تمام عملگرها، از جمله پاریته، جا‌به‌جاپذیر است).

۹-۴ با استفاده از رابطه جا‌به‌جاپذیری  $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \hat{1}$  نشان دهید که

$$\begin{aligned} [\hat{p}_x, \hat{x}^n] &= -i\hbar n \hat{x}^{n-1} & \text{و} & & [\hat{x}, \hat{p}_x^n] &= i\hbar n \hat{p}_x^{n-1}, \\ (\cdot [\hat{p}_x, \hat{F}(\hat{x})]) &= -i\hbar (d\hat{F}/d\hat{x}) & \text{و} & & [\hat{x}, \hat{G}(\hat{p}_x)] &= i\hbar (d\hat{G}/d\hat{p}_x), \end{aligned}$$

(به‌طور کلی‌تر،)

۱۰-۴ با به‌کاربردن نتایج مسئله (۹-۴) نشان دهید که برای هر هامیلتونی به‌شکل

$$\mathcal{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + a\hat{x}^n$$

رابطه عملگری زیر برقرار است

$$[\hat{x}\hat{p}_x, \mathcal{H}] = i\hbar \left( \frac{\hat{p}_x^2}{m} - an\hat{x}^n \right) = i\hbar(2\hat{T} - n\hat{V})$$

(توجه کنید که برای یک حالت مانای مقید ، قضیه اهرنغست ایجاب می کند

$$\frac{d\langle xp_x \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{x}p_x, \hat{H}] \rangle = 0$$

بنابراین داریم  $\langle T \rangle = n \langle V \rangle$  . این نتیجه ، قضیه ویریا کوانتومی برای یک پتانسیل توانی نامیده می شود . برای یک نوسانگر ( $n = 2$ ) ، خواهیم داشت

$$\langle T \rangle = \langle V \rangle$$

۴-۱۱ ویژه مقدارها و ویژه تابعهای انرژی را برای ذره‌ای که در پتانسیل  $V = \frac{1}{2}m\omega^2 (x^2 - 2bx)$  قرار دارد پیدا کنید.

(راهنمائی: پتانسیل را به صورت یک مربع کامل درآورید و این هامیلتونی را با هامیلتونی مربوط به پتانسیل نوسانگر، یعنی  $V = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$  مقایسه کنید)

۴-۱۲ انرژی حالت پایه یک نوسانگر را با کمینه کردن

$$\varepsilon = \frac{\Delta p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\Delta x^2$$

وہا توجہ بہ تحدید "عدم قطعیت"

$$\Delta p \Delta x = \frac{1}{2} \hbar$$

پیدا کنید .

#### ۴-۱۳ انرژی حالت پایه یک الکترون

$$(m = 9 \times 10^{-28} \text{ gm})$$

واقع در یک چاه یک بعدی متناهی به ارتفاع  $V_0 \sim 10 \text{ eV} \sim 1.6 \times 10^{-11} \text{ erg}$  و پهنای  $a = 10^{-8} \text{ cm}$  را به روش ترسیمی محاسبه کنید.

۴-۱۴ ثابت کنید که اگر یک عملگر  $\hat{A}$  هرمیتی باشد و در رابطه  $\hat{A}^2 = \hat{I}$  صدق کند، ویژه مقادیر آن عبارتند از  $\pm 1$ . یک عملگر با ویژگی  $\hat{A}^2 = \hat{I}$  درون‌گرا نامیده می‌شود.

۱۵-۴ سیستمی در نظر بگیریم که به وسیله هامیلتونی یک ذره آزاد (یک بعدی)  $\mathcal{H} = \hat{p}^2/2m$  اداره می‌شود.

(الف) با استفاده از معادله (۳-۹۴) نشان دهید که "انتشاردهنده" این ذره آزاد می‌تواند به صورت

$$G(x, x', t, t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{(2\pi\hbar)} e^{-ip^2\tau/2m\hbar} e^{ipX/\hbar}$$

که در آن  $X = x - x'$  و  $\tau = t - t_0$  می‌باشد، بیان شود.  
(ب) انتگرال‌گیری را انجام دهید و نشان دهید که

$$G(X, \tau) = \left[ \frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right]^{1/2} e^{imX^2/2\hbar\tau}$$

(راهنمایی: نما را به صورت مربع کامل درآورید و از

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} du = \sqrt{\pi}.)$$

استفاده کنید.)

(ج) فرض کنید که در لحظه  $t_0 = 0$  یک ذره آزاد در حالتی که به وسیله بسته موج

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{(\pi\delta^2)^{1/4}} e^{-x^2/2\delta^2} e^{ip_0x/\hbar}$$

نمایش داده می‌شود قرار دارد. توجه کنید که در لحظه  $t_0 = 0$ ، چگالی احتمال یک تابع گاوسی بایهنای متوسط  $\delta$  می‌باشد. با استفاده از معادله (۳-۹۳) نشان دهید که با گذشت زمان بسته موج گسترده می‌شود.

### مراجع پیشنهادی

- Arfken, G., "Mathematical Methods for Physicists," 2nd ed., Chapter 9. Academic Press, New York, 1970.
- Bohm, D., "Quantum Theory," Chapter 11. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1951.
- Borowitz, S., "Fundamentals of Quantum Mechanics," Chapter 9. Benjamin, New York, 1967.
- Eisberg, R. M., "Fundamentals of Modern Physics," Chapter 8. Wiley, New York, 1961.
- Merzbacher, E., "Quantum Mechanics," 2nd ed., Chapter 6. Wiley, New York, 1970.
- Messiah, A., "Quantum Mechanics," Vol. I, Chapter 3. Wiley, New York, 1961.
- Pauling, L., and Wilson, E. B., "Introduction to Quantum Mechanics," Chapter 3. McGraw-Hill, New York, 1935.
- Saxon, D. S., "Elementary Quantum Mechanics," Chapter 6. Holden-Day, San Francisco, 1964.





# ۵

## مکانیک موجی در سه بعد

مسائلی که قرار است در این فصل مورد بررسی قرار گیرند شامل یک ذره در یک چاه (جعبه) مستطیلی، نوسانگر سه بعدی، و مسئله کولنی (اتم هیدروژن) است. به خاطر اهمیتی که موضوع اخیر در نظریه اتمی دارد توجه خاصی به آن مبذول خواهد شد.

به عنوان یک قاعده، تعداد شاخصهای (اعداد کوانتومی) لازم برای کاملاً مشخص کردن یک حالت برابر است با تعداد درجات آزادی وابسته به سیستم کلاسیکی متناظر. در مسئله یک بعدی بحث شده در فصل ۴ فقط یک شاخص ( $n$ ) کافی بود، اما در سه بعد سه عدد کوانتومی لازم است. در زیر خواهیم دید که چگونه این اعداد پدیدار می شوند.

برخلاف حالت‌های مقید در یک بعد، ویژه حالت‌های یک هامیلتونی در سه بعد غالباً به طور شدیدی تبهگن اند\*. تبهگنی همواره از تقارن خاصی که در مسئله فیزیکی وجود دارد نتیجه می شود. بنابراین ویژه تابعها دیگر منحصر به فرد نیستند و لزوماً هر یکدیگر عمود نیستند. راست هنجاری هردسته ویژه تابع باید تحقیق شود. به علاوه، هر ترکیب خطی از ویژه تابعهای تبهگن یک ویژه تابع جدید متمایزی از همان انرژی است. بنابراین، وقتی یک دسته ویژه تابع پیدا شد می توان تعداد زیادی دسته های تبهگن جدید ایجاد کرد. معنی فیزیکی هردسته و دلیل اینکه دسته خاصی ایجاد شده است در بحثی که در زیر خواهد آمد روشن خواهد شد.

---

\* قضیه ۹ که امکان تبهگنی در مسائل مقید یک بعدی را طرد می کند در سه بعد معتبر نیست.

## ۱ - مسئله ویژه مقداری در سه بعد

معادله ویژه مقداری انرژی شرودینگر به شکل زیر است

$$\mathcal{H}|\varepsilon_i\rangle = \varepsilon_i|\varepsilon_i\rangle \rightarrow \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right\} \psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}) \quad (1-5)$$

که همان طوری که نشان خواهیم داد شاخص  $i$  مخفف مجموعه شاخصهاست. معادله (۱-۵) یک معادله با مشتقات جزئی است که برای پیدا کردن تابع  $\psi_i(\mathbf{r})$  باید حل شود. چون در اینجا با حالت‌های مقید سروکار داریم، آن جواب‌هایی را جستجو خواهیم کرد که در بینهایت صفر شوند، یعنی

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \varepsilon_i \rangle \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$$

یک روش متعارف برای حل معادله مزبور روش تفکیک متغیرها است. این تفکیک ممکن است در مختصات دکارتی انجام گیرد، یا ممکن است لازم باشد که تبدیلی به سیستم مختصات دیگری (به عنوان مثال، مختصات قطبی یا استوانه‌ای) انجام گیرد. خواهیم دید که در مورد تبهگنی، سیستم مختصاتی که در تفکیک متغیرها به کار می‌رود مجموعه به خصوص ویژه تابع‌های به دست آمده را تعیین خواهد کرد. سپس تشخیص مشخصات این مجموعه به عهده ما قرار خواهد گرفت. با بررسی مسائلی که در مختصات دکارتی قابل حل باشند شروع می‌کنیم.

## ۲ - ذره آزاد (مختصات دکارتی)

هامیلتونی ذره آزاد،  $V=0$ ، فقط حالت‌های نامقید را در بر می‌گیرد و، در حقیقت، به پراکندگی در فصل ۸ تعلق دارد. مع هذا، برای روشن کردن مفهوم تبهگنی و اینکه چگونه در مکانیک کوانتومی ظاهر می‌شود، آنرا در اینجا به طور اختصار مورد بحث قرار خواهیم داد. معادله شرودینگر به شکل

$$\mathcal{H}\psi_\varepsilon = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_\varepsilon = \varepsilon \psi_\varepsilon \quad (2-5)$$

در می‌آید. روش تفکیک متغیرها پیشنهاد می‌کند که جوابی به شکل

$$\psi_\varepsilon(\mathbf{r}) = X(x)Y(y)Z(z) \quad (3-5)$$

را آزمایش کنیم. اگر این جواب آزمایشی در نهایت به سه معادله دیفرانسیل معمولی برای  $x$ ،  $y$  و  $z$  منجر شود می‌گوئیم که (۲-۵) در مختصات دکارتی تفکیک پذیر است. با قراردادن (۲-۵) در (۲-۵) خواهیم داشت

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ YZ \frac{d^2 X}{dx^2} + XZ \frac{d^2 Y}{dy^2} + XY \frac{d^2 Z}{dz^2} \right\} = \varepsilon XYZ$$

یا

$$\left\{ \frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2} + \frac{1}{Y} \frac{d^2 Y}{dy^2} + \frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} \right\} = -k^2$$

که در آن  $k^2 = 2m\varepsilon/\hbar^2$ 

هرکدام از جملات طرف چپ این معادله تابعی از فقط یک متغیر است: حاصل جمع تنها در صورتی می‌تواند مقدار ثابتی باشد که هرکدام از جملات مستقلاً ثابت باشند، یعنی

$$\frac{1}{X} X'' = -k_x^2, \quad \frac{1}{Y} Y'' = -k_y^2, \quad \frac{1}{Z} Z'' = -k_z^2$$

که در آنها  $k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = k^2 = 2m\varepsilon/\hbar^2$ .

راحت تر است که سه عدد کوانتومی (پیوسته)  $k_x$ ،  $k_y$  و  $k_z$  را در یک عدد کوانتومی برداری  $\mathbf{k} = k_x \mathbf{i} + k_y \mathbf{j} + k_z \mathbf{k}$  خلاصه کنیم. جوابهای سه معادله فوق عبارتند از  $X \sim e^{ik_x x}$ ،  $Y \sim e^{ik_y y}$  و  $Z \sim e^{ik_z z}$ ، بنابراین ویژه تابعها و ویژه مقدارهای ذره آزاد می‌توانند به صورت

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = N_{\mathbf{k}} e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} = N_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (۴-۵ \text{ الف})$$

و

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 |\mathbf{k}|^2}{2m} \quad (۴-۵ \text{ ب})$$

نوشته شوند\*

\* قراردادن  $N_{\mathbf{k}} = (1/2\pi\hbar)^{3/2}$  توابع را بر طبق قانون قراردادی زیر بهنجار می‌کند، یعنی

$$\langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle = \int \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')/\hbar^3$$

اما روش دیگری (بهنجارش جعبه‌ای) نیز مورد استفاده قرار می‌گیرد که در آن ذره در یک جعبه بزرگ با حجم  $\mathcal{V}$  در نظر گرفته می‌شود. در این روش قرار می‌دهیم  $N_{\mathbf{k}} = 1/\sqrt{\mathcal{V}}$  و پس از اینکه محاسبات به انجام رسید حد  $\mathcal{V} \rightarrow \infty$  را اعمال می‌کنیم.

بردار کوانتومی  $\mathbf{k}(k_x, k_y, k_z)$  ویژه تابع دکارتی و ویژه مقدار آنرا مشخص می‌کند. وجود یک تبهگنی بایدروشن شود. توجه‌کنیم که انرژی فقط تابع اندازه  $k$  می‌باشد. تغییر جهت  $k$  (تغییر  $k_x, k_y, k_z$ )، در حالی که داشته باشیم

$$|\mathbf{k}| = (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)^{1/2} = k_0$$

منجر به ایجاد ویژه تابعهای جدیدی در (۴-۵) می‌شود، بدون اینکه ویژه مقدارها تغییر کرده باشند. بنابراین هر ترکیب خطی از این ویژه تابعهای تبهگن نیز یک ویژه تابع انرژی خواهد بود. به علت طبیعت پیوسته طیف، این ترکیب صورت یک انتگرال

$$\psi_{k_0}(\mathbf{r}) = \int_{|\mathbf{k}|=k_0} a(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d\Omega_{\mathbf{k}} \quad (5-5)$$

را به خود می‌گیرد که در آن انتگرال روی کره‌ای به شعاع  $k_0$  در فضای  $k$  گرفته می‌شود و ما را مطمئن می‌سازد که فقط ویژه تابعهای تبهگن با هم مخلوط شده‌اند. بنابراین با انتخاب هر ضریب اختلاط  $a(\mathbf{k})$  یک ویژه تابع جدید  $\psi_{k_0}(\mathbf{r})$  با همان انرژی  $\epsilon_{k_0} = \hbar^2 k_0^2 / 2m$  ایجاد خواهیم کرد.

حال که می‌بینیم جوابهای (۲-۵) یکتا نیستند، باید سؤال کنیم: اهمیت فیزیکی مجموعه ویژه تابعهای  $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$  در چیست و چرا به جای آن مجموعه‌های دیگر ظاهر نمی‌شوند؟ مشاهده می‌کنیم که برای یک ذره آزاد ( $\mathcal{H} = \hat{p}^2 / 2m$ ) داریم  $[\hat{p}, \mathcal{H}] = 0$ ، که از آن نتیجه می‌شود که برای  $\mathcal{H}$  و  $\hat{p}$  یک مجموعه ویژه تابعهای مشترک وجود دارد. طبیعتاً باید بررسی کنیم که آیا  $\psi_{\mathbf{k}}$  همان مجموعه است. با تأثیر دادن  $\hat{p} = (\hbar/i) \nabla$  روی  $\psi_{\mathbf{k}}$  داریم

$$\frac{\hbar}{i} \nabla \psi_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar}{i} \nabla e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = \hbar \mathbf{k} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = \hbar \mathbf{k} \psi_{\mathbf{k}} \quad (5-6)$$

از مقایسه طرفهای راست و چپ مشاهده می‌کنیم که در حقیقت  $\psi_{\mathbf{k}}$  به طور همزمان ویژه تابع  $\hat{p}$  با ویژه مقدار  $\hat{p} = \hbar \mathbf{k}$  است. بنابراین جواب دکارتی ذره آزاد به طور کاملاً "طبیعی" ما را به ویژه تابع تکانه هدایت می‌کند.

تحول زمانی این ویژه تابع تکانه عبارت است از (رک ۳-۶۷)

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = e^{-i\epsilon_{\mathbf{k}} t / \hbar} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{-i\epsilon_{\mathbf{k}} t / \hbar} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_{\mathbf{k}} t)} \quad (5-7)$$

و معادل است با انتشار یک موج تخت (در امتداد  $k$ ) با

$$\omega_k = \frac{\varepsilon_k}{\hbar} = \frac{\hbar^2 k^2}{\hbar 2m} = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

و  $k = p/\hbar$ . از رابطه اخیر نتیجه می‌شود که طول موج،  $\lambda = 2\pi/k = h/p$ ، با فرضیه دوبروی سازگار است و می‌توانیم این ویژه تابع تکانه ذره آزاد را با موج دوبروی یکی بدانیم. با این وجود، طبیعت غیرفیزیکی موج وقتی ظاهر می‌شود که سرعت فاز آنرا محاسبه کنیم

$$v_{\text{phase}} = \frac{\omega_k}{k} = \frac{\hbar k^2}{2mk} = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{p}{2m} = \frac{1}{2} v_{\text{particle}}$$

علی‌رغم آنچه که می‌تواند انتظار رود، سرعت فاز با سرعت ذره برابر نیست. باید به‌خاطر آورد که فقط جنبه‌های احتمالاتی  $\psi_k$  دارای معنی فیزیکی است. با اعمال عملگر جریان (۳-۹۶) به  $\psi_k$  خواهیم داشت

$$-\frac{i\hbar}{2m} (\psi_k^* \nabla \psi_k - \psi_k \nabla \psi_k^*) = \frac{\hbar k}{m} \psi_k^* \psi_k$$

$$J = \frac{p}{m} \psi_k^* \psi_k = v_{\text{particle}} \mathcal{P}_k \quad (۵-۸)$$

بنابراین، سرعت جریان احتمال با سرعت ذره آزاد برابر است\*.

در تحلیل معادله ذره آزاد (۵-۲) به‌طور طبیعی به ویژه تابعهای تکانه خطی  $\psi_k = N_k e^{ik \cdot r}$  هدایت شدیم زیرا این معادله را در مختصات دکارتی تفکیک کرده بودیم. اگر معادله را در مختصات کروی تفکیک کرده بودیم، به‌توابعی به‌شکل

$$\psi_{klm_l}(r, \theta, \phi) = j_l(kr) Y_{lm_l}(\theta, \phi)$$

هدایت می‌شدیم که در آن  $j_l$  یک تابع بسل کروی و  $Y_{lm_l}$  یک هماهنگ کروی است. نشان خواهیم داد که این توابع به‌طور همزمان ویژه تابعهای انرژی و تکانه زاویه‌ای (و نه تکانه

\* این سرعت جریان هم‌چنین با سرعت موسوم به سرعت "گروه" موج دوبروی، که به‌صورت  $v_{\text{group}} = \partial\omega/\partial k$  تعریف می‌شود، برابر است.

خطی) هستند، و دارای شکل ریاضی وابسته به امواج کروی (و نه امواج تخت) می باشند. اعداد کوانتومی  $l$  و  $m_l$  به حالت های تکانه زاویه ای مربوط می شوند در حالی که  $k$ ، با رابطه  $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$  به انرژی مربوط می شود. توجه کنیم که دو مجموعه ویژه تابع  $\psi_k(xyz)$  و  $\psi_{klm_l}(r, \theta, \phi)$  از یکدیگر متمایزاند زیرا  $\hat{L}$  و  $\hat{p}$  سازگاراند (یعنی،  $[\hat{L}, \hat{p}] \neq 0$ ). با این وجود همان طوری که در بخش ۸ خواهیم دید هر ویژه تابع تکانه خطی همواره یک ترکیب خطی از ویژه تابع های تبهگن تکانه زاویه ای است.

### ۳- ذره در یک جعبه

برای تعمیم یک چاه بینهایت یک بعدی، حالت های مقید یک ذره را که در یک پتانسیل جعبه مستطیل شکل قرار دارد در نظر می گیریم. معادله شرودینگر به صورت

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right\} (\psi_i, \mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}) \quad (5-9)$$

در می آید که در آن

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r}) &= 0 & 0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq b, \text{ و } 0 \leq z \leq c \\ V &= \infty & \text{جا های دیگر} \end{aligned}$$

مثل حالت یک بعدی در فصل ۴، می خواهیم که  $\psi(\mathbf{r})$  در مرزهای چاه صفر شود. طبیعت مستطیلی بودن مرز پتانسیل پیشنهاد می کند که این مسئله باید در مختصات دکارتی تفکیک پذیر باشد. در واقع، مانند حالت قبل، جایگذاری  $\psi_i = X(x)Y(y)Z(z)$  فوراً "منجر به معادلات دیفرانسیل

$$X'' = -k_x^2 X, \quad Y'' = -k_y^2 Y, \quad Z'' = -k_z^2 Z$$

می شود که در آنها  $k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = k^2 = 2m\varepsilon/\hbar^2$ . چون ویژه تابع ها باید در خارج از چاه و در مرزهای آن (که در آنجا  $V = \infty$  است) صفر شوند، جواب های قابل قبول باید به شکل

$$X_{n_x} = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin k_x x, \quad Y_{n_y} = \left(\frac{2}{b}\right)^{1/2} \sin k_y y, \quad Z_{n_z} = \left(\frac{2}{c}\right)^{1/2} \sin k_z z$$

باشند که در آن

$$k_x = \frac{n_x \pi}{a}, \quad k_y = \frac{n_y \pi}{b}, \quad k_z = \frac{n_z \pi}{c} \quad (۵-۱۰)$$

و  $n_x, n_y, n_z = ۱, ۲, ۳, \dots, \infty$  ویژه تابعها به وسیله سه عدد کوانتومی  $n_x, n_y, n_z$  مشخص می‌شوند و به شکل

$$\psi_{n_x n_y n_z} = \left( \frac{8}{abc} \right)^{1/2} \sin \frac{n_x \pi x}{a} \sin \frac{n_y \pi y}{b} \sin \frac{n_z \pi z}{c} \quad (۵-۱۱)$$

در می‌آیند و ویژه مقدارهای انرژی خواهند شد

$$\begin{aligned} \varepsilon_{n_x n_y n_z} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \\ &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left( \frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right) \end{aligned} \quad (۵-۱۲)$$

توجه کنیم که ضریب بهنجارش در (۵-۱۱) متناسب است با  $a^{-1/2}$  (حجم جعبه).  
عموماً، این مسئله تبهگنی ندارد. ولی می‌توان با افزایش تقارن فضائی یک تبهگنی ایجاد کرد. به عنوان مثال، اگر قرار دهیم  $a = b = c$ ، ویژه مقدارها به شکل

$$\varepsilon_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad (۵-۱۳)$$

در می‌آیند. در اینجا مشاهده می‌کنیم که این مقادیر انفرادی  $n_x, n_y, n_z$  نیستند که انرژی را تعیین می‌کنند بلکه مجموع مربعهای آنهاست که انرژی را می‌دهد. بنابراین در حالی که حالت پایه  $\varepsilon_{111}$  با انرژی (3)  $\varepsilon_{111} = [\hbar^2 \pi^2 / 2ma^2]$  ناتبهگن است، سه حالت برانگیخته اول  $\psi_{112}, \psi_{121}, \psi_{211}$  با انرژی  $\varepsilon_{112} = \varepsilon_{121} = \varepsilon_{211} = [\hbar^2 \pi^2 / 2ma^2]$ ، به طور سه گانه ای تبهگن اند. برای حالت های با انرژی بالاتر این تبهگنی ممکن است زیاد تر باشد. به علت تبهگنی، ترکیب خطی  $\psi' = \alpha \psi_{112} + \beta \psi_{121} + \gamma \psi_{211}$  هم یک ویژه تابع دیگر وابسته به اولین حالت برانگیخته است. هم چنین، چون توابع  $\psi_{n_x n_y n_z}(\mathbf{r})$  منحصر به فرد نیستند، متعامد بودن آنها باید تحقیق شود و نمی‌تواند بدون تحقیق پذیرفته شود. این ویژه تابع های جعبه ای ویژه تابع های تکانه نیستند زیرا برای هامیلتونی جعبه ای  $[H, \mathcal{P}] \neq 0$ ، هر وقت هامیلتونی شامل  $\mathcal{P}$  (از طریق پتانسیل  $V(\mathbf{r})$ ) باشد، با تکانه خطی ناسازگار است.

ویژه تابعهای  $\psi_{n_x n_y n_z}(\mathbf{r})$  در حد  $a, b, c \rightarrow \infty$  باید متناظر با ویژه تابعهای ذرات آزاد باشند و انتظار داریم که توابع سینوسی در (۵-۱۱) مثل امواج تخت بهنجار شده جعبه‌ای\* رفتار کنند، یعنی

$$\begin{aligned}\psi_{n_x n_y n_z}(\mathbf{r}) &\rightarrow \frac{1}{(abc)^{1/2}} e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} = \frac{1}{(abc)^{1/2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}\end{aligned}\quad (5-14)$$

چون ویژه تابعهای ذره آزاد مربوط به طیف پیوسته هستند جمع بندی روی حالتها به صورت انتگرال در می آید، یعنی،

$$\sum_{n_x n_y n_z > 0} \rightarrow \int_{\text{positive } n_i} dn_x dn_y dn_z \quad (5-15)$$

با استفاده از (۵-۱۰)، انتگرال می تواند به صورت زیر در آید

$$\begin{aligned}\int_{\substack{n_x n_y n_z \\ \text{positive}}} dn_x dn_y dn_z &= \frac{abc}{\pi^3} \int_{\substack{k_x k_y k_z \\ \text{positive}}} dk_x dk_y dk_z = \frac{\mathcal{V}}{\pi^3} \int_{\substack{\mathbf{k} \text{ in} \\ \text{first octant}}} d\mathbf{k} \\ &= \frac{\mathcal{V}}{8\pi^3} \int_{\substack{\mathbf{k} \text{ over} \\ \text{all space}}} d\mathbf{k}\end{aligned}\quad (5-16)$$

می توانیم، با تبدیل به مختصات قطبی کروی در فضای  $\mathbf{k}$ ، انتگرال روی حالتها را به انتگرال روی انرژی تبدیل کنیم و نتیجه بگیریم

$$\frac{\mathcal{V}}{8\pi^3} 4\pi \int_0^\infty k^2 dk = \int_0^\infty \rho(\epsilon) d\epsilon$$

با استفاده از رابطه  $\rho(\epsilon)$ ،  $\hbar^2 k^2 / 2m = \epsilon$  می تواند به صورت زیر محاسبه شود

$$\rho(\epsilon) = \frac{(2m)^{3/2} \mathcal{V}}{4\pi^2 \hbar^3} \sqrt{\epsilon} \quad (5-17)$$

\* در این نمایش ذرات آزاد، شرایط مرزی ای که ایجاد می کنند ویژه تابعها در بینهایت صفر شوند، با شرایط مرزی موسوم به "شرایط مرزی" تناوبی جایگزین شده است.



تابع  $\rho(\varepsilon)$  میزان بستگی چگالی تبهگنی (تعداد حالت‌های تبهگن در واحد انرژی) به  $\varepsilon$  برای یک ذره آزاد را می‌دهد و چگالی حالت‌ها نامیده می‌شود. در بحث مربوط به نظریه پراکندگی استفاده زیادی از (۵-۱۷) خواهیم کرد.

#### ۴- نوسانگر ناهمسانگرد

نوسانگر ناهمسانگرد سه بعدی عبارت است از ذره‌ای که به وسیله یک نیروی کشسان، که ضرایب کشسانی آن به جهت مکان ذره نسبت به مبدأ بستگی دارد، به مبدأ مقید شده است. معادله شرودینگر برای این پتانسیل عبارت است از

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2 + \frac{1}{2} m \omega_y^2 y^2 + \frac{1}{2} m \omega_z^2 z^2 \right\} \psi_i = \varepsilon_i \psi_i \quad (5-18)$$

که در آن  $\omega_x^2 = K_x/m$ ،  $\omega_y^2 = K_y/m$  و  $\omega_z^2 = K_z/m$ ، در اینجا نیز، اگر جوابی به شکل  $\psi_i = X(x)Y(y)Z(z)$  به کار ببریم، تفکیک صورت می‌گیرد. در این مورد سه معادله زیر را به دست می‌آوریم

$$-\frac{\hbar^2}{2m} X'' + \frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2 X = \varepsilon_x X$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} Y'' + \frac{1}{2} m \omega_y^2 y^2 Y = \varepsilon_y Y$$

و

$$-\frac{\hbar^2}{2m} Z'' + \frac{1}{2} m \omega_z^2 z^2 Z = \varepsilon_z Z$$

که در آنها داریم  $\varepsilon_i = \varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z$ . جوابهای این معادلات قبلاً در حالت یک بعدی به دست آمده‌اند (رک ۴-۴۷). ویژه تابعها و ویژه مقادیرهای (۵-۱۸) می‌توانند به صورت زیر نوشته شوند

$$\begin{aligned} \psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) &= X_{n_x} Y_{n_y} Z_{n_z} = \left[ \frac{\alpha_x \alpha_y \alpha_z}{\pi^3} \right]^{1/4} \left[ \frac{1}{2^{n_x+n_y+n_z} n_x! n_y! n_z!} \right]^{1/2} \\ &\times \exp[-\frac{1}{2}(\alpha_x x^2 + \alpha_y y^2 + \alpha_z z^2)] H_{n_x}((\alpha_x)^{1/2} x) \\ &\times H_{n_y}((\alpha_y)^{1/2} y) H_{n_z}((\alpha_z)^{1/2} z) \end{aligned} \quad (5-19)$$

و

$$\varepsilon_{n_x n_y n_z} = (n_x + \frac{1}{2})\hbar\omega_x + (n_y + \frac{1}{2})\hbar\omega_y + (n_z + \frac{1}{2})\hbar\omega_z$$

$$(n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, 3, \dots) \quad (20-5)$$

عدم تبهگنی باید به فقدان تقارن در هامیلتونی نسبت داده شود. برای اثبات این مطلب، مورد خاص یک نوسانگر همسانگرد ( $K_x = K_y = K_z$ ) را در نظر بگیریم که برای آن داریم

$$\varepsilon_{n_x n_y n_z} = (n_x + n_y + n_z)\hbar\omega + \frac{3}{2}\hbar\omega \quad (21-5)$$

اینک مشاهده می‌کنیم که انرژی به حاصل جمع این اعداد صحیح بستگی دارد و تمام مجموعه‌های اعداد کوانتومی که حاصل جمع آنها یکسان باشند حالت‌های یک انرژی را بیان می‌دارند. بنابراین مثلاً، در حالی که  $\psi_{000}$  ناتبهن است، حالت‌های  $\psi_{100}, \psi_{010}, \psi_{001}$  به‌طور سه‌گانه تبهن‌اند. تبهگنی تراز  $\varepsilon_{\bar{n}}$ ، که در آن  $\bar{n} = n_x + n_y + n_z$ ، برابر است با تعداد طرقتی که می‌توان سه عدد صحیح غیرمنفی انتخاب کرد به‌طوری که حاصل جمع آنها  $\bar{n}$  شود، یعنی

$$\text{تبهگنی تراز } \bar{n} = \frac{1}{2}(\bar{n} + 1)(\bar{n} + 2) \quad (22-5)$$

نوسانگر همسانگرد ( $V = \frac{1}{2}K(x^2 + y^2 + z^2) = \frac{1}{2}Kr^2$ ) مثالی از مسئله نیروی مرکزی است (نیرو در امتداد بردار مکانی) و از این رو در مختصات قطبی نیز تفکیک پذیر است. به‌زودی خواهیم دید که حل مسئله در مختصات کروی منجر به مجموعه‌ای از ویژه تابع‌های تبهن می‌شود که با مجموعه (۱۹-۵) متفاوت است، هرچند طیف انرژی همان طیف است. در زیر نشان خواهیم داد که ویژه تابع‌های کروی تبهن، حداکثر ترکیبات خطی توابع دکارتی تبهن‌اند. بنابراین، وقتی مسئله برای ویژه حالت‌های نوسانگر همسانگرد حل می‌شود، باید بیشتر دقت کنیم که کدام مجموعه حالت‌ها مورد نظر است.

## ۵ - مختصات منحنی الخط

مسائل مهم فیزیکی زیادی وجود دارند که در آنها معادله شرودینگر در مختصات دکارتی تفکیک نمی‌شود. از مهمترین آنها مسئله پتانسیل کولنی وابسته به اتم هیدروژن است که در مختصات کروی و سهموی تفکیک پذیر است. ما به‌طور اختصار بعضی جنبه‌های مختصات منحنی الخط عام را بررسی می‌کنیم.

یک مجموعه مختصات توسط تبدیل

$$q_i = q_i(x, y, z) \quad (i = 1, 2, 3, \dots)$$

تعریف می‌شود. اگر مربع یک عنصر دیفرانسیلی طول فقط جمله‌های  $dq_i^2$  را در بر داشته باشد و نه جمله‌های ضربدری  $dq_i dq_j$  را، سیستم مختصات متعامد نامیده می‌شود و می‌توان قرار دارد

$$dl^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2 = h_1^2 dq_1^2 + h_2^2 dq_2^2 + h_3^2 dq_3^2 \quad (۲۳-۵)$$

پارامترهای  $h_1$ ،  $h_2$  و  $h_3$  ضرایب متریک نامیده می‌شوند و هرکدام از آنها تابعی از  $q_i$  ها می‌باشند. وقتی  $h$  ها تعیین شدند، لاپلاسی می‌تواند به صورت

$$\nabla^2 = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left\{ \frac{\partial}{\partial q_1} \frac{h_2 h_3}{h_1} \frac{\partial}{\partial q_1} + \frac{\partial}{\partial q_2} \frac{h_1 h_3}{h_2} \frac{\partial}{\partial q_2} + \frac{\partial}{\partial q_3} \frac{h_1 h_2}{h_3} \frac{\partial}{\partial q_3} \right\} \quad (۲۴-۵)$$

بیان شود و عنصر حجم خواهد شد

$$d\tau = dx dy dz = h_1 h_2 h_3 dq_1 dq_2 dq_3 \quad (۲۵-۵)$$

تبدیلات به مختصات قطبی کروی و قطبی استوانه‌ای، به عنوان مثال (شکل ۵-۱)، عبارتند از

$$\begin{array}{ll} x = r \sin \theta \cos \phi & x = \rho \cos \phi \\ y = r \sin \theta \sin \phi & y = \rho \sin \phi \\ z = r \cos \theta & z = z. \end{array} \quad (۲۶-۵)$$

یک محاسبه ساده با استفاده از (۲۳-۵) و (۲۶-۵) نتیجه می‌دهد

$$\begin{array}{ll} h_r = 1 & h_\rho = 1 \\ h_\theta = r & h_\phi = \rho \\ h_\phi = r \sin \theta & h_z = 1 \end{array}$$

و لاپلاسی‌ها و عناصر حجم به ترتیب عبارت خواهند بود از

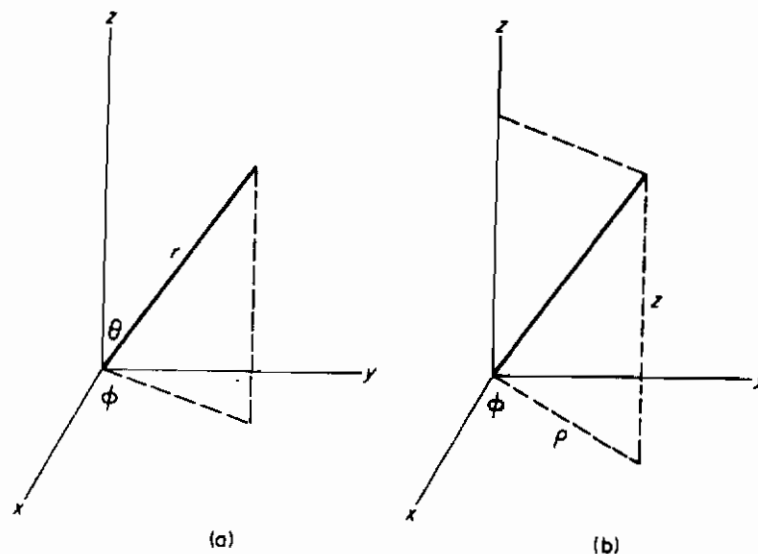
$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2 \sin \theta} \left\{ \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial \phi} \left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \right\}$$

$$d\mathbf{r} = r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\phi$$

۹

$$\nabla^2 = \frac{1}{\rho} \left\{ \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial}{\partial \phi} \left( \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \rho \frac{\partial}{\partial z} \right) \right\}$$

$$d\mathbf{r} = \rho \, d\rho \, d\phi \, dz$$



شکل (۵-۱) معنی هندسی متغیرهای (الف) قطبی‌کروی  $(r, \theta, \phi)$  و (ب) قطبی استوانه‌ای  $(\rho, \phi, z)$

دستگاه‌های مختصات منحنی‌الخط متعامد زیادی وجود دارند و یک مسئله معین ممکن است در بیش از یک دستگاه تفکیک‌پذیر باشد\* . مسئله نیروی مرکزی ، همان‌طور که در زیر خواهیم دید ، همیشه در مختصات قطبی کروی تفکیک‌پذیر است .

\* به‌عنوان مثال به‌مرجع زیر رجوع کنید

P.M. Morse and H. Feshbach, " Methods of Theoretical physics," Volume I, P. 655. Mc Graw-Hill, New-York, 1953.

۶- مسئله نیروی مرکزی  $V = V(r)$

معادله شرودینگر برای ذره‌ای که توسط یک پتانسیل نیروی مرکزی مقید شده است در مختصات کروی عبارت است از

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left( \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \right\} + V(r) \right] \times \psi_i(r, \theta, \phi) = \varepsilon_i \psi_i(r, \theta, \phi). \quad (۲۷-۵)$$

علاوه بر شرط معمولی حالت مقید،  $\psi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$ ، باید تک مقداری بودن را نیز تحمیل کنیم، یعنی،

$$\psi_i(r, \theta, \phi) = \psi_i(r, \theta, \phi + 2\pi)$$

زیرا نقاط  $\phi$  و  $\phi + 2\pi$  در واقع یک نقطه فیزیکی هستند.

جواب آزمایشی  $\psi_i = R(r)Y(\theta, \phi)$  را در (۲۷-۵) قرار می‌دهیم و پس از ساده کردن خواهیم داشت

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) \right\} + (\varepsilon_i - V(r))r^2 \\ = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{Y} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right\} \end{aligned} \quad (۲۸-۵)$$

چون متغیر  $r$  در یکطرف و متغیرهای  $\theta$  و  $\phi$  در طرف دیگر قرار دارند، (۲۸-۵) فقط در صورتی می‌تواند برای تمام مقادیر  $r$ ،  $\theta$  و  $\phi$  برقرار باشد که هرکدام از طرفین برابر با مقدار ثابتی باشد. با انتخاب این ثابت\* به شکل  $(\hbar^2/2m)l(l+1)$ ، دو معادله

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} R(r) = \varepsilon_i R(r) \quad (۲۹-۵)$$

و

---

\* این انتخاب برای ثابت تفکیک به معادلاتی منجر می‌شود که برای متخصصین ریاضی فیزیک آشناست و لذا بررسی آنها آسانتر است.

$$-\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\} Y = \hbar^2 l(l+1) Y \quad (۳۰-۵)$$

را به دست خواهیم آورد .

به زودی به مفهوم فیزیکی این معادلات باز خواهیم گشت . نخست با فرض اینکه  $Y$  به شکل

$$Y = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

باشد فرایند تفکیک را ادامه می دهیم . در این صورت معادله (۳۰-۵) خواهد شد

$$\hbar^2 \left\{ \left[ \frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \right] + l(l+1) \sin^2 \theta \right\} = -\hbar^2 \frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} \quad (۳۱-۵)$$

مانند حالت قبل ، این معادله فقط در صورتی برقرار است که هر دو طرف آن برابر با یک عدد ثابت باشند . با انتخاب این ثابت تفکیک\* به شکل  $\hbar^2 m_l^2$  ، معادلات دیفرانسیل معمولی

$$-\hbar^2 \frac{d^2}{d\phi^2} \Phi_{m_l} = m_l^2 \hbar^2 \Phi_{m_l} \quad (۳۲-۵)$$

و

$$\hbar^2 \left\{ \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\Theta_{lm_l}}{d\theta} \right) \right] + \left[ l(l+1) - \frac{m_l^2}{\sin^2 \theta} \right] \Theta_{lm_l} \right\} = 0 \quad (۳۳-۵)$$

را به دست خواهیم آورد . در نتیجه ، معادله شرودینگر کاملاً " به (۲۹-۵) ، (۳۲-۵) و (۳۳-۵) که به ترتیب معادلات دیفرانسیل معمولی از متغیرهای  $r$  ،  $\phi$  و  $\theta$  هستند ، تفکیک می شود . لذا جواب کلی به صورت زیر در می آید

$$\psi_{lm_l} = R(r)Y_{lm_l}(\theta, \phi) = R(r)\Theta_{lm_l}(\theta)\Phi_{m_l}(\phi)$$

اینک به مسئله انتساب مفهوم فیزیکی به معادلات زاویه ای و ثابتهای تفکیک می پردازیم .

توجه کنیم که در معادلات (۳۰-۵)، (۳۲-۵) و (۳۳-۵) فقط متغیرهای زاویه‌ای دخالت می‌کنند. بخصوص چون  $V(r)$  در آنها ظاهر نمی‌شود، این معادلات در تمام مسائل نیروی مرکزی مشترک‌اند. می‌توان تحقیق کرد که طرف چپ (۳۰-۵) در واقع همان عملگر  $\hat{L}^2$  است. با به‌کاربردن تبدیل از مختصات دکارتی به مختصات قطبی‌کروی و قاعده‌زنجیره‌ای مشتق‌گیری، نتیجه خواهیم گرفت

$$\begin{aligned}\hat{L}_x &= \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) = i\hbar \left( \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ \hat{L}_y &= \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) = i\hbar \left( -\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ \hat{L}_z &= \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}\end{aligned}\quad (۳۴-۵)$$

با انجام عملیات لازم، نتیجه می‌شود

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]$$

چون در (۳۰-۵) فقط مشتقات زاویه‌ای دخالت می‌کنند، وارد کردن  $R(r)$  در دو طرف این معادله تغییر نمی‌کند و لذا خواهیم داشت

$$\hat{L}^2 R Y_{lm_l} = \hbar^2 l(l+1) R Y_{lm_l}$$

یا

$$\hat{L}^2 \psi_{lm_l} = \hbar^2 l(l+1) \psi_{lm_l} \quad (۳۵-۵)$$

به‌علاوه، چون

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

نتیجه می‌شود که (۳۲-۵) عبارت است از

$$\hat{L}_z^2 \Phi_{m_l} = m_l^2 \hbar^2 \Phi_{m_l}$$

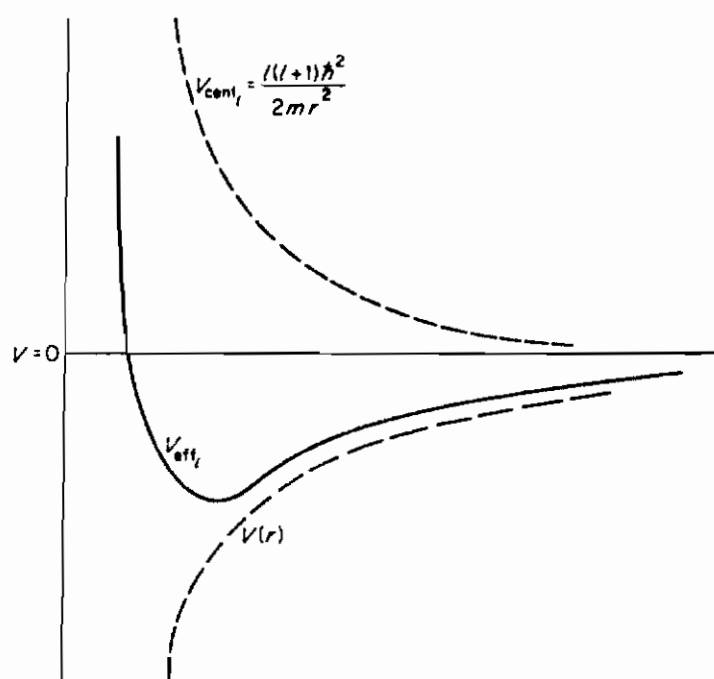
یا، با ضرب کردن دو طرف در  $R\Theta_{lm_l}$ ،

$$\hat{L}_z^2 \psi_{lm_l} = m_l^2 \hbar^2 \psi_{lm_l} \quad (۳۶-۵)$$

بدین ترتیب به نتیجه زیر می‌رسیم: فرایند تفکیک متغیرهای هر مسئله نیروی مرکزی در مختصات گروی همیشه منجر به ویژه تابعهائی از انرژی می‌شود که به طور همزمان ویژه تابعهائی  $L^2$  و  $L_z^2$  نیز هستند. ویژه مقادارها به ترتیب عبارت اند از  $l(l+1)\hbar^2$  و  $m_l^2\hbar^2$  که در آنها  $l$  و  $m_l$  باید تعیین شوند.

با بازگشت به معادله شعاعی مشاهده می‌کنیم که این معادله با یک معادله شرودینگر یک بعدی (جهت شعاعی) که پتانسیل مؤثر آن برابر با پتانسیل ناشی از نیروی مرکزی به اضافه یک پتانسیل گریزاز مرکز (دافعه) وابسته به تکانه زاویه‌ای (شکل ۵-۲) می‌باشد هم ارز است، یعنی،

$$V_{\text{eff}l}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \quad (۳۷-۵)$$



شکل (۵-۲) پتانسیلهای مؤثر شعاعی  $(V_{\text{eff}l})$  و گریزاز مرکز  $(V_{\text{cent}l})$  و نیروی

مرکزی  $(V(r))$ .



جمله اول در (۵-۲۹) می‌تواند به عنوان انرژی جنبشی شعاعی\* در نظر گرفته شود.

$$\frac{\hat{p}_r^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) \quad (۵-۳۸)$$

چون در همه مسائل نیروی مرکزی (۵-۳۲) و (۵-۳۳) به طور مشترک وجود دارند، بهتر است نخست حل آنها را مورد مطالعه قرار دهیم. با این کار ما عملاً "تگانه زاویه‌ای" را کوانتیده کرده‌ایم. امکان اینکه هامیلتونی نیروی مرکزی دارای ویژه حالت‌های مشترک با  $\hat{L}^2$  و  $\hat{L}_z$  باشد می‌توانست از روابط جابه‌جایی

$$[\mathcal{H}_{cf}, \hat{L}^2] = [\mathcal{H}_{cf}, \hat{L}_z] = 0 \quad (۵-۳۹)$$

پیش‌بینی شود. تحقیق این روابط به عنوان تمرین واگذار می‌شود.

## ۷- کوانتش تگانه زاویه‌ای

دیدیم که تفکیک متغیرهای یک مسئله نیروی مرکزی در مختصات کروی همیشه منجر به معادله زاویه‌ای

$$-\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\} Y_{lm}(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (۵-۴۰)$$

\* توجه کنید که

$$\hat{p}_r = \left( \frac{\hat{p}}{r} \right) \cdot \hat{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r}$$

هرمیتی نیست زیرا از حاصل ضرب عملگرهای هرمیتی‌ای که جابه‌جاپذیر نیستند به دست آمده است، یک نمایش قابل قبول برای  $\hat{p}_r$  شکل هرمیتی (به مسئله ۵-۱۳ مراجعه کنید)

$$\hat{p}_r = \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{\hat{p}}{r} \right) \cdot \hat{p} + \hat{p} \cdot \left( \frac{\hat{p}}{r} \right) \right] \rightarrow \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \right)$$

است که از آن نتیجه می‌شود

$$\frac{\hat{p}_r^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$$

می‌شود که پس از یک تفکیک دیگر،  $Y_{lm} = \Theta_{lm}(\theta)\Phi_{lm}(\phi)$ ، منجر می‌شود به

$$\sin \theta \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\Theta_{lm}}{d\theta} \right) + (-m_l^2 + l(l+1)\sin^2 \theta)\Theta_{lm} = 0 \quad (41-5)$$

و

$$-\hbar^2 \frac{d^2}{d\phi^2} \Phi_{m_l} = m_l^2 \hbar^2 \Phi_{m_l} \quad (42-5)$$

بعلاوه، (۴۰-۵) و (۴۲-۵) معرف معادلات ویژه مقداری برای  $\hat{L}^2$  و  $\hat{L}_z$  (یا دقیقتر بگوئیم  $\hat{L}_z^2$ ) با اعداد کوانتومی  $l$  (موسوم به مداری) و  $m_l$  (موسوم به سمتی یا "مغناطیسی") می‌باشند. وقتی که مقادیر مجاز  $l$  و  $m_l$  تعیین شدند، ویژه مقدارهای  $\hat{L}^2$  و  $\hat{L}_z$  می‌توانند به ترتیب به صورت  $l(l+1)\hbar^2$  و  $m_l\hbar$  نوشته شوند.

مشاهده می‌کنیم که هر جواب

$$\hat{L}_z \Phi_{m_l} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\phi} \Phi_{m_l} = m_l \hbar \Phi_{m_l} \quad (43-5)$$

خود به خود جواب (۴۲-۵) نیز هست. جواب (۴۳-۵) ویژه تابعهای  $\hat{L}_z$  را به صورت  $\Phi_{m_l} \propto e^{im_l\phi}$ ، به دست می‌دهد. اما تک مقداری بودن  $\psi$  ایجاب می‌کند که

$$\begin{aligned} \Phi_{m_l}(\phi + 2\pi) &= \Phi_{m_l}(\phi) \\ e^{im_l(\phi + 2\pi)} &= e^{im_l\phi} \end{aligned}$$

یا

$$e^{im_l 2\pi} = 1$$

که از آن نتیجه می‌شود  $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . لذا ویژه مقدارهای  $\hat{L}_z$  عبارتند از  $0, \pm\hbar, \pm 2\hbar, \dots$ . سپس توجه خود را به (۴۱-۵) معطوف می‌کنیم که، با استفاده از  $u = \cos \theta$ ، می‌تواند به

$$\frac{d}{du} \left[ (1-u^2) \frac{d}{du} \Theta_{lm}(u) \right] + \left( l(l+1) - \frac{m_l^2}{1-u^2} \right) \Theta_{lm}(u) = 0 \quad (44-5)$$

تبدیل شود. معادله (۴۴-۵) معادله وابسته لوژاندر است و جوابهای آن عبارتند از توابع

وابسته لوژاندر، جایگذاری

$$\Theta_{lm_l} = (1 - u^2)^{|m_l|/2} \frac{d^{|m_l|}}{du^{|m_l|}} P_l(u) \quad (45-5)$$

در (44-5) آنرا به معادله معمولی (مستقل از  $m_l$ ) لوژاندر تبدیل می‌کند

$$\frac{d}{du} \left[ (1 - u^2) \frac{dP_l(u)}{du} \right] + l(l+1)P_l(u) = 0 \quad (46-5)$$

که در آن  $P_l$  توابع لوژاندر معمولی هستند. معادله (46-5) باید با شرط متناهی بودن ویژه تابعها حل شود.

بنابراین، انتظار داریم

$$P_l(u) = \text{متناهی} \quad , \quad -1 \leq u \leq 1 \quad (0 \leq \theta \leq \pi) \quad \text{برای}$$

روش به کار برده شده در اینجا کاملاً شبیه به روش حل معادله هرمیت مربوط به ویژه تابعهای نوسانگر است. جواب معادله را به صورت سری

$$P_l(u) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j u^j$$

در نظر می‌گیریم که پس از جایگذاری در (46-5) معادله بازگشتی دوجمله‌ای

$$a_{j+2} = \frac{j(j+1) - l(l+1)}{(j+1)(j+2)} a_j \quad (47-5)$$

را به دست می‌دهد. دوباره با انتخاب دلخواه  $a_0$  و  $a_1$  یک سری زوج یا فرد ایجاد می‌کنیم. متأسفانه، همان‌طور که می‌توان تحقیق کرد، در  $u = \pm 1$  هر دو جواب سری مانند واگرا می‌شوند و این واگرایی آنها را به عنوان ویژه تابع غیرقابل قبول می‌کند. اما اگر  $l$  یک عدد صحیح مثبت یا صفر باشد، در این صورت یا سری زوج یا سری فرد (بسته به مقدار  $l$ ) قطع می‌شود. برای  $l$  زوج، یک چندجمله‌ای زوج از درجه  $l$  به دست خواهیم آورد. هم‌چنین، وقتی  $l$  فرد باشد یک چندجمله‌ای فرد از درجه  $l$  به دست خواهد آمد. چون چندجمله‌ایها در  $u = \pm 1$  متناهی می‌مانند ویژه تابعهای قابل قبولی هستند.

به‌طور قراردادی  $a_0^{(l)}$  و  $a_1^{(l)}$  را طوری انتخاب می‌کنند که  $P_l(1) \equiv 1$  باشد، در این صورت

چند جمله‌ایها چند جمله‌ایهای لوزاندر هستند. چندتای اول آنها عبارتند از

$$\begin{aligned} P_0(u) &= 1 & P_3(u) &= \frac{1}{2}(5u^3 - 3u) \\ P_1(u) &= u & P_4(u) &= \frac{1}{8}(35u^4 - 30u^2 + 3) \\ P_2(u) &= \frac{1}{2}(3u^2 - 1) & P_5(u) &= \frac{1}{8}(63u^5 - 70u^3 + 15u) \end{aligned} \quad (۴۸-۵)$$

چند جمله‌ایهای (معمولی) لوزاندر دارای خواص مفید زیراند

$$(۱) \quad (1 - 2uz + z^2)^{-1/2} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(u)z^l \quad (\text{تابع مولد})$$

$$(۲) \quad P_l(u) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{du^l} (u^2 - 1)^l \quad (\text{فرمول رودریگز})$$

$$(۳) \quad (l+1)P_{l+1}(u) - (2l+1)uP_l(u) + lP_{l-1}(u) = 0$$

$$(۴) \quad (u^2 - 1)P_l'(u) = luP_l(u) - lP_{l-1}(u)$$

$$(۵) \quad \int_{-1}^1 P_l(u)P_{l'}(u) du = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'} \quad (\text{تعامد}) \quad (۴۹-۵)$$

با استفاده از (۴۵-۵)، توابع وابسته لوزاندر\* خواهند شد

$$\Theta_{lm_l} = P_l^{m_l} = (1 - u^2)^{|m_l|/2} \frac{d^{|m_l|}}{du^{|m_l|}} P_l(u) \quad (۵۰-۵)$$

توابع وابسته دارای خاصیت راست هنجاری

$$\int_{-1}^1 P_l^{m_l}(u)P_{l'}^{m_l}(u) du = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+|m_l|)!}{(l-|m_l|)!} \delta_{ll'}$$

هستند. چون مشتق  $|m_l|$ ام یک چند جمله‌ای از درجه  $l$  بجز برای  $m_l \leq 0$  صفر است، از (۵۰-۵) نتیجه می‌شود که یک ویژه تابع فقط وقتی وجود خواهد داشت که عدد مغناطیسی از شاخص مداری تجاوز نکند\*\*.

هماهنگ‌های کروی (بهنجار شده) به صورت

\* به خاطر عامل  $(1 - u^2)^{|m_l|/2}$ ، توابع  $\Theta_{lm_l}$  چند جمله‌ای نیستند

\*\* این محدودیت متناظر با این شرط کلاسیکی است که هرمولفه یک بردار  $(L_z)$  نمیتواند از اندازه خود بردار  $(L)$  بزرگتر باشد.

$$Y_{lm_l}(\theta, \phi) = \left[ \frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m_l|)!}{(l+|m_l|)!} \right]^{1/2} P_l^{m_l}(u = \cos \theta) e^{im_l \phi} \quad (5-51)$$

تعریف شده‌اند که در آنها  $l = 0, 1, 2, \dots$  و  $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . این هماهنگ‌ها ویژه تابعهای  $\hat{L}^2$  و  $\hat{L}_z$  با ویژه مقدارهای  $l(l+1)\hbar^2$  و  $m_l\hbar$  هستند و دارای خاصیت بهنجارش زیراند

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{lm_l}^*(\theta, \phi) Y_{l'm_l'}(\theta, \phi) \sin \theta \, d\theta \, d\phi = \delta_{ll'} \delta_{m_l m_l'} \quad (5-52)$$

ویژه تابع کلی هر مسئله نیروی مرکزی به صورت زیر در می‌آید

$$\psi_{nlm_l} = R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \phi) \quad (5-53)$$

در اینجا یک عدد کوانتومی سومی،  $n$ ، وارد کرده‌ایم که مفهوم آنرا هنوز مشخص نکرده‌ایم. بنابراین، ویژه تابعهایی که بدین طریق ایجاد شده‌اند به طور همزمان هم ویژه تابعهای هامیلتونی نیروی مرکزی،  $\mathcal{H}_{cf}$ ، هستند و هم ویژه تابعهای عملگرهای  $\hat{L}^2$  و  $\hat{L}_z$ . در این مرحله خواننده ممکن است سؤال کند که، در حالی که  $\mathcal{H}_{cf}$  با  $\hat{L}_x$  و  $\hat{L}_y$  نیز جابه‌جاپذیر است، پس چرا فقط ویژه تابع  $\hat{L}_z$  ظاهر شده است؟ به طور معادل، در مسئله‌ای که تقارن کروی دارد، محور  $z$  چه ویژگی خاصی دارد؟ جواب این است که این ریاضی است، و نه فیزیک که محور  $z$  را ممتاز کرده است. با نگاهی به تبدیل به مختصات کروی (۵-۲۶)، مشاهده می‌کنیم که زاویه  $\theta$  به وسیله میل نسبت به محور  $z$  تعریف شده است. اگر دقیقتر بگوئیم، ویژه تابع  $\psi_{nlm_l}$  ویژه تابع  $\hat{L}^2$  و یکی از مولفه‌های  $\hat{L}$  روی هر امتدادی در فضا است. برای سهولت ریاضی این امتداد به عنوان محور  $z$  در نظر گرفته می‌شود. از رابطه کروسه پواسن (۲-۲۸) نتیجه می‌شود که رابطه جابه‌جایی برای مولفه‌های تگانه زاویه‌ای باید به صورت زیر باشند

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \hat{L}_k \quad , \quad i, j, k = x, y, z \quad (\text{در یک ترتیب چرخه‌ای}) \quad (5-54)$$

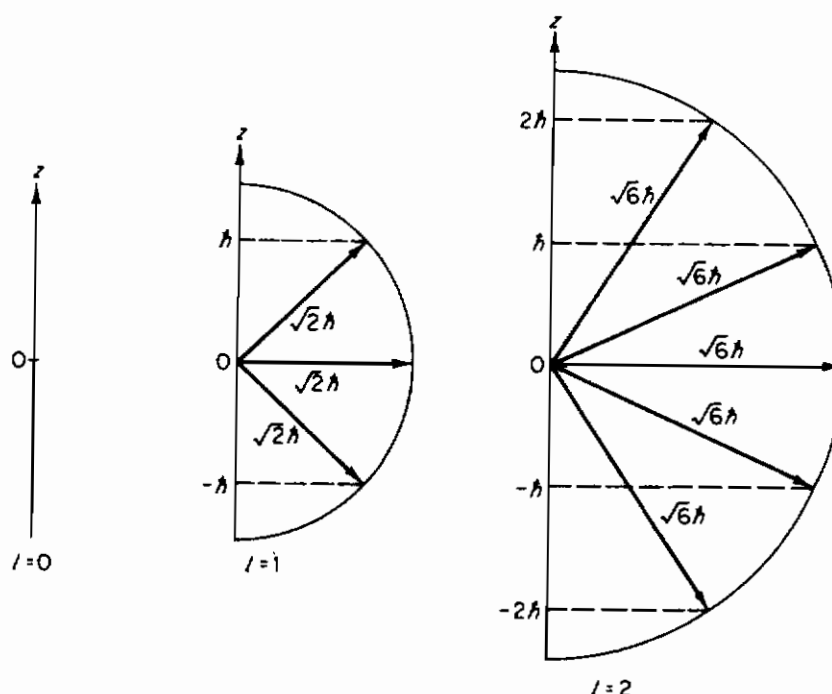
ناسازگاری هردو مولفه‌ای از  $\hat{L}$  روشن می‌کند که چرا فقط ویژه تابعهای یکی از مولفه‌های آن می‌توانند به طور همزمان با  $\hat{L}^2$  و  $\mathcal{H}_{cf}$  هم‌کوانتیده شوند. با اینکه  $\mathcal{H}_{cf}$  با  $\hat{L}_x$ ،  $\hat{L}_y$  و  $\hat{L}_z$  جابه‌جاپذیر است، مولفه‌های  $\hat{L}$  بین خودشان جابه‌جاپذیر نیستند.

ویژه تابعهای نیروی مرکزی،  $\psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi)$ ، متناظر با ویژه کتهایی با خواص زیراند

$$\begin{aligned}\mathcal{H}|n, l, m_l\rangle &= \varepsilon_{nl}|n, l, m_l\rangle \\ \hat{L}^2|n, l, m_l\rangle &= l(l+1)\hbar^2|n, l, m_l\rangle \quad (l=0, 1, 2, \dots) \quad (5-55)\end{aligned}$$

۹

$$\hat{L}_z|n, l, m_l\rangle = m_l\hbar|n, l, m_l\rangle \quad (m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l)$$



شکل (۳-۵) کوانتش  $L$  و  $L_z$ . توجه کنید که بردار  $L$  هرگز بر محور  $z$  منطبق نمی‌شود.

معادله شعاعی (۲۹-۵) شامل  $m_l$  نیست، در نتیجه ویژه مقدارهای انرژی حداکثر به اعداد کوانتومی  $n$  و  $l$  بستگی دارند. بنابراین، یک تهیگنی "جهتی" یا فضائی نسبت به حالت‌های کوانتومی مغناطیسی خواهیم داشت. این تهیگنی جهتی ترازهای  $\varepsilon_{nl}$  حداقل از مرتبه  $2l+1$  است (زیرا برای یک  $m_l$  معین این تعداد  $l$  وجود دارد) و می‌تواند به تقارن‌کروی پتانسیل (شکل ۳-۵) نسبت داده شود. نتیجه می‌شود که هر ترکیب خطی از زیر حالت‌های مغناطیسی یک ویژه حالت  $\mathcal{H}$  و  $L^2$  نیز هست، یعنی

$$|n, l\rangle' = \sum_{m_l=-l}^l a_{m_l}|n, l, m_l\rangle$$

یا

$$\psi'_{nl} = \sum_{m_l=-l}^l a_{m_l} \psi_{nlm_l}$$

اما، چون مقادیر  $m_l$  را "مخلوط" کرده‌ایم، ویژه حالت‌های جدید دیگر ویژه حالت‌های  $L_z$  نیستند.

عدد کوانتومی سوم یا اصلی  $n$  (و در نتیجه  $\varepsilon_n$ ) باید به وسیله معادله شعاعی برای مسئله نیروی مرکزی خاص تعیین شود. به عنوان چند مثال، ذره آزاد، نوسانگر همسانگرد و مسئله کولنی را بررسی می‌کنیم.

### ۸- ذره آزاد (مختصات کروی)

ویژه تابع ذره آزاد در مختصات دکارتی به دست آورده شد و نشان داده شد که به صورت  $e^{ik \cdot r}$  است. اینک ویژه تابع‌های ذره آزاد در مختصات کروی را در نظر خواهیم گرفت. معادله موج (۲۷-۵) باید با  $V(r) = 0$  حل شود. برای هر ویژه حالت انرژی سه عدد کوانتومی  $l$ ،  $k$  و  $m_l$  وجود دارد. جواب باید به صورت  $\psi_{klm_l} = R_{kl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \phi)$  باشد، که در آن پارامتر کوانتومی پیوسته  $k$  به جای  $n$  به کار رفته است. معادله شعاعی (۲۹-۵) برای ذره آزاد ( $V = 0$ ) خواهد شد

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR_{kl}}{dr} \right) + \left[ k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{kl} = 0 \quad (۵۶-۵)$$

که در آن  $k^2 = 2m\varepsilon_k/\hbar^2$ . با استفاده از تغییر متغیر  $\rho = kr$ ، معادله فوق به صورت معادله بسل کروی

$$\frac{1}{\rho^2} \frac{d}{d\rho} \left( \rho^2 \frac{dR_l(\rho)}{d\rho} \right) + \left( 1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) R_l(\rho) = 0 \quad (۵۷-۵)$$

با جواب عمومی

$$R_l(kr) = A_l j_l(kr) + B_l n_l(kr)$$

در می‌آید که  $j_l$  و  $n_l$  به ترتیب توابع بسل کروی\* و نیومن<sup>۱</sup> کروی مرتبه  $l$  نامیده می‌شوند. مجدداً می‌خواهیم که  $\psi$  در همه جا متناهی باشد. توابع نیومن دارای ویژگی  $n_l(kr) \xrightarrow{r \rightarrow 0} \infty$  هستند و بنابراین جوابهای قابل قبولی برای مسئله ما نیستند. در نتیجه ویژه تابعها و ویژه مقدارهای ذره آزاد به صورت

$$\psi_{klm_l} = j_l(kr) Y_{lm_l}(\theta, \phi) \quad (5-58)$$

و  $\epsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$  در می‌آیند. توجه کنیم که انرژی فقط به پارامتر اصلی  $k$  بستگی دارد، و در نتیجه تبهگنی شامل  $l$  و  $m_l$  است. باید این امکان وجود داشته باشد که ترکیبات خطی حالت‌های مربوط به یک  $k$  ولی با  $l$  ها و  $m_l$  های متفاوت را تشکیل داد و به جواب دکارتی که قبلاً به دست آمد رسید، یعنی

$$e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m_l=-l}^l a_{lm_l}(k) j_l(kr) Y_{lm_l}(\theta, \phi) \quad , \quad |\mathbf{k}| = k$$

برای حالت خاصی که در آن  $k$  در امتداد محور  $z$  قرار دارد، می‌توان ضرایب را طوری حساب کرد که داشته باشیم

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (5-59)$$

ویژه تابعهای کروی ذره آزاد به‌طور همزمان هم ویژه تابعهای  $L^2$  هستند و هم ویژه تابعهای  $L_z$  (به جای  $\hat{p}$ )؛ اهمیت دستگاه مختصات به‌کاربرده شده برای به دست آوردن ویژه تابعهای انرژی حالا باید روشن شده باشد.

## ۹- نوسانگر همسانگرد

معادله شعاعی (۵-۲۹) برای این مسئله ( $V = \frac{1}{2}Kr^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$ ) به صورت

\* این توابع بسل توسط رابطه زیر به توابع بسل استوانه‌ای مربوط اند

$$j_l(kr) = \left( \frac{\pi}{2kr} \right)^{1/2} J_{l+1/2}(kr)$$



$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR_{nl}}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left( \varepsilon_{nl} - \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_{nl} = 0 \quad (5-60)$$

درمی‌آید. به دست آوردن جواب طولانی است و تشریح دقیق آن روشنگری خاصی دربر ندارد. لذا صرفاً به طرح نکات عمده روشهای به کار برده شده اکتفا خواهیم کرد. نخست قرار می‌دهیم  $\rho = \alpha r^2$ ، که در آن  $\alpha = m\omega/\hbar$ ، و می‌نویسیم

$$R_{nl} = \rho^{(l+1)/2} e^{-\rho/2} \frac{L_n^{l+1/2}}{\rho^{1/2}}$$

سپس انرژی را برابر با  $\varepsilon_{nl} = \hbar\omega(2n + l + \frac{3}{2})$  قرار می‌دهیم. در این صورت (5-60) به صورت معادله ابر هندسی (رک 5-68)

$$\rho \frac{d^2}{d\rho^2} L_n^{l+1/2}(\rho) + \left[ \left( l + \frac{1}{2} \right) + 1 - \rho \right] \frac{d}{d\rho} L_n^{l+1/2}(\rho) + n L_n^{l+1/2}(\rho) = 0 \quad (5-61)$$

در می‌آید. جوابها در  $r \rightarrow \infty$  واگرا می‌شوند مگر اینکه  $n$  عدد صحیح باشد ( $n = 0, 1, 2, \dots$ ) که در این صورت جوابهای  $L_n^{l+1/2}$  چند جمله‌ایهای لاگرا (از مرتبه نیمه صحیح) خواهند بود. چندتای اول عبارتند از

$$\begin{aligned} L_0^{1/2} &= 1 & L_1^{1/2} &= \frac{3}{2} - \rho \\ L_0^{3/2} &= 1 & L_1^{3/2} &= \frac{5}{2} - \rho \end{aligned}$$

ویژه تابعها و ویژه مقدارهای نوسانگر\* خواهند شد

\* می‌توان (5-62) را بر حسب  $\bar{n}$ ، به صورت زیر بیان کرد

$$\psi_{nlm} = r^l e^{-\alpha r^2/2} L_{\bar{n}-l}^{l+1/2}(\alpha r^2) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad , \quad \varepsilon_n = (\bar{n} + \frac{3}{2})\hbar\omega$$

در این شکل به وضوح دیده می‌شود که انرژی به عدد کوانتومی  $\bar{n}$  بستگی دارد و نه به  $l$ . چنین اتفاقی برای یک مساله نیروی مرکزی به عنوان تبهگنی "تصادفی" نامیده می‌شود و از تقارن خاصی غیر از تقارن کروی پتانسیل ناشی می‌شود. این تقارن معمولاً از این واقعیت نتیجه می‌شود که معادله شرودینگر برای این پتانسیل در دستگاه مختصاتی غیر از مختصات کروی تفکیک پذیر است.

$$\psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) \propto \frac{r^{l+1} e^{-\alpha r^2/2} L_n^{l+1/2}(\alpha r^2) Y_{lm_l}(\theta, \phi)}{r} \quad (۶۲-۵)$$

و

$$\varepsilon_{nl} = \varepsilon_{\bar{n}} = (\bar{n} + \frac{3}{2})\hbar\omega \quad (۶۳-۵)$$

که در آن  $\bar{n} = 2n + l = 0, 1, 2, \dots$ . ویژه مقدارها با مقادیری که در مختصات دکارتی به دست آمدند در توافق کامل هستند. این دو مجموعه اعداد کوانتومی با رابطه  $n_x + n_y + n_z = \bar{n} = 2n + l$  به یکدیگر مربوط می‌شوند. از (۶۲-۵) ویژه تابع حالت پایه ( $n = l = m_l = 0$ ) عبارت است از

$$\psi_{000} \propto e^{-\alpha r^2/2} L_0^{1/2} Y_{00} \propto e^{-\alpha r^2/2} = e^{-\alpha(x^2+y^2+z^2)/2} \quad (۶۴-۵)$$

و انرژی آن برابر است با  $\varepsilon_{000} = \frac{3}{2}\hbar\omega$ . این حالت ناتبهن و یکتاست و بنابراین (به استثنای بهنجارش) با نتیجه دکارتی (۵-۱۹) یکسان است.

اولین حالت برانگیخته ( $n = 0, l = 1$ ) به طور سه گانه تبهن است و انرژی وابسته به هر سه تابع  $\psi_{010}$ ,  $\psi_{011}$  و  $\psi_{01-1}$  یکسان و برابر با  $\frac{5}{2}\hbar\omega$  است. در اینجا نیز باید بتوان از ویژه تابعهای کروی حالتی دکارتی تبهن را ساخت. اتفاقاً " $\psi_{001}(x, y, z)$  و  $\psi_{010}(r, \theta, \phi)$ " یکسان هستند، یعنی

$$\psi_{010}(r, \theta, \phi) = e^{-\alpha r^2/2} r \cos \theta = e^{-\alpha(x^2+y^2+z^2)/2} z = \psi_{001}(x, y, z)$$

از طرف دیگر، نتیجه می‌گیریم که، همان طور که می‌توان از رابطه زیر دید،  $\psi_{100}(x, y, z)$  یک ترکیب خطی از  $\psi_{011}(r, \theta, \phi)$  و  $\psi_{01-1}(r, \theta, \phi)$  است

$$\begin{aligned} \psi_{100}(x, y, z) &= e^{-\alpha(x^2+y^2+z^2)/2} x = e^{-\alpha r^2/2} r \sin \theta \cos \phi \\ &= e^{-\alpha r^2/2} \sin \theta \frac{1}{2}(e^{i\phi} + e^{-i\phi}) \\ &= \frac{1}{2}[\psi_{011}(r, \theta, \phi) + \psi_{01-1}(r, \theta, \phi)] \end{aligned}$$

محاسبه مشابهی نشان می‌دهد که

$$\psi_{010}(x, y, z) = \frac{1}{2i} [\psi_{011}(r, \theta, \phi) - \psi_{01-1}(r, \theta, \phi)]$$

در حالی که ویژه تابعها و اعداد کوانتومی با سیستم مختصات تغییر می‌کنند، ویژه مقدارهای انرژی و تبهگنی یک تراز همیشه یکی هستند. ارتباط بین ویژه تابعهای کروی و دکارتی وابسته به یک نوسانگر در جدول (۵-۱) خلاصه شده‌اند

جدول (۵-۱)  
طبقه‌بندی چند حالت اول نوسانگر

تبهگنی	ویژه تابع کروی	ویژه تابع دکارتی	انرژی	حالت
$\frac{1}{2}(\bar{n} + 1)(\bar{n} + 2)$	$\psi_{nlm_l}$	$\psi_{n_x n_y n_z}$	$\epsilon_n = (\bar{n} + \frac{1}{2})\hbar\omega$	$\bar{n} = 2n + 1$ $\bar{n} = n_x + n_y + n_z$
1	$\psi_{000}$	$\psi_{000}$	$\frac{1}{2}\hbar\omega$	حالت پایه $\bar{n} = 0$
3	$\psi_{011}, \psi_{01-1}, \psi_{010}$	$\psi_{100}, \psi_{010}, \psi_{001}$	$\frac{3}{2}\hbar\omega$	اولین حالت برانگیخته $\bar{n} = 1$
6	$\psi_{022}, \psi_{02-2}, \psi_{021}, \psi_{02-1}, \psi_{020}, \psi_{100}$	$\psi_{110}, \psi_{101}, \psi_{011}, \psi_{200}, \psi_{020}, \psi_{002}$	$\frac{5}{2}\hbar\omega$	دومین حالت برانگیخته $\bar{n} = 2$

#### ۱۰ - حالت‌های مقید یک پتانسیل جاذبه کولنی ( $V = -K/r$ )

مسئله کولنی شاید مهمترین مثالی از یک مسئله نیروی مرکزی باشد که ما بررسی خواهیم کرد. الکترون هیدروژنی تحت تأثیر پتانسیلی از این نوع که ناشی از حضور پروتون در هسته است قرار دارد. بنابراین حل این مسئله توصیف نسبتاً دقیقی از رفتار ساده‌ترین اتمها ارائه می‌دهد، و با قدری تعمیم چارچوبی برای کل نظریه فیزیک اتمی به دست می‌دهد. با این وجود، از بعضی نظرها، این پتانسیل کولنی خاص‌ترین پتانسیلها است. خواهیم دید که حالت‌های مقید آن ( $\epsilon < 0$ ) ویژه مقدارهایی دارند که مستقل از  $l$  می‌باشند. این تبهگنی "تصادفی" جالب را، مثل مورد نوسانگر همسانگرد، می‌توان به یک تقارن ذاتی (علاوه بر تقارن فضایی) وابسته به پتانسیل  $1/r$  نسبت داد. به علاوه، حالت‌های نامقید آن به یک مقطع موثر برانگیزی کوانتومی منجر می‌شوند که با نتیجه کلاسیکی را ترفورد یکسان است\* و به یک

\* مرجع زیر را به بینید:

H. Goldstein, "Classical Mechanics," P.84. Addison-wesley, Reading, Massachusetts, 1950.

مقطع موثر کل واگرا منتهی می‌شود. در اینجا برد بلند پتانسیل کولنی مستقیماً" مسئول این واگرایی است.

بحث فعلی خود را به حالت‌های مقید که برای آنها ویژه مقدارهای انرژی گسسته و منفی است ( $\varepsilon_n < 0$ ) محدود می‌کنیم. معادله شعاعی برای پتانسیل کولنی (۵-۲۹) خواهد شد\*

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR_{nl}}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left( \varepsilon_n + \frac{K}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_{nl} = 0 \quad (۵-۶۵)$$

جوابهایی از این معادله را جستجو می‌کنیم که در شرط مرزی  $R_{nl}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$  صدق کنند. با قرار دادن  $\rho = 2\zeta_n r$ ، که در آن  $\zeta_n = (-2m\varepsilon_n/\hbar^2)^{1/2}$  و  $R_{nl} = y_{nl}(\rho)/\rho$  است، (۵-۶۵) شکل ساده‌تر

$$\left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\gamma_n}{\rho} - \frac{1}{4} \right\} y_{nl}(\rho) = 0 \quad (۵-۶۶)$$

را، که در آن  $\gamma_n = mK/\zeta_n \hbar^2$  است، می‌گیرد.

فرض کنیم یک جواب به صورت

$$y_{nl}(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho/2} F_{nl} \quad (۵-۶۷)$$

وجود دارد که در آن  $F$  یک سری توانی از متغیر  $\rho$  است. با قرار دادن (۵-۶۷) در (۵-۶۶) و ساده کردن آن، معادله ابرهندسی

$$\left\{ \rho \frac{d^2}{d\rho^2} + (\beta - \rho) \frac{d}{d\rho} - \alpha \right\} F(\alpha|\beta|\rho) = 0 \quad (۵-۶۸)$$

را به دست خواهیم آورد که در آن  $\alpha = l+1 - \gamma_n$  و  $\beta = 2(l+1) = 2, 4, 6, \dots$  جوابهای سری مانند  $F(\alpha|\beta|\rho)$  که در مبداء خوش رفتارند، سریهای ابرهندسی نامیده می‌شوند. با قرار دادن  $F = \sum_{j=0}^{\infty} a_j(\alpha, \beta) \rho^j$  در (۵-۶۸)، یک فرمول بازگشتی دو جمله‌ای به دست می‌آوریم که  $a_{j+1}$  را به  $a_j$  ربط می‌دهد. با انتخاب  $a_0 = 1$ ، بقیه ضرایب  $a_j$  می‌توانند محاسبه شوند و منجر به

---

\* تبهگنی "تصادفی" فرض می‌شود،  $\varepsilon_n = \varepsilon_n$ . این فرض با نتایج سازگار است.

$$F(\alpha|\beta|\rho) = 1 + \frac{\alpha}{\beta}\rho + \frac{\alpha(\alpha+1)}{2!\beta(\beta+1)}\rho^2 + \frac{\alpha(\alpha+1)(\alpha+2)}{3!\beta(\beta+1)(\beta+2)}\rho^3 + \dots$$

به عنوان یک جواب خصوصی کردند.

حال می‌توان تحقیق کرد که این سری بهینهایت در بینهایت واگرا می‌شود و منجر به ویژه تابع غیرقابل قبولی می‌گردد. اما برای حالت خاصی که در آن  $\alpha$  یک عدد صحیح منفی یا صفر باشد، سری قطع می‌شود و به یک چندجمله‌ای از درجه  $-\alpha = q$  تبدیل می‌شود و ویژه تابع قابل قبولی را نمایش می‌دهد. بنابراین جوابهای قابل قبول وقتبی وجود دارند که  $q = -\alpha = \gamma_n - (l+1) = 0, 1, 2, \dots$  باشد. چون  $l$  یک عدد صحیح غیر منفی است نتیجه می‌شود  $\gamma_n = n = 1, 2, 3, \dots$  به اضافه این شرط کمکی که  $l+1 \leq n$ . ویژه مقدارهای (منفی) انرژی فوراً به صورت

$$\gamma_n^2 = n^2 = \frac{m^2 K^2}{\zeta_n^2 \hbar^4} = -\frac{mK^2}{2\hbar^2 \varepsilon_n} \quad (5-69)$$

یا

$$\varepsilon_n = -\frac{mK^2}{2\hbar^2 n^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

به دست می‌آیند. معادله (۵-۶۹) منعکس کننده تبهگنی تصادفی است. هیچ دلیل قبلی برای پیدا شدن این تبهگنی وجود ندارد و از طبیعت ریاضی خاص جوابهای قابل قبول ناشی می‌شود. ظاهراً یک تقارن بالاتر (علاوه بر تقارن کروی) وابسته به پتانسیل  $1/r$  وجود دارد\*. با قراردادن عدد صحیح  $p = \beta - 1 = 2l + 1$ ، معادله ابرهندسی (۵-۶۸) به صورت معادله وابسته لاگر

$$\left\{ \rho \frac{d^2}{d\rho^2} + \left[ (p+1) - \rho \right] \frac{d}{d\rho} + q \right\} L_q^p(\rho) = 0 \quad (5-70)$$

در می‌آید که جوابهای چندجمله‌ای آن عبارتند از چندجمله‌ایهای لاگر (از مرتبه عدد صحیح)

$$L_q^p(\rho) = L_{n-(l+1)}^{2l+1}(\rho)$$

\* این تقارن به این واقعیت مربوط می‌شود که معادله شرودینگر برای یک پتانسیل  $1/r$  هم در مختصات قطبی کروی و هم در مختصات سهموی تفکیک پذیر است.

چندتای اول عبارتند از

$$\begin{aligned} L_0^0 &= 1 & L_1^0 &= 1 - \rho & L_2^0 &= 1 - 2\rho + \frac{1}{2}\rho^2 \\ L_1^1 &= 2 - \rho & L_2^1 &= 3 - 3\rho + \frac{1}{2}\rho^2 \\ L_1^2 &= 3 - \rho & L_2^2 &= 6 - 4\rho + \frac{1}{2}\rho^2 \end{aligned} \quad (5-71)$$

چند جمله‌ایهای لاگر دارای خواص زیراند

$$\begin{aligned} (1) \quad L_p^q(z) &= (-1)^q \frac{d^q}{dz^q} L_{p+q}^0(z) \\ &= \frac{e^z z^{-q}}{p!} \frac{d^p}{dz^p} (z^{p+q} e^{-z}) \quad (p, q = 0, 1, 2, 3, \dots) \end{aligned} \quad (\text{فرمول رودریگز})$$

$$(2) \quad \frac{e^{-zt/(1-t)}}{(1-t)^{q+1}} = \sum_{p=0}^{\infty} t^p L_p^q(z) \quad (\text{تابع مولد})$$

$$(3) \quad z L_p^{q+1}(z) = (p+q+1) L_p^q(z) - (p+1) L_{p+1}^q(z) \quad (5-72)$$

$$(4) \quad z L_p^{q+1}(z) = -(p-z) L_p^q(z) + (p+q) L_{p-1}^q(z)$$

$$(5) \quad \int_0^{\infty} dz \, z^q e^{-z} L_p^q(z) L_r^q(z) = \frac{[(p+q)!]^3}{p!} \delta_{pr} \quad (\text{تعامد})$$

پس از جمع و جور کردن نتایج و بهنجار کردن آنها، ویژه تابعهای مقید انرژی را برای یک پتانسیل کولنی به صورت

$$\begin{aligned} \psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) &= \left[ \frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m_l|)!}{(l+|m_l|)!} \right]^{1/2} P_l^{m_l}(\cos \theta) e^{im_l \phi} \\ &\cdot \left[ \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \left( \frac{2}{na} \right)^3 \right]^{1/2} \left( \frac{2r}{na} \right)^l e^{-r/na} L_{n-(l+1)}^{2l+1} \left( \frac{2r}{na} \right) \\ (n &= 1, 2, 3, \dots; \quad l = 0, 1, 2, \dots, n-1; \quad (72-5) \\ m_l &= 0, \pm 1, \dots, \pm l) \end{aligned}$$

\* نتایجی که در اینجا ارائه می‌شود فقط شامل ساختار کلی است. تصحیحات کوچکتر به خاطر اسپین الکترون و حرکت پروتون در فصلهای ۶ و ۱۰ بررسی خواهند شد.

پیدا می‌کنیم که در آن جایگذاری  $a = \hbar^2/mK$  را به‌کار برده‌ایم. چند ویژه تابع مقید اول کولنی عبارتند از

$$\begin{aligned}\psi_{100} &= \left(\frac{1}{\pi a^3}\right)^{1/2} e^{-r/a} \\ \psi_{200} &= \frac{1}{4} \left(\frac{1}{2\pi a^3}\right)^{1/2} \left(2 - \frac{r}{a}\right) e^{-r/2a} \\ \psi_{210} &= \frac{1}{4} \left(\frac{1}{2\pi a^3}\right)^{1/2} \left(\frac{r}{a}\right) e^{-r/2a} \cos \theta \\ \psi_{21\pm 1} &= \frac{1}{8} \left(\frac{1}{\pi a^3}\right)^{1/2} \left(\frac{r}{a}\right) e^{-r/2a} \sin \theta e^{\pm i\phi} \\ \psi_{300} &= \frac{1}{81} \left(\frac{1}{3\pi a^3}\right)^{1/2} \left(27 - \frac{18r}{a} + \frac{2r^2}{a^2}\right) e^{-r/3a} \quad (۷۴-۵) \\ \psi_{310} &= \frac{1}{81} \left(\frac{2}{\pi a^3}\right)^{1/2} \left(6 - \frac{r}{a}\right) \left(\frac{r}{a}\right) e^{-r/3a} \cos \theta \\ \psi_{31\pm 1} &= \frac{1}{81} \left(\frac{1}{\pi a^3}\right)^{1/2} \left(6 - \frac{r}{a}\right) \left(\frac{r}{a}\right) e^{-r/3a} \sin \theta e^{\pm i\phi} \\ \psi_{320} &= \frac{1}{81} \left(\frac{1}{6\pi a^3}\right)^{1/2} \left(\frac{r}{a}\right)^2 e^{-r/3a} (3 \cos^2 \theta - 1) \\ \psi_{32\pm 1} &= \frac{1}{81} \left(\frac{1}{\pi a^3}\right)^{1/2} \left(\frac{r}{a}\right)^2 e^{-r/3a} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi} \\ \psi_{32\pm 2} &= \frac{1}{162} \left(\frac{1}{\pi a^3}\right)^{1/2} \left(\frac{r}{a}\right)^2 e^{-r/3a} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}\end{aligned}$$

## ۱۱- اتم هیدرژن

نتایج فوق می‌توانند به‌اتم هیدرژن، که در آن الکترون هیدرژنی در پتانسیل کولنی حاصل از پروتون ساکن در هسته قرار دارد، اعمال شوند. با قراردادن  $K = e^2$  نتیجه می‌گیریم  $a = \hbar^2/mK = \hbar^2/me^2$ ، که اولین شعاع بوهر است. ویژه مقدارهای انرژی به‌شکل

$$\varepsilon_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} = \frac{\varepsilon_1}{n^2} \quad (۷۵-۵)$$

در می‌آیند که در آن  $\epsilon_1 = -me^4/2\hbar^2 \simeq -13/6 \text{ eV}$  در توافق کامل با نتایج بوهر است. قابل توجه است که بوهر (۵-۷) را با یک نظریه بسیار ساده به دست آورد.

به خاطر تبهگنی تصادفی،  $n$  امین تراز به تعداد  $\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$  مرتبه تبهگن است. در مواقع لزوم از نمادگذاری طیف نمائی، مذکور در جدول (۵-۲)، برای نمایش یک حالت هیدروژنی بر حسب مقدار  $l$  آن استفاده خواهیم کرد. تبهگنی تصادفی ممکن است با این مورد کلاسیکی که در آن بیضی‌های مختلف (مقادیر مختلف  $L$ )، به شرط اینکه قطرهای طول آنها یکسان باشد دارای انرژی یکسانی هستند، مقایسه شود. تبهگنی فضائی متناظر با این واقعیت است که صفحه مدار کلاسیکی می‌تواند چرخانده شود بدون اینکه این چرخش روی انرژی آن تاثیری داشته باشد. با اینکه مفهوم یک مدار کاملاً مشخص در مکانیک کوانتومی بیجا و نامناسب است، مجسم کردن هر حالت  $(n, l)$  به وسیله یک مدار مفید است.

جدول (۵-۲) نمادگذاری طیف نمائی

مقدار $l$	حرف
۰	s (تیز)
۱	p (اصلی)
۲	d (پخش)
۳	f (اساسی)
۴	g

چون حالت‌های  $(l=0)$  دارای تکانه زاویه‌ای صفراند باید به صورت بیضی‌های تبهگنی (خطوط مستقیم) نمایش داده شوند. وقتی برای یک  $n$  معین  $l$  افزایش می‌یابد، انتظار داریم که بیضی تبدیل به یک شبه دایره شود؛ بنابراین حالت‌های  $n$ ،  $l = n-1$  را به صورت دایره‌هایی نمایش می‌دهیم. تمام حالت‌های دیگر بیضی‌هایی هستند با خروج از مرکزهای متفاوت و حالت‌های با  $n$  یکسان دارای قطرهای طول مساوی هستند (شکل ۵-۴).

کوانتش فضائی  $(m_l)$  میل کلاسیکی صفحه مدار نسبت به محور  $z$  را محدود می‌کند. حالت  $\psi_{nlm_l}$  شامل کوانتش جهتی نسبت به محورهای  $x$  و  $y$  نیست. بنابراین قائم بر سطح می‌تواند روی هر کجا از مخروطی حول محور  $z$  قرار گیرد (شکل ۵-۵).

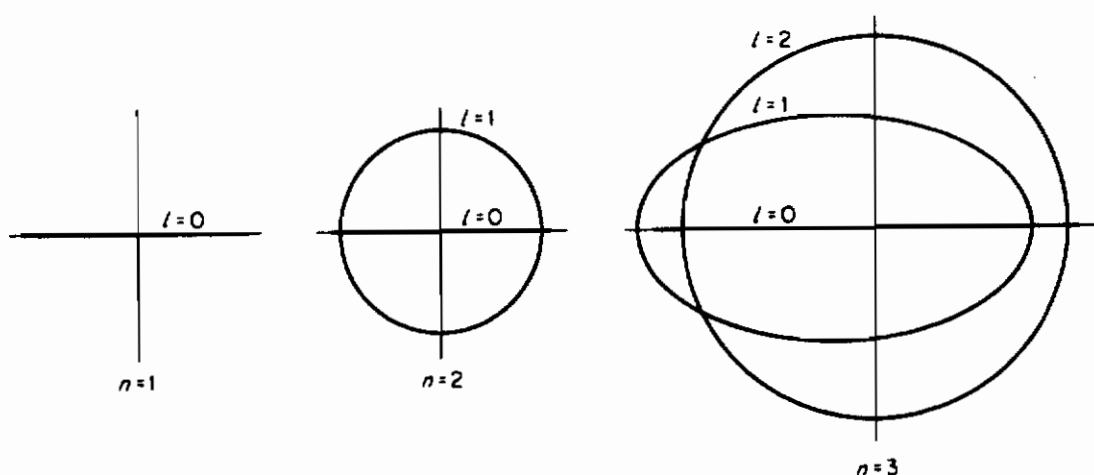
احتمال یافتن الکترون هیدروژنی در یک عنصر حجم معین از فضا عبارت است از

$$\mathcal{P}_{nlm_l} d\mathbf{r} = R_{nl}^2 |Y_{lm_l}|^2 r^2 dr d\Omega$$

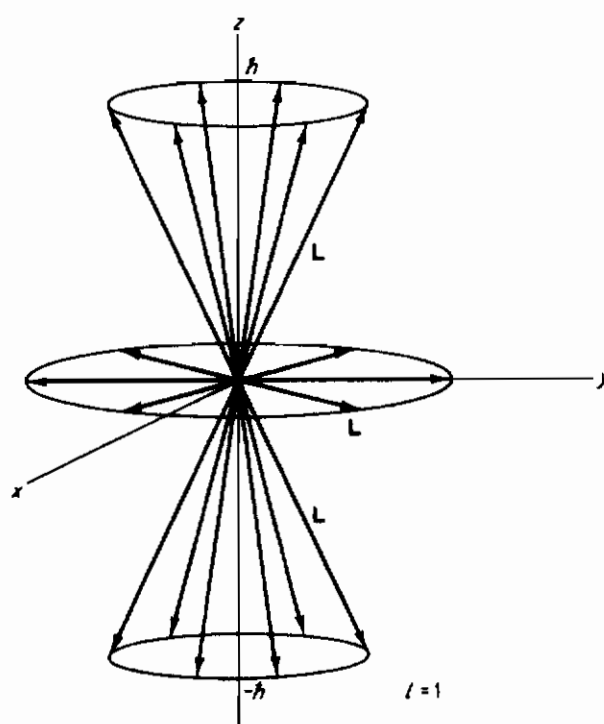


که در آن  $d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$ . این عبارت می‌تواند به یک چگالی زاویه‌ای  $|Y_{lm}|^2$  و یک چگالی شعاعی  $R_{nl}^2 r^2$  تجزیه شود. چگالی اول به احتمال یافتن الکترون در داخل یک زاویه حجمی  $d\Omega$  در اطراف مبدأ (پروتون) وابسته است. خاطرنشان کنیم که چگالی زاویه‌ای عبارت است از

$$|Y_{lm}|^2 = \Theta_{lm}^2$$

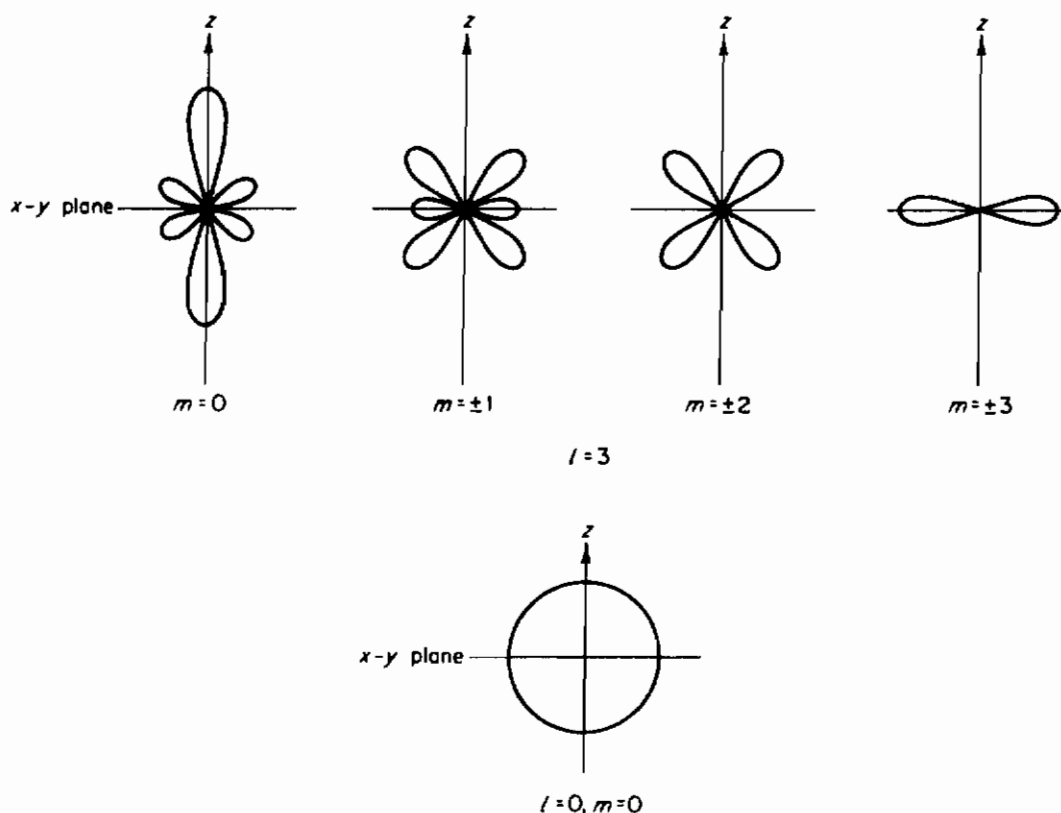


شکل (۴-۵). بعضی مدارهای نیمه کلاسیکی برای حالت‌های  $n$ ،  $l$ .



شکل (۵-۵). مخروط‌های "ماری" وابسته به کوانتش فضایی تکانه زاویه‌ای

و فقط تابع زاویه قطبی  $\theta$  است و به زاویه سمتی  $\phi$  بستگی ندارد. چگالی زاویه‌ای به‌طور مناسبی در یک نمودار قطبی (شکل ۵-۶) ترسیم شده است.



شکل (۵-۶). منحنیهای قطبی چگالیهای زاویه‌ای  $|Y_{lm}|^2$  وابسته به حالت‌های  $l=3$  و  $l=0$

ذره‌ای که در حالت  $l=3$ ،  $m_l=0$  است به احتمال خیلی زیاد در  $\theta=0$  یا  $\theta=\pi$  قرار دارد. در حالت  $l=3$ ،  $m_l=3$  بیشینه احتمال در  $\theta=\pi/2$  (صفحه  $xy$ ) رخ می‌دهد. چگالی احتمال شعاعی  $R_{nl}^2 r^2$  مربوط است به احتمال یافتن الکترون در یک لایه کروی به ضخامت  $dr$  در یک فاصله  $r$  از مبدأ (شکل ۵-۷). توجه کنیم که موقعیت شعاعی بیشینه احتمال برای حالت پایه  $\psi_{100}$  در  $r_{\max}=a$  رخ می‌دهد، که متناظر با نتیجه بوهر است. اما مهمتر از همه مکان متوسط نسبت به مبدأ، یعنی

$$\langle r \rangle_{nl} = \int_0^\infty R_{nl} r R_{nl} r^2 dr$$

است. محاسبه انتگرال‌هایی از نوع

$$\langle r^v \rangle_{nl} = \int_0^\infty R_{nl} r^v R_{nl} r^2 dr$$

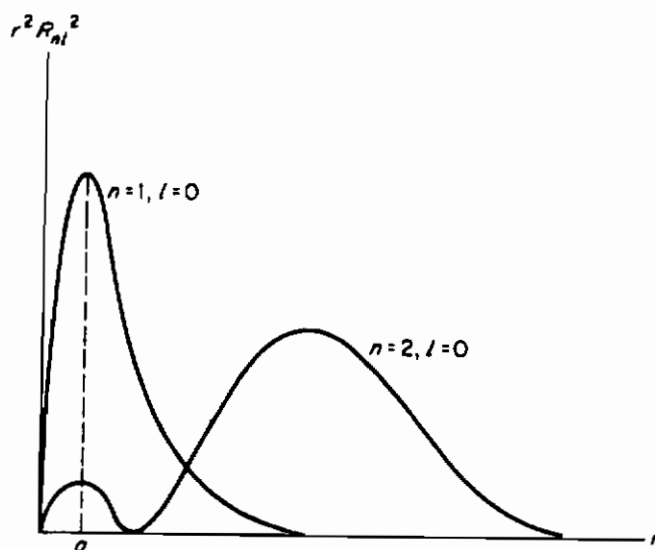
نسبتاً\* مشکل است. ما نتایج چندتا از آنها را در زیر می آوریم\*

$$\langle r \rangle_{nl} = n^2 a \left[ 1 + \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{l(l+1)}{n^2} \right\} \right]$$

$$\langle r^2 \rangle_{nl} = \frac{1}{2} n^2 [5n^2 + 1 - 3l(l+1)] a^2$$

$$\langle r^{-1} \rangle_{nl} = \frac{1}{n^2 a} \quad (۵-۷۶)$$

$$\langle r^{-2} \rangle_{nl} = \frac{1}{n^3 (l + \frac{1}{2}) a^2}$$



شکل (۵-۷). چگالیهای احتمال شعاعی برای حالت‌های  $\psi_{100}$  و  $\psi_{200}$  در هیدروژن

می‌توان سؤال زیر را مطرح کرد: با چه دقتی مکان الکترون در یک مدار از نظر شعاعی جایگزیده است؟ برای پاسخ به این سؤال باید عدم قطعیت  $\Delta r_n$  در اطراف مقدار قابل انتظار  $\langle r \rangle_n$  را محاسبه کرد. با استفاده از تعریفی که در فصل ۳ آمده است، و نتایج موجود در

---

\* به کتاب زیر مراجعه کنید.

H.A. Bethe and E.E. Salpeter, "Quantum Mechanics of one and Two Electron Atomes," P.17. Springer-Verlag, Berlin, 1957.

(۷۶-۵) ،  $\Delta r_n$  و  $\langle r \rangle_n$  می‌توانند به آسانی محاسبه شوند .

محاسبه حد نسبت

$$\lim_{n,l \rightarrow \infty} \frac{\Delta r_{nl}}{\langle r \rangle_{nl}} = \lim_{n,l \rightarrow \infty} \frac{(\langle r^2 \rangle_{nl} - \langle r \rangle_{nl}^2)^{1/2}}{\langle r \rangle_{nl}}$$

جالب و مفید خواهد بود . با گذاردن  $l$  برابر با مقدار بیشینه آن ،  $l_{\max} = n - 1$  ، و با استفاده از (۷۶-۵) در حد  $n \rightarrow \infty$  خواهیم داشت

$$\frac{\Delta r_{n,n-1}}{\langle r \rangle_{n,n-1}} = \frac{1}{(2n+1)^{1/2}} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$$

بنابراین چگالیهای احتمال برای مقادیر بزرگ  $n$  و  $l$  در اطراف شعاعهای بوهرا کاملاً معین خواهند شد و متناظر با مدارهای شبه‌دایره‌ای نظریه نیمه‌کلاسیکی بوهرا خواهند بود .

مقدار قابل انتظار  $V = -e^2/r$  می‌تواند با استفاده از (۷۶-۵) به دست آید که

نتیجه می‌دهد

$$\langle V \rangle_{nl} = \left\langle \frac{-e^2}{r} \right\rangle_{nl} = -e^2 \langle r^{-1} \rangle_{nl} = -\frac{e^2}{n^2 a} = 2\varepsilon_n$$

چون  $\langle T + V \rangle_{nl} = \langle \mathcal{H} \rangle_{nl} = \varepsilon_n$  ، نتیجه می‌شود

$$\langle T \rangle_{nl} = \varepsilon_n - \langle V \rangle_{nl} = -\varepsilon_n = -\frac{1}{2} \langle V \rangle_{nl} \quad (77-5)$$

در مکانیک کلاسیکی ، که در آن مقادیر قابل انتظار به وسیله متوسط های زمانی جایگزین شده‌اند ، نیز چنین است ، یعنی ،  $T = -\frac{1}{2}V$  (رک مسائل ۲-۳ و ۴-۱۵) .

## ۱۲- پاریته و مسئله نیروی مرکزی

چون هر هامیلتونی نیروی مرکزی در اثر انعکاس نسبت به مبدأ تغییرناپذیر است  $[\mathcal{H}_{cf}(-\mathbf{r}) = \mathcal{H}_{cf}(\mathbf{r})]$  ، با عملگر پاریته جابه‌جایپذیر است . در نتیجه باید حداقل یک مجموعه از ویژه تابعهای انرژی نیروی مرکزی با پاریته معین وجود داشته باشد . این که آیا حالت‌های  $\psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi)$  چنین مجموعه‌ای هستند را اکنون بررسی می‌کنیم .

انعکاس نسبت به مبدأ  $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$  به وسیله  $x \rightarrow -x$  ،  $y \rightarrow -y$  ،  $z \rightarrow -z$  ،

یا در مختصات کروی به وسیله  $\phi \rightarrow \phi + \pi$ ،  $r \rightarrow r$ ،  $\theta \rightarrow \pi - \theta$  (شکل ۵-۸) نمایش داده خواهد شد. جایگذاری  $\theta \rightarrow \pi - \theta$  معادل است با  $u \rightarrow -u$ ، که در آن  $u = \cos \theta$  چون قسمت شعاعی  $R_{\pi}$  تحت انعکاس بی تأثیر خواهد ماند، ما فقط رفتار هماهنگ‌های کروی

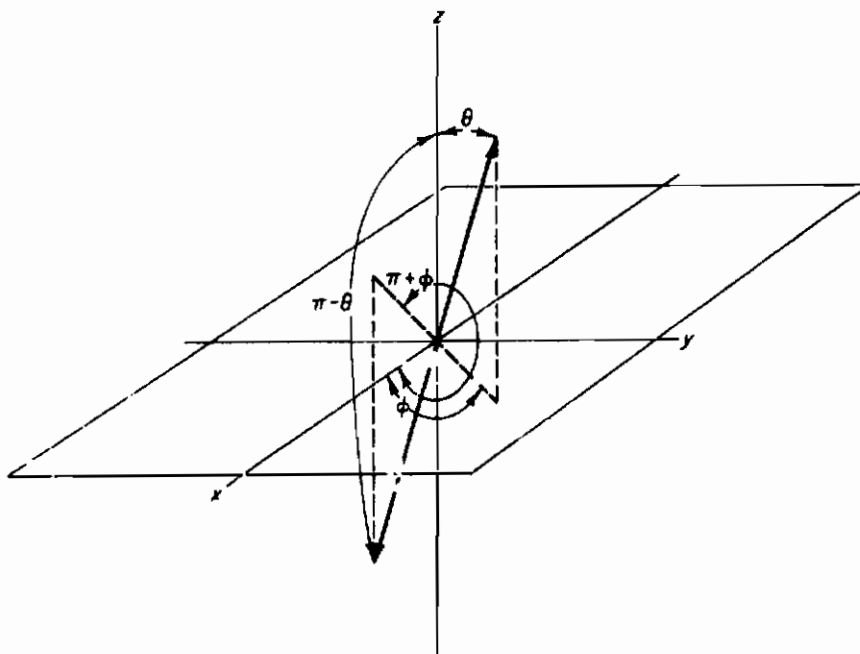
$$Y_{lm_l}(\theta, \phi) \propto (1 - u^2)^{|m_l|/2} \frac{d^{|m_l|}}{du^{|m_l|}} P_l(u) e^{im_l \phi}$$

را در نظر می‌گیریم. در اثر انعکاس، قسمت  $\phi$  خواهد شد

$$e^{im_l \phi} \rightarrow e^{im_l(\phi + \pi)} = e^{im_l \pi} e^{im_l \phi} = (-1)^{m_l} e^{im_l \phi}$$

یعنی، اگر فقط  $m_l$  فرد باشد علامت آن تغییر خواهد کرد. تنها جمله‌ای در  $Y_{lm_l}$  که انعکاس  $u \rightarrow -u$  روی آن تأثیر می‌کند عبارت است از

$$\frac{d^{|m_l|}}{du^{|m_l|}} P_l(u)$$



شکل (۵-۸) عمل پاریمته (انعکاس) در مختصات کروی

چون این یک چندجمله‌ای است که بسته به مقدار  $|m_l|$  زوج یا فرد است، علامت آن فقط در صورتی تغییر می‌کند که  $m_l$  فرد باشد. ما دومورد را در نظر می‌گیریم:

مورد (الف): زوج است. اگر  $m_l$  فرد باشد، قسمت  $\theta$  تغییر علامت می‌دهد. اما چون  $l - m_l$

نیز فرد است قسمت  $\theta$  نیز تغییر علامت می‌دهد و بنابراین ویژه تابع بدون تغییر می‌ماند. همین‌طور اگر  $m_l$  زوج باشد، تغییری در  $\psi_{nlm_l}$  رخ نمی‌دهد. مورد (ب) :  $l$  فرد است. اگر  $m_l$  فرد باشد، باز هم قسمت  $\phi$  تغییر علامت می‌دهد. اما چون  $l - m_l$  اکنون زوج است قسمت  $\theta$  بدون تغییر باقی می‌ماند و بنابراین  $Y_{lm_l}$  تغییر علامت می‌دهد. اگر  $m_l$  زوج باشد نتیجه مشابهی به دست می‌آید. نتیجه می‌گیریم که ویژه حالت‌های نیروی مرکزی که در مختصات کروی به دست می‌آیند دارای پاریته معینی هستند، و بسته به اینکه مقادیر  $l$  فرد یا زوج باشند به ترتیب فرد یا زوج خواهند بود. بنابراین علاوه بر خواص معمولی ویژه مقدار، این حالت‌ها دارای خاصیت

$$\hat{P}|n, l, m_l\rangle = (-1)^l |n, l, m_l\rangle$$

یا

$$\psi_{nlm_l}(-\mathbf{r}) = (-1)^l \psi_{nlm_l}(\mathbf{r}) \quad (5-78)$$

می‌باشند

### ۱۳- اثر میدان مغناطیسی یکنواخت روی مسئله نیروی مرکزی

اکنون می‌خواهیم نشان دهیم که گاهی که میدان  $B$  در تقارن ایجاد می‌کند منجر به حذف تبهگنی جهتی (نسبت به  $m_l$ ) می‌شود. میدان مغناطیسی مشتق از یک پتانسیل برداری  $A$  به صورت

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (5-79)$$

است. این  $A$  است و نه  $B$  که مستقیماً در هامیلتونی کلاسیکی دخالت می‌کند. این هامیلتونی طبق (۶۲-۲) عبارت است از

$$\mathcal{H} = \frac{(\mathbf{p} - (q/c)\mathbf{A})^2}{2m} + V(r) \quad (5-80)$$

که در آن  $q$  بار ذره مورد نظر و  $c$  سرعت نور است. اگر میدان مغناطیسی یکنواخت باشد، یعنی، مشتقات فضائی آن صفر باشند، (۷۹-۵) می‌تواند معکوس شود و به صورت  $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r}$  درآید. این رابطه می‌تواند با گرفتن چرخش از دو طرف آن (برای  $B$  ی ثابت) مورد تحقیق

قرار گیرد. خواهیم داشت

$$\nabla \times \mathbf{A} = \nabla \times (\frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}) = \frac{1}{2} [(\nabla \cdot \mathbf{r}) \mathbf{B} - (\nabla \mathbf{r}) \cdot \mathbf{B}] = \frac{1}{2} [3\mathbf{B} - \mathbf{B}] = \mathbf{B}$$

که همان نتیجه خواسته شده است.

در این صورت هامیلتونی (۵-۸۰) به صورت زیر در می آید

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \frac{p^2}{2m} + V(r) - \frac{q}{mc} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \frac{q^2}{2mc^2} A^2 \\ &= \frac{p^2}{2m} + V(r) - \frac{q}{2mc} \mathbf{p} \cdot \mathbf{B} \times \mathbf{r} + \frac{q^2}{2mc^2} \left| \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r} \right|^2 \end{aligned} \quad (۵-۸۱)$$

در عمل، میدان مغناطیسی معمولاً<sup>\*</sup> آنقدر ضعیف<sup>\*</sup> است که جمله حاوی توان دوم  $\mathbf{B}$  حذف می شود. با جابه جا کردن عوامل در ضرب سه گانه، (۵-۸۱) خواهد شد

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(r) - \frac{q}{2mc} (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) \cdot \mathbf{B} = \frac{p^2}{2m} + V(r) - \mu_l \cdot \mathbf{B} \quad (۵-۸۲)$$

که در آن

$$\mu_l = \frac{q}{2mc} \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \frac{q}{2mc} \mathbf{L}$$

گشتاور دوقطبی مغناطیسی مداری ذره باردار است. در نتیجه، برای میدانهای ضعیف، سیستم دینامیکی حامل یک دوقطبی مغناطیسی است که وابسته به تکانه زاویه ای مداری است. به جا و مناسب است که یک تعمیم ساده و اولیه ای از (۵-۸۲) با نوشتن

$$\mu_l = g_l \frac{q}{2mc} \mathbf{L} \quad (۵-۸۳)$$

که در آن  $g_l = 1$  ضریب ژيرو مغناطیسی مداری یا ضریب "g" <sup>\*\*\*</sup> نامیده می شود، بنمائیم.

\* این تقریب وقتی معتبر است که انرژی مداری در مقایسه با انرژی مغناطیسی وابسته به میدان خارجی  $B$  بزرگ باشد. برای بحث پیرامون اثر زمین مربعی به کتاب زیر مراجعه کنید

H.A. Bethe and R.W. Jackiw, "intermediate Quantum

Mechanics," Benjamin New York 1968, P. 122.

\*\*\* نسبت  $\mu_l/L = g_l q$  نسبت ژيرو مغناطیسی نامیده می شود.

برای سهولت، دستگاه محورهاى مختصات خود را طوری انتخاب می‌کنیم که  $B$  در امتداد محور  $z$  باشد. در این صورت محور  $z$  یک محور فیزیکی کاملاً معین است و دیگر یک محور ریاضی صرف نیست. هامیلتونی مکانیک کوانتومی خواهد شد

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{cf} - \frac{g_l q}{2mc} B \hat{L}_z \quad (۵-۸۴)$$

که در آن

$$\mathcal{H}_{cf} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r)$$

برای پیدا کردن ویژه تابعها و ویژه مقدارهای این هامیلتونی جدید مشاهده می‌کنیم که  $[\mathcal{H}, \mathcal{H}_{cf}] = 0$ . معنی این مطلب این است که دو هامیلتونی دارای یک مجموعه ویژه تابع مشترک هستند. لذا ممکن است که ویژه تابعهای  $\mathcal{H}_{cf}$  که قبلاً به دست آورده شده‌اند ویژه تابعهای  $\mathcal{H}$  نیز باشند. این مطلب با نوشتن

$$\begin{aligned} \mathcal{H} \psi_{nlm_l} &= \mathcal{H}_{cf} \psi_{nlm_l} - \frac{g_l q B}{2mc} \hat{L}_z \psi_{nlm_l} \\ &= \left( \varepsilon_{nl} - \frac{g_l q B m_l \hbar}{2mc} \right) \psi_{nlm_l} \end{aligned} \quad (۵-۸۵)$$

تأیید می‌شود. بنابراین توابع  $\psi_{nlm_l}$  ویژه تابعهای  $\mathcal{H}$  نیز هستند ولی با ویژه مقدارهای اصلاح شده‌ای که توسط

$$\varepsilon_{nlm_l} = \varepsilon_{nl} - m_l \mu_B B \quad (g_l = 1)$$

\* توجه کنید که ویژه تابعها توسط میدان مغناطیسی بدون تغییر می‌مانند. بخصوص، حالتها خصوصیات پاریته‌ای خود را "حفظ می‌کنند". این مطلب می‌رساند که جمله مغناطیسی در هامیلتونی، یعنی  $qL_z B/2mc$ ، باید در اثر انعکاس تغییرناپذیر باشد (یعنی، با عملگر پاریته جابه‌جاپذیر باشد). چون  $B$  یک ثابت است،  $L$  باید در اثر انعکاس تغییرناپذیر باشد. درواقع این چنین نیز هست زیرا در اثر انعکاس داریم،  $p \rightarrow -p$  و  $r \rightarrow -r$ ، بنابراین  $L \rightarrow -r \times -p = L$ .



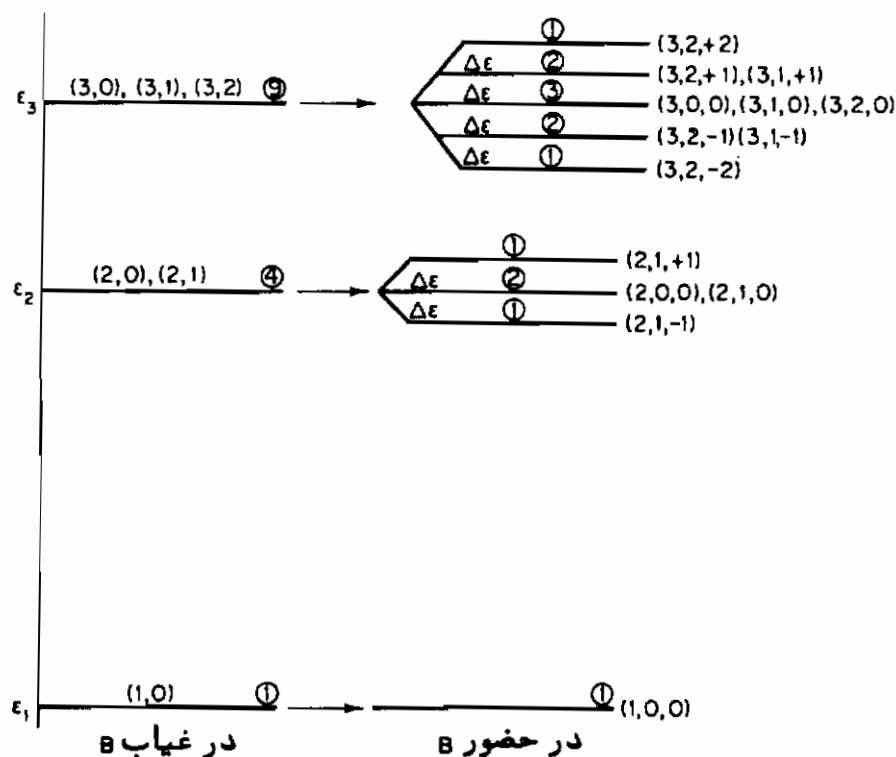
داده می‌شوند. پارامتر  $\mu_B = q\hbar/2mc$  ماگنتون بوهر نامیده می‌شود و یکی از مشخصه‌های ذره است. مقدار ماگنتون بوهر برای الکترون عبارت است از

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} \simeq 0.927 \times 10^{-20} \text{ erg/gauss} \quad (۵-۸۶)$$

در این صورت انرژی علاوه بر  $n$ ، تابع  $m_l$  نیز می‌باشد؛ بدین ترتیب میدان مغناطیسی تبهگنی جهتی را از بین می‌برد. از اینجا منشأ عبارت "عدد کوانتومی مغناطیسی" برای  $m_l$  آشکار می‌شود. برای الکترون هیدروژنی، تبهگنی تصادفی (نسبت به  $l$ ) باقی می‌ماند. با قراردادن  $q = -e$  ترازهای بوهر به ترازهای

$$\varepsilon_{nm_l} = \frac{\varepsilon_1}{n^2} + \frac{m_l e\hbar B}{2mc} \quad (۵-۸۷)$$

جابه‌جا می‌شوند. این جابه‌جایی به‌اثر عادی زمین (شکل ۵-۹) معروف است. قابل تذکر است که



شکل (۵-۹). اثر زمین در هیدروژن. تبهگنی تراز در داخل دایره مشخص شده است. توجه کنیم که میدان  $B$  تبهگنی را به‌طور کامل از بین نمی‌برد، تبهگنی تصادفی ( $l$ ) باقی می‌ماند.

جابه‌جاییهای انرژی زیر لایه‌های مغناطیسی به صورت مضاربیه از

$$\Delta\epsilon(\text{mag}) = \frac{e\hbar B}{2mc}$$

ظاهر می‌شوند.

کمیت (مستقل از  $\hbar$ ) کلاسیکی

$$\omega_L = \frac{\Delta\epsilon(\text{mag})}{\hbar} = \frac{eB}{2mc}$$

عبارت است از فرکانس لارمور حرکت تقدیمی\* مداری که در تحلیل کلاسیکی (۵-۸۰) به دست آمده است.

در این شرایط ویژه حالت‌های  $\psi$  به طور همزمان ویژه حالت‌های  $L^2$  و مولفه  $L_z$  در امتداد  $B$  (در این مورد  $L_z$ ) نیز هستند. مولفه‌های دیگر  $L_x$  و  $L_y$  مقدار صریحی ندارند، می‌توان ثابت کرد که در این حالت‌ها داریم

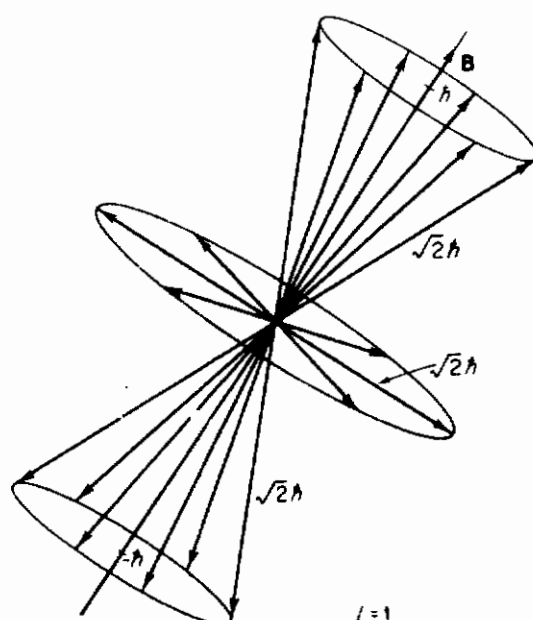
$$\langle L_x \rangle_{nlm_l} = \langle L_y \rangle_{nlm_l} = 0 \quad (5-88)$$

بنابراین به طور متوسط مولفه تکانه زاویه‌ای عمود بر  $B$  صفر است. به طور معادل،  $L$  از نظر آماری به طور کاتوره‌ای در روی مخروطی حول  $B$  قرار دارد\*\* (شکل ۵-۱۰). وقتی خطوط گسیلی در هیدرژن با طیف نماهایی با قدرت تفکیک زیاد مشاهده می‌شوند، جابه‌جاییهای خطوط با اثر عادی زمین در توافق کمی نیستند. این مغایرت در فصل ۶ با این اصل موضوع حل خواهد شد که الکترون علاوه بر گشتاور مغناطیسی مداری حامل یک دو-قطبی مغناطیسی است که توسط اسپین ذاتی الکترون ایجاد شده است. قبل از بحث در مورد اسپین، سعی می‌کنیم که ویژه مقدارهای تکانه زاویه‌ای را با روش نردبانی به دست آوریم.

\* برای بحث در باره حرکت تقدیمی لارمور به کتاب زیر مراجعه کنید

K.R. Symon, "Mechanics," 3rd-ed. P. 284. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1971.

\*\* از نظر کلاسیکی می‌توانیم بگوئیم که  $L$  حول  $B$  حرکت تقدیمی دارد، اما از نظر مکانیک کوانتومی حالت مانا است. بنابراین مخروط طبیعتاً" آماری است و نه دینامیکی.



شکل (۵-۱۰). توزیع  $L$  روی مخروطهای حول  $B$ . از نظر کلاسیکی بردار  $L$  حول  $B$  با فرکانس  $\omega_L = eB/2mc$  حرکت تقدیمی انجام می‌دهد (حرکت تقدیمی لارمور)

این انحراف از موضوع، دو هدف مهم دارد. نخست، یکبار دیگر طبیعت عمومی بودن صورتبندی بردار - عملگر را نشان می‌دهد. دوم، که برای منظوره‌های مهمتری است، اینکه تنها بر پایه جبر "جابه‌جاگرها" به این نتیجه هدایت می‌شویم که اعداد کوانتومی تکرانه زاویه‌ای می‌توانند هم نیمه صحیح باشند و هم صحیح. در مورد تکرانه زاویه‌ای مداری، که برای آن یک مشابه کلاسیکی و در نتیجه یک ویژه تابع وجود دارد، باید نیمه صحیح‌ها را طرد کنیم\*. با این وجود، در یک مورد صرفاً "مکانیک کوانتومی، مثل اسپین ذاتی الکترون، تکرانه‌های نیمه صحیح با روابط جابه‌جائی بنیادی برای مؤلفه‌های تکرانه زاویه‌ای، همان‌طور که در زیر نشان خواهیم داد، سازگارند.

#### ۱۴ - روش نردبانی

می‌خواهیم ویژه مقدارها و ویژه بردارهای تکرانه زاویه‌ای را فقط با استفاده از روابط

---

\* یادآور می‌شویم که این شرط تک مقداری بودن  $\psi_{nlm_l}$  بود که به معرفی اعداد صحیح  $m_l$  منجر شد.

جابه‌جایی

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \hat{L}_k \quad (ijk = xyz \text{ به ترتیب دوره‌ای}) \quad (۵-۸۹)$$

به دست آوریم. این روابط می‌توانند به صورت تعمیمی از گروه پواسن (۲-۸۰) یا مستقیماً با استفاده از روابط جابه‌جایی برای  $\hat{p}$  و  $\hat{q}$  به دست آیند. اکنون به معادلات ویژه مقداری

$$\hat{L}^2 |l, m_l\rangle = \hbar^2 \lambda_l |l, m_l\rangle \quad (۵-۹۰ \text{ الف})$$

$$\hat{L}_z |l, m_l\rangle = \hbar \lambda_{m_l} |l, m_l\rangle \quad (۵-۹۰ \text{ ب})$$

می‌پردازیم، که در آن‌ها  $\lambda_l$  و  $\lambda_{m_l}$  باید تعیین شوند. مقادیر قابل انتظار  $\langle L_x^2 \rangle$ ،  $\langle L_y^2 \rangle$  و  $\langle L_z^2 \rangle$  غیرمنفی‌اند، که از آن نتیجه می‌شود

$$\langle L^2 \rangle = \langle L_x^2 \rangle + \langle L_y^2 \rangle + \langle L_z^2 \rangle \geq \langle L_z^2 \rangle$$

یا مخصوصاً

$$\langle l, m_l | \hat{L}^2 |l, m_l\rangle \geq \langle l, m_l | \hat{L}_z^2 |l, m_l\rangle$$

با استفاده از (۵-۹۰) نتیجه می‌شود که پارامترهای ویژه مقدار دارای محدودیت زیراند

$$\lambda_l \geq \lambda_{m_l}^2 \quad (۵-۹۱)$$

عملگر (غیر هرمیتی)  $\hat{L}^+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y$  و الحاقی آن  $\hat{L}^- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y$  را وارد می‌کنیم. با تأثیر دادن  $\hat{L}^\pm$  روی (۵-۹۰ الف) و با توجه به  $[\hat{L}^\pm, \hat{L}^2] = 0$ ، نتیجه می‌گیریم

$$\hat{L}^\pm \hat{L}^2 |l, m_l\rangle = \hbar^2 \lambda_l \hat{L}^\pm |l, m_l\rangle$$

یا

$$\hat{L}^2 \{\hat{L}^\pm |l, m_l\rangle\} = \hbar^2 \lambda_l \{\hat{L}^\pm |l, m_l\rangle\}$$

بنابراین بردار داخل پراکنش نیز ویژه کت  $\hat{L}^2$  با همان ویژه مقدار  $\hbar^2 \lambda_l$  است. اکنون عملگر  $\hat{L}^\pm$  را روی (۵-۹۰ ب) تأثیر می‌دهیم و خواهیم داشت

$$(\hat{L}_x \pm i\hat{L}_y)\hat{L}_z|l, m_l\rangle = \lambda_m \hbar (\hat{L}_x \pm i\hat{L}_y)|l, m_l\rangle \quad (۹۲-۵)$$

با استفاده از روابط جابه‌جایی  $\hat{L}_x \hat{L}_z = \hat{L}_z \hat{L}_x - i\hbar \hat{L}_y$  و  $\hat{L}_y \hat{L}_z = \hat{L}_z \hat{L}_y + i\hbar \hat{L}_x$  می‌توان (۹۲-۵) را ساده کرد و به صورت

$$(\hat{L}_z \hat{L}^{\pm} \mp \hbar \hat{L}^{\pm})|l, m_l\rangle = \lambda_{m_l} \hbar \hat{L}^{\pm}|l, m_l\rangle$$

یا ترا نهاده آن

$$\hat{L}_z\{\hat{L}^{\pm}|l, m_l\rangle\} = (\lambda_{m_l} \pm 1)\hbar\{\hat{L}^{\pm}|l, m_l\rangle\} \quad (۹۳-۵)$$

نوشت. بنابراین کتهای داخل پیرانتزها ویژه‌بردارهای  $\hat{L}_z$  با ویژه مقدارهای  $\lambda_{m_l} \pm 1$  هستند. می‌توان تحقیق کرد که کت بهنجار شده عبارت است از

$$|l, m_l \pm 1\rangle = \frac{1}{[\{\lambda_l - \lambda_{m_l}(\lambda_{m_l} \pm 1)\}\hbar^2]^{1/2}} \hat{L}^{\pm}|l, m\rangle \quad (۹۴-۵)$$

عملگرهای  $\hat{L}^+$  و  $\hat{L}^-$  به ترتیب عملگرهای بالابرنده و پائین آورنده هستند و نتیجه می‌گیریم که مقادیر طیف  $\hat{L}_z$  به اندازه یک عدد صحیح باهم اختلاف دارند. با این وجود، از (۹۱-۵) نتیجه می‌شود که  $\lambda_{m_l}$  کرانه‌دار است. از ملاحظات تقارن فضایی می‌توان فرض کرد که مقادیر  $\lambda_{m_l}$  نسبت به صفر متقارن اند و طبق

$$-\lambda_{m_0}, -\lambda_{m_0} + 1, \dots, \lambda_{m_0} - 1, \lambda_{m_0} \quad (۹۵-۵)$$

توسط کرانه  $\lambda_{m_0}$  محدود می‌شوند. با این وجود، غیرممکن است مجموعه‌ای از اعداد با فاصله‌های عدد صحیح داشته باشیم که در (۹۵-۵) صدق کنند مگر اینکه  $\lambda_{m_0}$  یا صحیح باشد یا نیمه صحیح. به عنوان مثال، اگر  $\lambda_{m_0} = +\frac{3}{2}$  باشد غیرممکن است به وسیله فواصل با عدد صحیح به  $-\frac{3}{2}$  رسید. لذا قرار می‌دهیم  $\lambda_{m_0} = l$  یا صحیح است یا نیمه صحیح؛ بنابراین نتیجه می‌شود  $\lambda_{m_l} = m_l$  که در آن  $m_l$  بسته به مقدار  $l$  یا صحیح است یا نیمه صحیح. معادله (۹۵-۵) اکنون به صورت زیر در می‌آید

$$-l \leq m_l \leq l \quad (l, |m_l| = 0, 1, 2, \dots \quad \text{یا} \quad l, |m_l| = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots) \quad (۹۶-۵)$$

روشن نردبانی به این نتیجه اضافی منجر می‌شود که، براساس (۸۹-۵)،  $m_l$  و  $l$  ممکن است هم صحیح باشند هم نیمه صحیح. لیکن در موردی که  $\hat{L}$  دارای یک مشابه کلاسیکی است

(یعنی،  $\hat{L}$  یک تابع بندادی از  $\phi$  و  $\hat{p}$  است) و در نتیجه دارای یک ویژه تابع  $\psi_{lm_l}$  است، تک مقداری بودن آن مقادیر نیمه صحیح را طرد می‌کند. در مورد یک تگانه زاویه‌ای صرفاً "مکانیک کوانتومی (به عنوان مثال، اسپین)، خواهیم دید که مقادیر نیمه صحیح نه تنها مجاز هستند بلکه عملاً لازم هم هستند.

برای پیدا کردن مقدار  $\lambda_l$  مشاهده می‌کنیم که وقتی  $\lambda_{m_l} = \lambda_{m_0} = l$  باشد، تاثیر عملگر بالا برنده حالت جدیدی ایجاد نمی‌کند، یعنی،

$$\hat{L}^+ |l, l\rangle = 0 \quad (5-97)$$

با استفاده از اتحاد

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = \hat{L}^- \hat{L}^+ + \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z$$

خواهیم داشت

$$\hat{L}^2 |l, l\rangle = \hbar^2 \lambda_l |l, l\rangle$$

یا

$$(\hat{L}^- \hat{L}^+ + \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z) |l, l\rangle = \hbar^2 \lambda_l |l, l\rangle$$

با استفاده از (5-97) و (5-90 ب) نتیجه خواهیم گرفت

$$(l^2 \hbar^2 + l \hbar^2) |l, l\rangle = \hbar^2 \lambda_l |l, l\rangle$$

یا

$$\lambda_l = l(l+1)$$

که با نتایج قبلی مطابقت می‌کند. وقتی یکی از ویژه بردارهای  $|l, m_l\rangle$  شناخته شده باشد، بردارهای مجاور می‌توانند با استفاده از (5-94) به دست آیند، که نتیجه می‌دهد

$$|l, m_l \pm 1\rangle = \frac{1}{\{[l(l+1) - m_l(m_l \pm 1)]\hbar^2\}^{1/2}} \hat{L}^\pm |l, m_l\rangle$$

ویژه تابعها می‌توانند با بیان (5-97) در مکانیک موجی و ایجاد یک معادله دیفرانسیل برای  $Y_{l,l}$  به دست آیند. سپس ویژه تابعهای مجاور  $Y_{l, l-1}$ ، با اعمال پائین آوری متوالی به روشی مشابه با روش به کار برده شده در فصل ۴ برای یک نوسانگر، به دست می‌آیند. نتایج اینجا با نتایج به دست آمده از مکانیک موجی مطابقت می‌کنند.

خاطر نشان کردیم که الگوی عادی زمین یک تصویر ناقصی از ترازهای انرژی الکترون هیدروژنی در یک میدان مغناطیسی یکنواخت ارائه می دهد . هم چنین ثابت کردیم که یک تکانه زاویه ای غیر کلاسیکی (اگر وجود داشته باشد) می تواند دارای اعداد کوانتومی نیمه - صحیح یا صحیح باشد . این واقعیتها همراه با بعضی داده های تجربی ، که بعداً مورد بحث قرار خواهند گرفت ، به طور کاملاً "طبیعی منجر به وجود اسپین ذاتی - موضوع فصل بعدی - خواهد شد .

### مسائل

۱-۵ تابع حالت وابسته به حالت  $|\beta\rangle$  در نمایش تکانه ای (پیوسته) به وسیله

$$\Psi_{\beta}(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p} | \beta \rangle$$

تعریف می شود . نشان دهید که  $\Psi_{\beta}(\mathbf{p})$  تبدیل فوریه

$$\Psi_{\beta}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \beta \rangle$$

است ، یعنی

$$\Psi_{\beta}(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \Psi_{\beta}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

(راهنمایی: رابطه بستاری  $\hat{1} = \int |\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}| d\mathbf{r}$  را در تعریف  $\Psi_{\beta}(\mathbf{p})$  وارد کنید) .  
۲-۵ نشان دهید چگونه می توان انرژی و ویژه تابع حالت پایه وابسته به یک پتانسیل جعبه ای متناهی ، یعنی پتانسیلی که برای آن داشته باشیم

$$V = 0 \quad 0 \leq x \leq a, \quad 0 \leq y \leq b, \quad 0 \leq z \leq c \quad \text{برای}$$

$$V = V_0 \quad \text{برای جاهای دیگر}$$

به دست آورد .

۳-۵ با استفاده از تبدیل (۵-۲۶) نشان دهید که مولفه های  $\hat{L}_z$  به وسیله (۵-۳۴) داده می شوند .

۴-۵ با استفاده از روابط جابه‌جایی برای مولفه‌های  $\hat{p}$  و  $\hat{p}$  ، رابطه جابه‌جایی

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z$$

را ثابت کنید .

۵-۵ ثابت کنید که  $\hat{L}^2$  و  $\hat{L}_z$  با هر هامیلتونی نیروی مرکزی جابه‌جاپذیراند .

۶-۵ تحقیق کنید که مسئله نوسانگر همسانگرد در مختصات قطبی استوانه‌ای تفکیک‌پذیر است و چند ویژه‌مقدار و ویژه‌تابع اول آنرا به دست آورید . این نتایج را با جوابهای به دست آمده در مختصات دکارتی مقایسه کنید .

۷-۵ نشان دهید چگونه می‌توان انرژی و ویژه تابع حالت پایه را برای ذره‌ای به جرم  $M$  در یک چاه پتانسیل کروی

$$V = -V_0 \quad (0 \leq r \leq R)$$

$$V = 0 \quad (\text{جاهای دیگر})$$

محاسبه کرد (فرض کنید برای این حالت  $l=0$  است)

۸-۵ تحقیق کنید که محتمل‌ترین مکان برای الکترون هیدروژنی در حالت پایه در  $r=a$  است که در آن  $a = \hbar^2/me^2$  اولین شعاع بوهر است .

۹-۵ وقتی سیستمی در یک ویژه حالت  $\hat{L}_z$  که آنرا با  $|nlm_l\rangle$  نمایش می‌دهیم ، باشد نشان دهید که  $\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$  . (راهنمایی: از  $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \hat{L}_k$  استفاده کنید)

۱۰-۵ فرمولهای مربوط به تبهگنی نوسانگر همسانگرد ، یعنی ،  $\frac{1}{2}(\bar{n} + 1)(\bar{n} + 2)$  ، تبهگنی ، را برای تراز  $\bar{n} = 3$  با شمارش ویژه تابعهای این تراز در مختصات دکارتی و کروی ، امتحان کنید .

۱۱-۵ انرژی حالت پایه و اولین شعاع بوهر در هیدروژن را با کمینه‌سازی تابع انرژی

$$\mathcal{E} = \frac{(\Delta p)^2}{2m} - \frac{e^2}{\Delta r}$$

و با توجه به محدودیت  $\Delta p \Delta r \simeq \hbar$  محاسبه کنید .  $\Delta r_{\min}$  و  $\mathcal{E}_{\min}$  به دست آمده را با مقادیر صحیح آنها مقایسه کنید .

۱۲-۵ چون  $\hat{L}_z = (\hbar/i) \partial/\partial\phi$  مزدوج بندادی زاویه سمتی  $\phi$  است ، انتظار داریم که رابطه



عدم قطعیت زیر برقرار باشد

$$\Delta L_z \Delta \phi \geq \frac{1}{2} \hbar$$

اما همیشه می‌توان، از دید نظریه،  $L_z$  را با دقت نامحدود (یعنی،  $\Delta L_z \rightarrow 0$ ) اندازه‌گرفت. با این وجود  $\Delta \phi$  باید همیشه کوچکتر یا مساوی با  $2\pi$  باشد زیرا این بازه تمام مقادیر زاویه سمتی را می‌پوشاند. این تناقض ظاهری با اصل عدم قطعیت را توضیح دهید.

۵-۱۳ (الف) نشان دهید که تکانه شعاعی می‌تواند به وسیله

$$\hat{p}_r = \frac{1}{2} \left[ \frac{\hat{r}}{\hat{r}} \cdot \hat{p} + \hat{p} \cdot \frac{\hat{r}}{\hat{r}} \right] \rightarrow \frac{1}{2} \frac{\hbar}{i} \left[ \frac{\mathbf{r}}{r} \cdot \nabla + \nabla \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right] = \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right)$$

نمایش داده شود. هم چنین نشان دهید که

$$\frac{\hat{p}_r^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$$

(ب) رابطه جابه‌جایی  $[\hat{p}, \hat{p}_r] = i\hbar \hat{r}$  را تحقیق کنید.

### مراجع پیشنهادی

- Arfken, G., "Mathematical Methods for Physicists," 2nd ed. Academic Press, New York, 1970.
- Bethe, H. A., and Salpeter, E. E., "Quantum Mechanics of One and Two Electron Atoms," Chapter 1a. Springer-Verlag, Berlin, 1957.  
(This reference work represents one of the most comprehensive texts on hydrogen and helium ever written!)
- Bohm, D., "Quantum Theory," Chapter 14. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1951.
- Borowitz, S., "Fundamentals of Quantum Mechanics," Chapters 12 and 13. Benjamin, New York, 1967.
- Merzbacher, E., "Quantum Mechanics," 2nd ed. Chapter 9. Wiley, New York, 1970.
- Morse, P. M., and Feshbach, H., "Methods of Theoretical Physics," Volume I, Chapter 5. McGraw-Hill, New York, 1953.
- Pauling, L., and Wilson, E. B., "Introduction to Quantum Mechanics," Chapter 4. McGraw-Hill, New York, 1935.
- Saxon, D. S., "Elementary Quantum Mechanics," Chapter 9. Holden-Day, San Francisco, 1964.



# ۶

## تکانه زاویه‌ای اسپینی

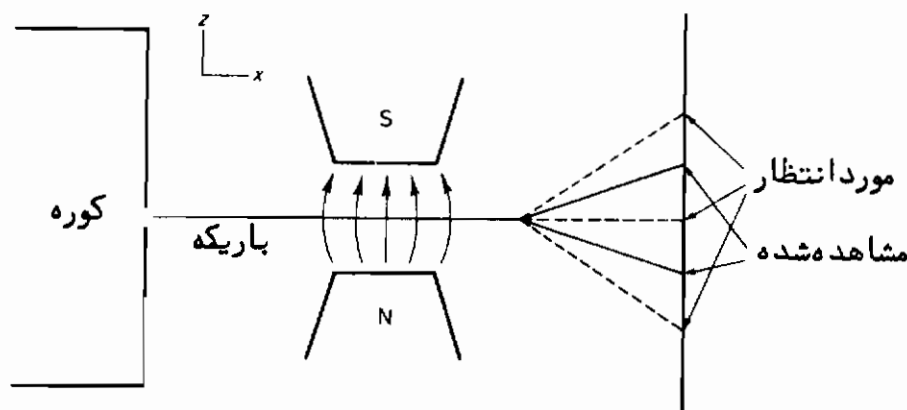
پیشرفت‌های تجربی در سال‌های ۱۹۲۵ داده‌هایی به دست دادند که فیزیکدان‌ها را به این نظریه هدایت کرد که ذرات بنیادی مثل الکترون‌ها نه تنها دارای خواص موجی هستند بلکه ممکن است یک تکانه زاویه‌ای اسپینی ذاتی نیز داشته باشند. در سال ۱۹۲۲ یک آزمایش به وسیله اشترن و گرلاخ این اسپین را به طور بسیار جالبی آشکار کرد. در این آزمایش یک باریکه از اتم‌های نقره از داخل یک میدان مغناطیسی کمی غیریکنواخت عبور داده شد (شکل ۱-۶). اولاً، "غیریکنواختی میدان یک نیروی خالصی بر روی دو قطبی مغناطیسی وابسته به اتم‌های باریکه ایجاد می‌کند. ثانیاً، میدان جهتی (به عنوان مثال، محور  $z$ ) برای کوانتتش فضائی ایجاد می‌کند. اثبات اینکه نیروی خالص متوسطی که بر یک دو قطبی مغناطیسی وارد می‌شود عبارت است از  $\langle F_z \rangle = \mu_z \partial B_z / \partial z$  که در آن  $\mu_z$  مولفه گشتاور دو قطبی مغناطیسی اتم در امتداد محور  $z$  است، به عنوان تمرین واگذار می‌شود.

همان‌طور که در فصل ۵ بحث شد، یک دو قطبی مغناطیسی از حرکت مداری الکترون‌ها در اطراف هسته سرچشمه می‌گیرد. برای سهولت فرض می‌کنیم که این گشتاور از تنه‌ها الکترون خارجی‌ترین مدار هر کدام از اتم‌های نقره ناشی می‌شود، در نتیجه بر طبق (۵-۸۳) انتظار داریم که گشتاور مغناطیسی برابر باشد با

$$\mu_z = -\frac{1}{2} \frac{e}{mc} L_z = -\frac{1}{2} \frac{e\hbar}{mc} m_l \quad (1-6)$$

بنابراین نیروی وارد به هر اتم به زاویه میل آن نسبت به محور  $z$ ، یعنی، زیر حالت مغناطیسی آن، بستگی دارد. اگر  $l$  یک عدد صحیح باشد، که در مورد تکانه زاویه‌ای مداری همیشه

چنین است، تعداد زیر حالات،  $2l + 1$ ، فرد است و انتظار خواهیم داشت که باریکه طوری تجزیه شود که تعداد خطوط روی پرده آشکارکننده فرد باشد. ولی وقتی آزمایش انجام گرفت فقط دو خط ظاهر شد. بنابراین گشتاورهای دو قطبی اتمهای نقره نمی‌توانستند به وسیله تکانه زاویه‌ای مداری ایجاد شده باشند.



شکل (۱-۶) آزمایش اشترن - گریلاخ.

شواهد بیشتری، حاکی از وجود اسپین، از اندازه‌گیریهای طیف نمایی ساختار ریز روی طیف گسیلی اتمها به دست آمد. گودشمیت و اوهلنگ با این پیشنهاد که الکترون علاوه بر تکانه زاویه‌ای مداری دارای یک اسپین داخلی یا تکانه زاویه‌ای ذاتی است که به وسیله اعداد کوانتومی  $s$  و  $m_s$  مشخص می‌شود، اختلاف بین نظریه و تجربه را برطرف کردند. این اعداد کوانتومی به ترتیب مشابه‌های  $l$ ،  $m_l$  وابسته به تکانه زاویه‌ای مداری می‌باشند. چون فقط دو تصویر در آزمایش اشترن - گریلاخ مشاهده شد، اعداد کوانتومی به  $s = \frac{1}{2}$  و  $m_s = \pm \frac{1}{2}$  محدود شدند. نظریه اسپین بلافاصله به وسیله پاولی فرمولبندی شد و این همان نظریه‌ای است که اکنون مورد بحث قرار خواهیم داد.

### ۱ - نظریه پاولی برای اسپین الکترون

در آغاز تاکید می‌کنیم که اسپین ذاتی یک ذره مشابه کلاسیکی ندارد. بنابراین مجسم کردن الکترون به صورت کره‌ای که حول محور خود می‌چرخد کاملاً نادرست است. اولاً، عملگر اسپین،  $\hat{S}$ ، یک تابع بندادی از  $\hat{p}$  و  $\hat{r}$  نیست و الکترون ساختار کلاسیکی داخلی ندارد. ثانیاً، اگر یک حد کلاسیکی وجود می‌داشت، طبق اصل تناظر، وقتی  $s$  و  $m_s$  بزرگ بودند به این حد می‌رسیدیم. اما، برخلاف  $l$ ،  $m_l$  در تکانه زاویه‌ای مداری، مقادیر اسپین ذرات

بنیادی همیشه از مرتبه  $\hbar$  می باشند .

در حالی که نظریه‌ای که مورد بحث قرار می‌گیرد در مورد الکترون ( $s = \frac{1}{2}$ ) صادق است، با کمی زحمت می‌تواند به مقادیر بالاتر اسپین ذاتی تعمیم داده شود\*.

با استفاده از اصول موضوع زیر شروع می‌کنیم :

(الف) اسپین به وسیله یک عملگر هرمیتی  $\hat{S}$  که مولفه‌های آن در روابط جابه‌جایی

شبهه به (۵-۸۹) صدق می‌کنند نمایش داده می‌شوند

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar \hat{S}_k \quad (i, j, k = x, y, z \quad \text{با ترتیب دوره‌ای}) \quad (۲-۶)$$

(ب) ویژه مقدارهای  $\hat{S}^2$  عبارتند از  $s(s+1)\hbar^2$  که در آن  $s = \frac{1}{2}$  . به علاوه ،

ویژه مقدارهای هر کدام از مولفه‌های  $\hat{S}$  (به عنوان مثال  $\hat{S}_z$ ) عبارتند از

$$m_s \hbar \quad \text{که در آن } |m_s| \leq s \quad \text{یا } m_s = \pm \frac{1}{2} .$$

می‌توان اصل (الف) را به عنوان تعریف هرتکانه زاویه‌ای در نظر گرفت . اصل موضوع

(ب) ایجاب می‌کند که اسپین کاملاً "مکانیک کوانتومی است و هم چنین چون متغیر  $r$  در آن

داخلت نمی‌کند ، مشابه مکانیک موجی برای آن وجود ندارد . وجود دو ویژه مقدار برای  $\hat{S}_z$

پیشنهاد می‌کند که عملگرهای اسپین باید در یک فضای "اسپینی" دوبعدی نمایش داده شوند .

دیدیم که ویژه بردارهای یک عملگر هرمیتی می‌توانند به عنوان یک پایه ، که عملگرها

و بردارهای دیگر را در آن نمایش می‌دهیم ، به کار روند . در مورد اسپین ، معمول است که

ویژه پایه  $\hat{S}_z$  را به کار می‌برند که در آن  $\hat{S}_z$  به صورت ماتریس قطری

$$\hat{S}_z \rightarrow \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\hbar & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}\hbar \end{pmatrix} \quad (۳-۶)$$

نمایش داده می‌شود ، و ویژه بردارهای راست‌هنگار آن ، یعنی ،

$$|m_s\rangle = |\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{و} \quad |m_s\rangle = |-\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (۴-۶)$$

\* ذرات با اسپینهای نیمه صحیح را فرمیون و آنهایی را که دارای اسپین صحیح هستند

بوزون می‌نامیم . بعداً" (در فصل ۹) خواهیم دید که بوزونها و فرمیونها از آمارهای

متفاوتی تبعیت می‌کنند ، و در نتیجه رفتار ترمودینامیکی ماده‌ای که آنرا تشکیل می‌دهند

"کلاً" متفاوت است .

به عنوان پایه به کار می‌روند. در این پایه عملگرهای دیگر به شکل

$$\hat{S}_x \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2}\hbar \\ \frac{1}{2}\hbar & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_y \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2}i\hbar \\ \frac{1}{2}i\hbar & 0 \end{pmatrix} \quad (۵-۶)$$

در می‌آیند. در نتیجه روابط جابه‌جایی (۶-۲)، همان‌طور که از

$$\begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2}\hbar \\ \frac{1}{2}\hbar & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2}i\hbar \\ \frac{1}{2}i\hbar & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2}i\hbar \\ \frac{1}{2}i\hbar & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2}\hbar \\ \frac{1}{2}\hbar & 0 \end{pmatrix} = i\hbar \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\hbar & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}\hbar \end{pmatrix}$$

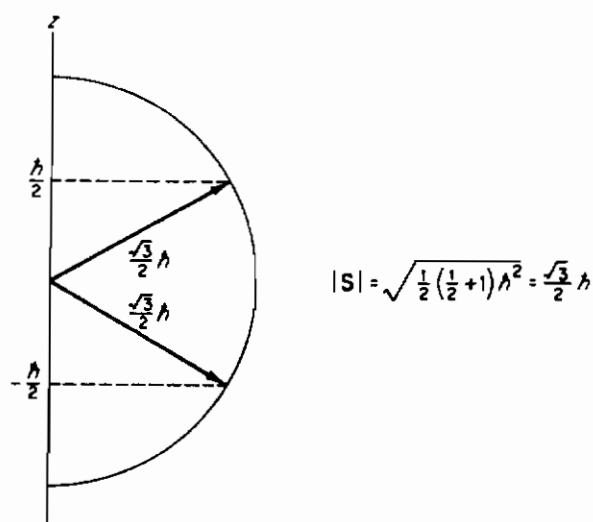
دیده می‌شود، برقرار هستند. ماتریس  $\hat{S}^2$ ، بعد از ساده شدن، می‌شود

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 \rightarrow \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2 \hat{1} \quad (۶-۶)$$

که از آن ویژه مقدارها به صورت

$$s(s+1)\hbar^2 = \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)\hbar^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$$

همان‌طور که اصل موضوع اول ایجاب می‌کند، به دست می‌آیند (شکل ۶-۲).



شکل (۶-۲). کوانتش فضایی برای اسپین ذاتی،  $s = \frac{1}{2}$

گاهی اوقات مناسب است که عملگرهای اسپین را به صورت  $\hat{S}_i = \frac{1}{2}\hbar\hat{\sigma}_i$  بیان کنیم که

در آن

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (۷-۶)$$

عبارتند از ماتریسهای پاولی. این ماتریسها دارای خواص زیراند

$$\begin{aligned} [\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] &= 2i\hat{\sigma}_k \\ [\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j]_+ &= 2\delta_{ij} \\ \sum_{i=1}^3 \hat{\sigma}_i^2 &= 3\hat{1}. \end{aligned} \quad (۸-۶)$$

از (ب) نتیجه می‌شود که دو ماتریس پاولی متفاوت یاد جابه‌جاپذیر اند، یعنی  $\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = -\hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_i$  و ویژه بردارهای  $\hat{S}_x$  و  $\hat{S}_y$  می‌توانند (در ویژه پایه  $\hat{S}_z$ ) با استفاده از روشهای متداول ماتریسی به دست آیند. به عنوان مثال، می‌توان مستقیماً تحقیق کرد که

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{و} \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

ویژه بردارهای  $\hat{S}_x$  با ویژه مقدارهای  $\frac{1}{2}\hbar$  و  $-\frac{1}{2}\hbar$  هستند. ویژه بردارهای  $\hat{S}_z$ ، که آنها را با  $|m_s\rangle$  نمایش می‌دهیم یک پایه کامل راست‌هنجار تشکیل می‌دهند و هر کت اسپینی می‌تواند به وسیله\*

$$|\chi\rangle = \sum_{m_s=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} a_{m_s} |m_s\rangle$$

نمایش داده شود. لازم نیست که ویژه کتها را با  $|s, m_s\rangle$  نمایش دهیم زیرا برای یک ذره معین  $s$  همیشه مقدار ثابتی دارد (مثلاً، برای الکترون داریم  $s = \frac{1}{2}$ ). حالا که نمایش اسپینی توسعه داده شد می‌خواهیم یک کت حالت کلی بسازیم که هم خواص فضائی و هم خواص اسپینی را با هم منعکس نماید. برای انجام این کار یک ضرب مستقیم\* از کت فضائی و کت اسپینی، یعنی،

$$| \text{اسپینی} \rangle \otimes | \text{فضائی} \rangle = | \text{کلی} \rangle$$

\* این ضرب مستقیم کتهای فضائی و اسپینی نباید با ضرب برداری معمولی اشتباه شود. ضرب مستقیم را ضرب تانسوری نیز می‌نامند.

تشکیل می‌دهیم، فرض می‌شود که تمام عملگرهای اسپینی با تمام عملگرهای فضائی (به‌عنوان مثال، با  $\hat{L}$ ،  $\hat{p}$  و  $\hat{q}$ ) جابه‌جاپذیراند. به‌علاوه، عمل هر عملگر اسپینی روی  $\langle \text{کلی} |$  قسمت فضائی را ثابت نگه می‌دارد و تنها روی قسمت اسپینی عمل می‌کند. عکس آن در مورد عملگرهای فضائی صادق است. یک ذره در یک میدان نیروی مرکزی (به‌عنوان مثال، یک الکترون هیدروژنی) می‌تواند به‌وسیله یک کت کلی

$$|nlm_l m_s\rangle = |nlm_l\rangle \otimes |m_s\rangle \quad (۹-۶)$$

نمایش داده شود، که در آن اعداد کوانتومی جدید به‌اسپین ذره نسبت داده می‌شوند. این بردارهای کت دارای خواص زیراند

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}|nlm_l m_s\rangle &= \varepsilon_{nl}|nlm_l m_s\rangle \\ \hat{L}^2|nlm_l m_s\rangle &= l(l+1)\hbar^2|nlm_l m_s\rangle \quad (l=0, 1, 2, \dots) \\ \hat{L}_z|nlm_l m_s\rangle &= m_l\hbar|nlm_l m_s\rangle \quad (m_l=0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l) \\ \hat{S}^2|nlm_l m_s\rangle &= s(s+1)\hbar^2|nlm_l m_s\rangle \quad (s=\frac{1}{2}) \end{aligned}$$

و

$$\hat{S}_z|nlm_l m_s\rangle = m_s\hbar|nlm_l m_s\rangle \quad (m_s = \pm \frac{1}{2})$$

با

$$\langle n'l'm'_l m'_s | nlm_l m_s \rangle = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{m_l m'_l} \delta_{m_s m'_s}$$

برای اختصار، از این به‌بعد علامت  $\otimes$  را حذف می‌کنیم و ضرب مستقیم را به‌صورت  $\langle \text{اسپین} | \text{فضا} |$  می‌نویسیم. ویژه اسپینور (ویژه تابع به‌اضافه اسپین) را با گرفتن حاصل ضرب داخلی  $\langle \text{کلی} |$  با  $|r\rangle$  ایجاد می‌کنیم. چون برای اخیر یک ویژه برای فضائی است، حاصل ضرب داخلی فقط روی قسمت فضائی تأثیر می‌کند و خواهیم داشت

$$\psi_{nlm_l m_s}(r) = \langle r | nlm_l \rangle |m_s\rangle = \psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) |m_s\rangle \quad (۱۰-۶)$$

با به‌کاربردن ویژه پایه  $\hat{S}_z$  برای  $|m_s\rangle$ ، ویژه اسپینورهای "اسپین بالا" ( $m_s = \frac{1}{2}$ ) و "اسپین پائین" ( $m_s = -\frac{1}{2}$ ) به‌ترتیب به‌صورت

$$\psi_{nlm_l \pm} = \psi_{nlm_l} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_{nlm_l} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (۱۱-۶)$$



و

$$\psi_{nlm_l - \frac{1}{2}} = \psi_{nlm_l} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{nlm_l} \end{pmatrix}$$

به دست می‌آیند .

بدین ترتیب حالت‌های نیروی مرکزی علاوه بر  $2l + 1$  تبهگنی فضائی اکنون دارای یک تبهگنی دوگانه ناشی از اسپین نیز می‌باشند . در مورد خاص هیدروژن ، تبهگنی تصادفی می‌شود

$$2 \sum_{l=0}^{n-1} 2l + 1 = 2n^2$$

برای مثال ، حالت پایه هیدروژن (پتانسیل کولنی) که در آن  $\psi_{100\frac{1}{2}}$  و  $\psi_{100-\frac{1}{2}}$  دارای انرژی  $13/6 \text{ eV}$  - می‌باشند ، دوبار تبهگن است .

## ۲ - خواص تبدیل کتهای اسپینی - تگانه زاویه‌ای کل

در فصل ۳ خاطرنشان ساختیم که عملگر  $\hat{p}_x$  مولد انتقال‌های یک سیستم در امتداد محور  $x$  است . به همین طریق ، عملگر  $\hat{L}_z$  مولد دورانیها حول محور  $z$  است . در واقع می‌توان ثابت کرد که اگر ذره‌ای در یک حالت  $|r, \theta, \phi\rangle$  ، یعنی دقیقاً "در نقطه  $r$  ،  $\theta$  و  $\phi$  باشد ، عملگر  $\exp(-i\hat{L}_z \bar{\phi}/\hbar)$  حالتی ایجاد می‌کند که در آن ذره به  $r$  ،  $\theta$  و  $\phi + \bar{\phi}$  چرخیده است . این عمل از نظر ریاضی به صورت زیر بیان می‌شود

$$\exp(-i\hat{L}_z \bar{\phi}/\hbar) |r, \theta, \phi\rangle = |r, \theta, \phi + \bar{\phi}\rangle \quad (12-6)$$

حالا یک کت فضائی دلخواه  $|\alpha\rangle$  در نظر بگیریم . چون پایه  $|nlm_l\rangle$  ، تا آنجا که به کتهای فضائی مربوط می‌شود ، کامل است ، می‌توان بسط زیر را انجام داد

$$|\alpha\rangle = \sum_{nlm_l} a_{nlm_l} |nlm_l\rangle$$

اگر سیستم اصلی را به اندازه  $\bar{\phi}$  درجه حول محور  $z$  دوران دهیم ، حالت جدید خواهد شد

$$|\alpha'\rangle = \exp(-i\hat{L}_z \bar{\phi}/\hbar) |\alpha\rangle \\ = \sum_{nlm_l} a_{nlm_l} \exp(-im_l \bar{\phi}) |nlm_l\rangle \quad (m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l) \quad (13-6)$$

فرض کنیم که دوران برابر  $\bar{\phi} = 2\pi$  باشد در این صورت  $e^{-im_s 2\pi} = 1$  و نتیجه می‌گیریم  $|\alpha'\rangle = |\alpha\rangle$ ، همان‌طور که انتظار می‌رفت. بنابراین تک مقداری بودن به کت فضائی مربوط می‌شود.

برای تعمیم به اسپین، مولد دوران (حول محور  $z$ ) را به صورت  $\exp(-i\hat{S}_z \bar{\phi}/\hbar)$  در نظر می‌گیریم. با تأثیر این عملگر روی یک کت اسپینی عمومی

$$|\chi\rangle = \sum_{m_s=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} a_{m_s} |m_s\rangle$$

خواهیم داشت

$$|\chi'\rangle = \exp(-i\hat{S}_z \bar{\phi}/\hbar) |\chi\rangle = \sum_{m_s=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} a_{m_s} \exp(-im_s \bar{\phi}) |m_s\rangle \quad (6-14)$$

چون  $m_s$  نیمه صحیح است، یک دوران  $2\pi$  کت اصلی را نمی‌دهد. در واقع یک دوران  $4\pi$  لازم است تا  $|\chi'\rangle = |\chi\rangle$  به دست آید. به این دلیل، کتهای اسپینی گاهی اوقات "نیمه‌بردار" یا متداول‌تر، "اسپینور نامیده می‌شوند. یک اسپینور دلخواه تحت یک دوران  $2\pi$  در  $e^{-i\pi} = -1$  ضرب می‌شود. با این وجود، چون احتمالات و مقادیر قابل انتظار، حاصل ضربهای داخلی یا "مربعها"ی این اسپینورها را در بر دارند، مشاهده‌پذیرها تحت دوران  $2\pi$  بدون تغییر باقی می‌مانند\*.

چون  $\exp(-i\hat{L}_z \bar{\phi}/\hbar)$  و  $\exp(-i\hat{S}_z \bar{\phi}/\hbar)$  به ترتیب قسمتهای فضائی و اسپینی کت کلی حالت را تبدیل می‌کنند، نتیجه می‌شود

$$\begin{aligned} |(\phi + \bar{\phi})\rangle_{\text{کلی}} &= \exp(-i\hat{L}_z \bar{\phi}/\hbar) \exp(-i\hat{S}_z \bar{\phi}/\hbar) |\text{total}(\phi)\rangle \\ &= \exp[-i(\hat{L}_z + \hat{S}_z) \bar{\phi}/\hbar] |\text{total}(\phi)\rangle \end{aligned} \quad (6-15)$$

عبارت

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S} \quad (6-16)$$

---

\* اثر یک دوران  $2\pi$  در (6-14) این است که یک ضریب فاز  $e^{i\pi} = -1$  ایجاد می‌کند. با اینکه دلیل تجربی‌ای که پیشنهاد کند این ضریب فاز مشاهده‌پذیر است وجود ندارد، اما بحث در این مورد پایان نیافته است.

را به عنوان عملگر تکانه زاویه‌ای کل تعریف می‌کنیم. در بخش بعدی خواهیم دید که  $\hat{J}$  در بسیاری از مسائل با نیروی مرکزی اهمیت زیادی دارد. از (۱۵-۶) نتیجه می‌شود که  $\exp(-i\hat{J}_z\phi/\hbar)$  به طور همزمان هم برای ویژگیهای فضائی و هم برای ویژگیهای اسپینی دورانهائی حول محور  $z$  ایجاد می‌کند.

### ۳ - اسپین و مسئله نیروی مرکزی

برای گنجاندن اسپین یک ذره در مسئله نیروی مرکزی، هامیلتونی را به صورت حاصلضرب یک عملگر دیفرانسیلی در یک عملگر ماتریسی، یعنی،

$$\mathcal{H}_{cf} \rightarrow \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right\} \hat{I} = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \end{pmatrix} \quad (17-6)$$

می‌نویسیم که در آن  $\hat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$  ماتریس یکه یا همانی است. قسمت‌های دیفرانسیلی و ماتریسی به ترتیب روی قسمت‌های فضائی و اسپینی کتهای حالت عمل می‌کنند. همان‌طور که تا کنون نشان داده شده است، مجموعه

$$|nlm_l m_s\rangle \rightarrow \psi_{nlm_l m_s} = \psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) |m_s\rangle \quad (18-6)$$

شامل ویژه تابعهای همزمان  $\mathcal{H}_{cf}$ ،  $\hat{L}^2$ ،  $\hat{L}_z$ ،  $\hat{S}^2$  و  $\hat{S}_z$  است. چون انرژی حداکثر به  $n$  و  $l$  بستگی دارد این حالتها تبهگن‌اند و ویژه حالت‌های منحصر به فردی برای  $\mathcal{H}_{cf}$  نیستند. هر ترکیب خطی به صورت

$$|nl\rangle = \sum_{m_l=-l}^l \sum_{m_s=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} a_{nlm_l m_s} |nlm_l m_s\rangle \quad (19-6)$$

نیز یک ویژه حالت جدید و متمایز  $\mathcal{H}_{cf}$  با انرژی  $\epsilon_{nl}$  می‌باشد (لم ۱، فصل ۳).  
نخست بررسی خواهیم کرد که آیا ویژه تابعهای همزمانی برای عملگرهای  $\mathcal{H}_{cf}$ ،  $\hat{L}^2$ ،  $\hat{S}^2$ ،  $\hat{J}^2$  و  $\hat{J}_z$  که در آن  $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$  عملگر تکانه زاویه‌ای کل مذکور در فوق است وجود دارند یا نه. برای انجام این کار کافی است مشاهده کنیم که پنج تا از عملگرهای فوق دوه‌دو جابه‌جاپذیر، و در نتیجه سازگاراند. به عنوان مثال، چون  $\mathcal{H}_{cf}$  با مولفه‌های  $\hat{L}$  و

$\hat{S}$  جابه‌جاپذیر است ، نتیجه می‌گیریم

$$[\hat{J}^2, \mathcal{H}_{cf}] = [(\hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L}_x\hat{S}_x + 2\hat{L}_y\hat{S}_y + 2\hat{L}_z\hat{S}_z), \mathcal{H}_{cf}] = 0$$

و

$$[\hat{J}_z, \mathcal{H}_{cf}] = [(\hat{L}_z + \hat{S}_z), \mathcal{H}_{cf}] = 0$$

مولفه‌های  $\hat{J}$  در روابط جابه‌جائی معمولی برای تکانه زاویه‌ای ، یعنی ،

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar\hat{J}_k \quad (i, j, k = x, y, z) \quad (۲۰-۶)$$

صدق می‌کنند (رک مسئله ۶-۷) . در آخر فصل ۵ ، با استفاده از جبر نردبانی ، نشان دادیم که عملگرهای برداری که مولفه‌های آنها در (۲۰-۶) صدق می‌کنند باید در معادلات ویژه مقداری

$$\hat{J}^2 |jm_j\rangle = j(j+1)\hbar^2 |jm_j\rangle \quad (۲۱-۶ \text{ الف})$$

$$\hat{J}_z |jm_j\rangle = m_j \hbar |jm_j\rangle \quad (|m_j| \leq j) \quad (۲۱-۶ \text{ ب})$$

که در آنها  $\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$  و اعداد کوانتومی می‌توانند یا صحیح یا نیمه صحیح باشند ، صدق کنند .

سازگار بودن عملگرهای  $\mathcal{H}_{cf}$  ،  $\hat{L}^2$  ،  $\hat{J}^2$  و  $\hat{J}_z$  پیشنهاد می‌کند که یک مجموعه ویژه بردارهای مشترک وجود دارد که دارای خواص زیر هستند

$$\mathcal{H}_{cf} |nljm_j\rangle = \varepsilon_{nl} |nljm_j\rangle$$

$$\hat{L}^2 |nljm_j\rangle = l(l+1)\hbar^2 |nljm_j\rangle \quad (l = 0, 1, 2, \dots)$$

$$\hat{J}^2 |nljm_j\rangle = j(j+1)\hbar^2 |nljm_j\rangle$$

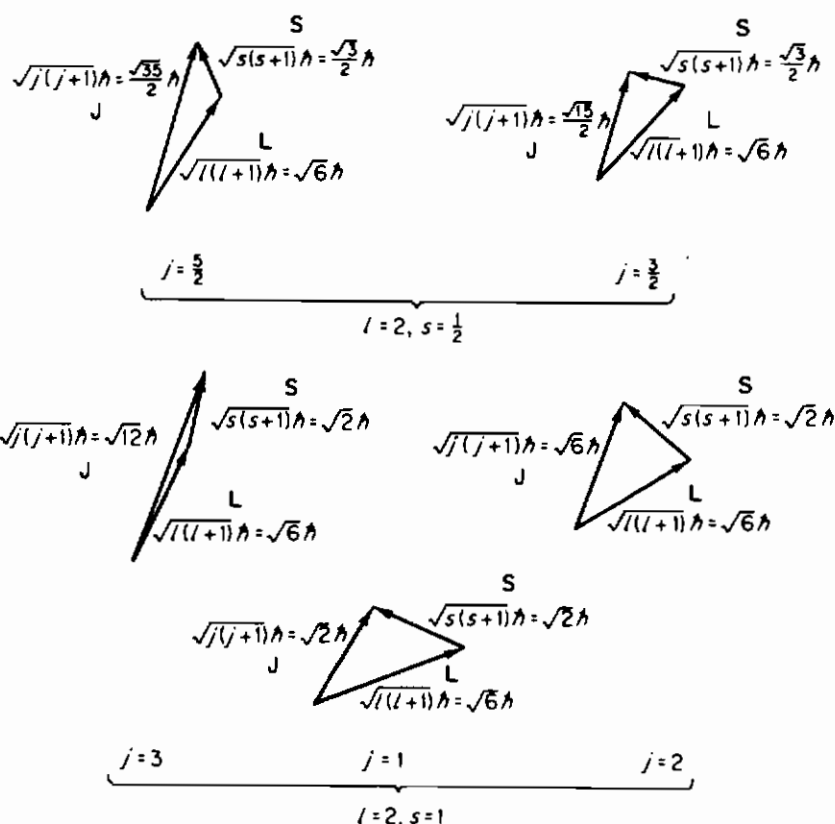
$$\hat{J}_z |nljm_j\rangle = m_j \hbar |nljm_j\rangle \quad (|m_j| \leq j) \quad (۲۲-۶)$$

این ویژه بردارها می‌توانند با استفاده از (۱۹-۶) ساخته شوند ، یعنی ،

$$|nljm_j\rangle = \sum_{m_l=-l}^l \sum_{m_s=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} C_{jm_l m_s}^{nl} |nlm_l m_s\rangle \quad (۲۳-۶)$$

ضرایب موجود در (۲۳-۶) که ویژه حالت‌های  $\hat{L}_z$  و  $\hat{S}_z$  را به ویژه حالت‌های  $\hat{J}^2$  و  $\hat{J}_z$  ربط می‌دهند

نمونه‌هایی از ضرایب به اصطلاح جمع برداری، ضرایب کلبش-گردان<sup>۱</sup>، یا ضرایب ویگنر<sup>۲</sup> هستند. برای یک مقدار معین  $l$  (و  $s = \frac{1}{2}$ )، تنها بعضی از ویژه حالت‌های  $j^2$  می‌توانند با استفاده از (۶-۲۳) ساخته شوند. برای پیدا کردن مقادیر ممکن عدد کوانتومی  $j$  از یک کمک نیمه کلاسیکی معروف به مدل برداری (شکل ۶-۳) استفاده می‌کنیم. این مدل بر پایه قاعده مثلثی برای جمع برداری استوار است و پیشگویی می‌کند که مقادیر  $j$  محدود به



شکل (۶-۳) کاربرد مدل برداری به منظور ایجاد حالت‌های  $j^2$  ( $J = L + S$ )

برای موارد  $l=2, s=\frac{1}{2}$  و  $l=2, s=1$ .

$|l-s| \leq j \leq l+s$  باشد یا در مورد الکترون که  $s = \frac{1}{2}$  است،  $j = l \pm \frac{1}{2}$  باشد. ما شرط می‌کنیم که  $j$  غیر منفی است و وقتی  $l=0$  است  $j$  را  $\frac{1}{2}$  اختیاری می‌کنیم،  $j = \frac{1}{2}$  چون  $j$  برای الکترون نیمه صحیح است،  $m_j$  نیز نیمه صحیح و محدود به مقادیر

$$m_j = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \dots, \pm j$$

است.

با اینکه نظریه گروه‌ها محاسبات را ساده می‌کند ولی محاسبه ضرایب کلبش گردان در (۲۳-۶) مشکل است. در مسئله موردنظر، برای  $s = \frac{1}{2}$  و  $l$  دلخواه، می‌توان نشان داد که ضرایب کلبش گردان می‌دهد

$$\begin{aligned} |nljm_j\rangle &= \left| n, l, l \pm \frac{1}{2}, m_j \right\rangle \\ &= \frac{1}{(2l+1)^{1/2}} \left\{ \pm \left( l \pm m_j + \frac{1}{2} \right)^{1/2} \left| n, l, m_j - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right. \\ &\quad \left. + \left( l \mp m_j + \frac{1}{2} \right)^{1/2} \left| n, l, m_j + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right\} \quad (24-6) \end{aligned}$$

یا، از (۱۱-۶) در مکانیک موجی، ویژه تابعها عبارتند از

$$\psi_{nl\pm\frac{1}{2}m_j} = \frac{R_{nl}(r)}{(2l+1)^{1/2}} \begin{pmatrix} \pm(l \pm m_j + \frac{1}{2})^{1/2} Y_l^{m_j-1/2}(\theta, \phi) \\ (l \mp m_j + \frac{1}{2})^{1/2} Y_l^{m_j+1/2}(\theta, \phi) \end{pmatrix} \quad (25-6)$$

بنابراین، به‌عنوان مثال، ویژه تابع برای  $n=2, l=1, m_j = \frac{1}{2}$  خواهد بود

$$\psi_{2,1,3/2,1/2}(r, \theta, \phi) = \frac{R_{21}(r)}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} \sqrt{2} Y_1^0(\theta, \phi) \\ \sqrt{1} Y_1^1(\theta, \phi) \end{pmatrix} \quad (26-6)$$

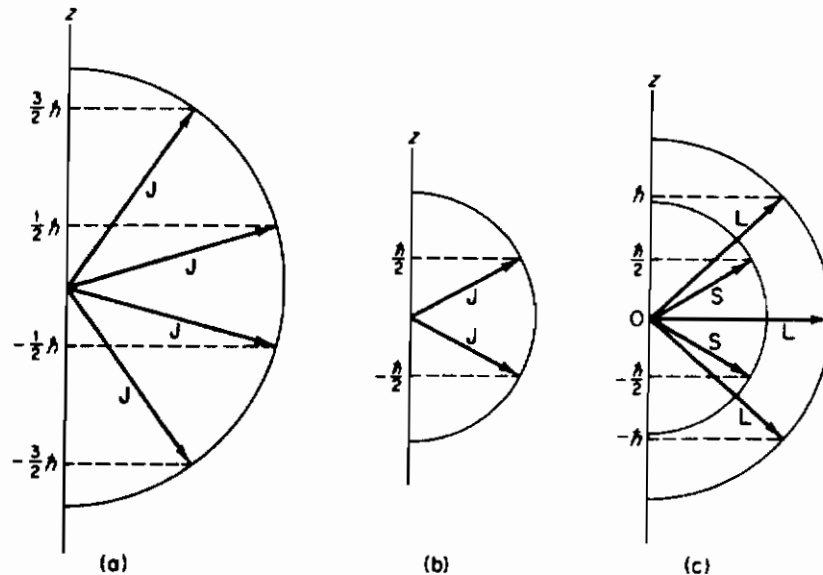
در مواقعی که اقتضا کند یک حالت هیدروژنی از نوع  $|nljm_j\rangle$  را با

$$^{2s+1}x_j = {}^2x_j \quad (27-6)$$

نمایش خواهیم داد که در آن  $x$  یک حرف قراردادی طیف نمائی وابسته به مقدار  $l$  است. به‌عنوان مثال، حالت (۲۶-۶) یک حالت  $2s_{\frac{1}{2}}$  است. حالت پایه (دوبار تبهگن) هیدروژن ( $n=1, l=0, m_j = \pm\frac{1}{2}$ ) یک حالت  $2p_{\frac{1}{2}}$  است.

شایان توجه است که تبهگنی تراز  $\epsilon_{nl}$ ، چه  $|m_l m_s\rangle$  و چه  $|jm_j\rangle$  را به‌کاربریم، یکسان است. به‌عنوان مثال، تراز  $\epsilon_{21}$  در طرحواره  $|nlm_l m_s\rangle$  شش‌بار، یعنی  $2(2l+1)$  بار، تبهگن است. این حالتها می‌توانند باهم ترکیب شوند و منجر به  $j = l + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$  و  $j = l - \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$  گردند. حالت اول  $2j+1 = 4$  بار تبهگن است (یعنی،  $m_j = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$ )، در

صورتی که حالت دوم دوبار تبهگن است. تبهگنی کل بازهم، همان‌طور که انتظار می‌رود، شش است (شکل ۴-۶).



شکل (۴-۶) شش حالت تبهگن برای  $l=1, s=\frac{1}{2}$  در طرحواره‌های  
 $|l+s|=j=\frac{3}{2}, |J|=(\sqrt{15}/2)\hbar, m_j=\pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}$  (الف).  $|m_l m_s\rangle$  و  $|j m_j\rangle$   
 $m_l=0, \pm 1, m_s=\pm\frac{1}{2}$  (ج).  $|l-s|=j=\frac{1}{2}, |J|=(\sqrt{3}/2)\hbar, m_j=\pm\frac{1}{2}$  (ب)

تبهگنی‌های فضائی ( $m_l$ ) و اسپینی ( $m_s$ ) یک هامیلتونی نیروی مرکزی منجر به ابهاماتی در برچسب زدن ویژه‌حالتها می‌شوند. همان‌طور که دیدیم یک مجموعه به صورت  $|nlm_l m_s\rangle$  نشان داده می‌شود و شامل ویژه‌حالت‌های همزمان  $\mathcal{H}_{cf}, L^2, L_z$  و  $S_z$  می‌باشد در صورتی که مجموعه دیگر به صورت  $|nlj m_j\rangle$  نمایش داده می‌شود و شامل ویژه‌حالت‌های همزمان  $\mathcal{H}_{cf}, L^2, J^2$  و  $J_z$  است. به عنوان مثال، چون  $J^2$  و  $L_z$  ناسازگاراند، این دو مجموعه متمایزاند. بنابراین باید تصریح کنیم که کدام مجموعه را مورد بررسی قرار می‌دهیم.

#### ۴ - مغناطیس اسپینی و برهم‌کنش اسپین - مدار در هیدروژن

هر ذره‌ای که اسپین ذاتی داشته باشد دارای یک گشتاور دو قطبی مغناطیسی است و در یک میدان مغناطیسی انرژی کسب می‌کند. این گشتاور دو قطبی نمی‌تواند به‌طور کلاسیکی محاسبه شود و باید در مقایسه با (۵-۸۳) با یک اصل موضوع به صورت

$$\mu_s = g_s \frac{q}{2mc} S \quad (۶-۲۸)$$

داده شود که در آن  $m, q$  و  $S$  به ترتیب بار، جرم و تکانه زاویه‌ای اسپین ذره و  $c$  سرعت نور است. ضریب تناسب  $g_s$  ضریب اسپینی " $g$ " نامیده می‌شود. براساس داده‌های تجربی برای الکترون داریم  $g_s \simeq 2.0023 \simeq 2$

انرژی کسب شده به وسیله این دوقطبی در یک میدان مغناطیسی عبارت است از  $E_{\text{mag}} = -\mu_s \cdot B$ . حتی در غیاب یک میدان خارجی، یک الکترون که در یک پتانسیل نیروی مرکزی دور می‌زند تحت تأثیر یک میدان داخلی که آنرا  $B_{\text{orbit}}$  می‌نامیم قرار می‌گیرد و هامیلتونی مربوط به این مسئله می‌شود

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{cf}} - \mu_s \cdot B_{\text{orbit}} \quad (۶-۲۹)$$

جمله آخر اساساً از برهم کنش بین حرکت مداری ذره و اسپین ذاتی آن ناشی می‌شود. از الکترو دینامیک کلاسیکی می‌دانیم که وقتی یک ذره باردار با سرعت  $v$  در داخل یک میدان الکتریکی  $E$  حرکت می‌کند، ناظری که همراه با ذره حرکت می‌کند یک میدان مغناطیسی القایی\* می‌بیند

$$B_{\text{orbit}} = B_{\text{ind}} \simeq -\frac{v}{c} \times E \quad (۶-۳۰)$$

اندازه می‌گیرد. فرض خواهیم کرد که ذره در داخل یک پتانسیل الکتروستاتیکی نیروی مرکزی به صورت  $V(r) = q\Phi(r)$  حرکت می‌کند. لذا قرار می‌دهیم

$$E = -\nabla\Phi(r) = -\frac{d\Phi}{dr} \frac{r}{r} \quad (۶-۳۱)$$

اما، چون الکترون شتاب دارد، دستگاه متصل به آن لخت نیست و در صورتی که بخواهیم به طور دقیق انرژی اسپین - مداری را پیشگوئی کنیم باید تصحیحات را منظور کنیم. بدون اثبات توضیح می‌دهیم که یک تبدیل نسبیتی به دستگاه الکترون، یک حرکت اضافی به نام حرکت تقدیمی - تامسون وارد می‌کند\*\*. این حرکت یک ضریب  $\frac{1}{\gamma}$  در عبارت انرژی دوقطبی

\* به عنوان مثال به کتاب زیر مراجعه کنید

J.K. Jackson, "Classical Electrodynamics", PP.

380-383, wiley, New-York, 1962.

\*\* برای بحث مقدماتی در باره حرکت تقدیمی تامسون به کتاب زیر مراجعه کنید

R.M. Eisberg, "Fundamentals of Modern physics," P.

340. Wiley, New York, 1960.



مغناطیسی وارد می‌کند. انرژی وابسته به مغناطیس مداری در این صورت عبارت است از

$$-\mu_s \cdot \mathbf{B}_{\text{orbit}} = +\mu_s \cdot \frac{1}{2} \left( \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{E} \right) \quad (۳۲-۶)$$

که در آن ضریب  $\frac{1}{2}$  از حرکت تقدیمی تاسون، که یک اثر نسبیتی است، ناشی می‌شود. با استفاده از (۳۱-۶) و (۳۲-۶) نتیجه می‌گیریم که هامیلتونی (۲۹-۶) خواهد شد

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \mathcal{H}_{\text{cf}} + \frac{1}{2} \mu_s \cdot \left( \frac{\mathbf{v}}{c} \times -\frac{d\Phi}{dr} \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \\ &= \mathcal{H}_{\text{cf}} - \frac{1}{2qmc} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mu_s \cdot (m\mathbf{v} \times \mathbf{r}) \quad (V = q\Phi) \\ &= \mathcal{H}_{\text{cf}} + \frac{1}{2qmc} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mu_s \cdot \mathbf{L}. \end{aligned} \quad (۳۳-۶)$$

سه حالت عمومی‌تری را که در آن سیستم با نیروی مرکزی در داخل یک میدان مغناطیسی یکنواخت خارجی  $\mathbf{B}$  قرار داشته باشد در نظر می‌گیریم. برهم‌کنش با این میدان هم دوقطبی مغناطیسی مداری را درگیر می‌کند و هم دوقطبی مغناطیسی اسپینی را. هامیلتونی می‌شود

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{cf}} + \frac{1}{2qmc} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mu_s \cdot \mathbf{L} - \mu_l \cdot \mathbf{B} - \mu_s \cdot \mathbf{B}$$

یا با استفاده از (۸۳-۵) و (۲۸-۶) هامیلتونی مکانیک کوانتومی به صورت زیر در می‌آید

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{cf}} + \frac{g_s}{(2mc)^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}} - \frac{qg_l}{2mc} \hat{\mathbf{L}} \cdot \mathbf{B} - \frac{qg_s}{2mc} \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B} \quad (۳۴-۶)$$

جمله‌های رابطه (۳۴-۶) به ترتیب عبارتند از انرژی نیروی مرکزی، انرژی برهم‌کنش "اسپین مدار"، انرژی گشتاورهای مغناطیسی مداری و اسپینی در میدان خارجی. برای الکترون هیدرژنی، قرار می‌دهیم  $q = -e$ ،  $V = -e^2/r$ ،  $g_l = 1$  و  $g_s = 2$ . در این صورت معادله (۳۴-۶) می‌شود

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{cf}} + \frac{e^2}{2m^2c^2} \frac{1}{r^3} \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}} + \frac{e}{2mc} \hat{\mathbf{L}} \cdot \mathbf{B} + \frac{e}{mc} \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B} \quad (۳۵-۶)$$

که در آن

$$\mathcal{H}_{cf} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$$

۵- میدانهای مغناطیسی خارجی - اثر پاشن - باک

جستجوی ویژه جوابهای دقیق هامیلتونی کاملاً" عمومی (۶-۳۵) نمیدکننده است. با این وجود، دو مورد که از نظر عملی اهمیت دارند وجود دارد که در خور بررسی است. مورد اول موردی است که در آن میدان خارجی آنقدر ضعیف (در مقایسه با  $B_{orbit}$ ) است که انرژی اسپین - مدار خیلی بزرگتر از انرژی برهم کنش با  $B$  است. این اثر به اثر غیرعادی زیمن موسوم است و برای اتم هیدروژن وقتی اتفاق می افتد که برای میدان خارجی داشته باشیم

$$B \ll B_{orbit} \simeq \frac{e}{c} \frac{v}{r^2} \simeq 10^4 \text{ gauss}$$

حتی در این مورد فقط جوابهای تقریبی ممکن هستند و مابحث اثر غیرعادی زیمن را به فصل بعد (روشهای تقریبی) موکول می کنیم.

مورد دیگر برای میدانهای قوی\*، وقتی  $B \gg B_{orbit}$  باشد، اتفاق می افتد. مورد میدان قوی اثر پاشن - باک نامیده می شود. در اینجا در تقریب مرتبه اول از برهم کنش اسپین مدار کاملاً" صرف نظر می شود. هامیلتونی پاشن - باک، که ویژه حالت های آنرا جستجو می کنیم، عبارت است از

$$\mathcal{H}_{PB} = \mathcal{H}_{cf} + \frac{eB}{2mc} (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) \quad (۶-۳۶)$$

محور  $z$  را طوری انتخاب کرده ایم که منطبق بر امتداد  $B$  باشد. مشاهده می کنیم که هامیلتونهای پاشن - باک و نیروی مرکزی جابه جاپذیراند، یعنی،

$$[\mathcal{H}_{PB}, \mathcal{H}_{cf}] = 0$$

که بیان می کند دو هامیلتونی دارای یک مجموعه ویژه حالت های مشترک هستند. با فرض اینکه

---

\* حتی در اینجا نیز  $B$  آنقدر کوچک فرض می شود (یعنی،  $|\mu \cdot B| \ll \mathcal{H}_{cf}$ ) که بتوان از اثرهایی که از توان دوم  $B$  هستند صرف نظر کرد.

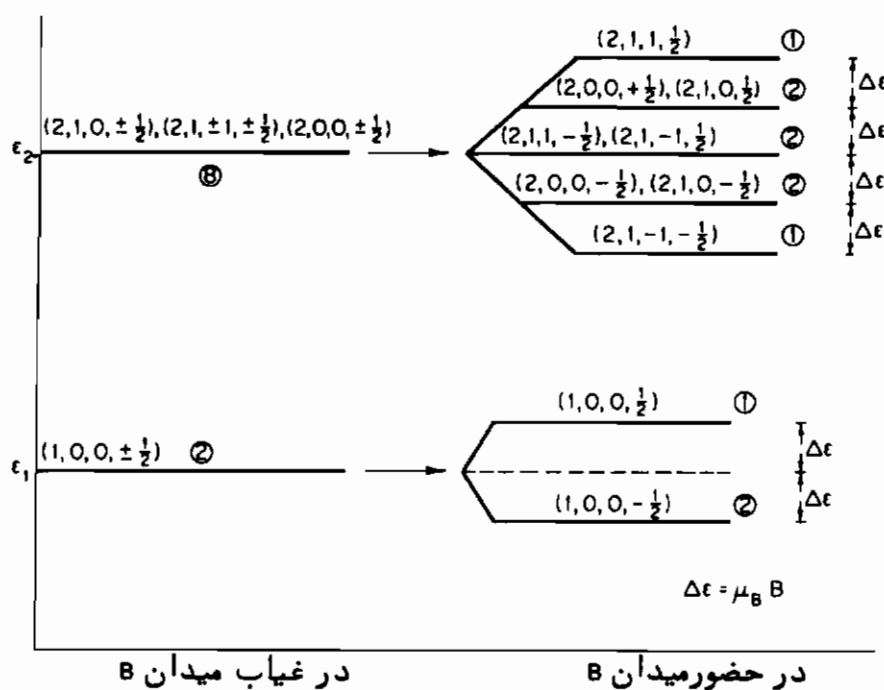
این مجموعه حالتها به صورت  $|nlm_l m_s\rangle$  باشند می نویسیم

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{PB}|nlm_l m_s\rangle &= \left\{ \mathcal{H}_{cf} + \frac{eB}{2mc} (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) \right\} |nlm_l m_s\rangle \\ &= \left\{ \varepsilon_{nl} + \frac{eB}{2mc} (m_l + 2m_s)\hbar \right\} |nlm_l m_s\rangle \quad (۶-۳۷)\end{aligned}$$

بنابراین فرض ما توجیه می شود. در حالی که  $\psi_{nlm_l m_s}$  ویژه تابعهای دقیق  $\mathcal{H}_{PB}$  هستند\*، ویژه مقدارهای انرژی جابه جا می شوند و به صورت زیر در می آیند

$$\varepsilon_{nlm_l m_s} = \varepsilon_{nl} + \mu_B B(m_l + 2m_s) \quad (۶-۳۸)$$

شکافتگی زیر سطوح مغناطیسی در هیدروژن در شکل (۶-۵) نمایش داده شده است.



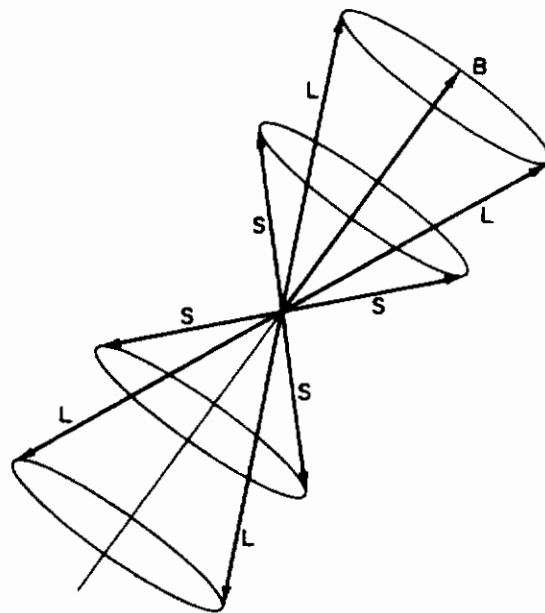
شکل (۶-۵) شکافتگی ترازهای بوهر در هیدروژن در حضور یک میدان قوی B (اثر پاشن - باک). حالتها به وسیله مقادیر  $(n, l, m_l, m_s)$  مشخص شده اند و اعداد درون دایره بهمانگر درجه تبهگنی هستند.

\* توجه کنید که این هامیلتونی تنها یک تقریب است زیرا از برهم کنش اسپین - مدار صرف نظر کرده ایم.

یک محاسبه ساده نشان می‌دهد که

$$[J^2, \mathcal{H}_{PB}] \neq 0$$

بنابراین، کتهای  $|nljm_j\rangle$ ، که ویژه کتهای  $J^2$  و  $J_z$  هستند، مسلماً معرف ویژه حالت‌های  $\mathcal{H}_{PB}$  نیستند. برای میدانهای قوی، فقط  $L^2, S^2, L_z$  و  $S_z$  کوانتیده (دقیق) هستند. در تصویر کلاسیکی  $L$  و  $S$  به‌طور مستقل حول  $B$  حرکت تقدیمی انجام می‌دهند (شکل ۶-۶)



شکل (۶-۶) "حرکت تقدیمی" آماری مستقل  $L$  و  $S$  حول  $B$  در مورد میدان قوی (اثر پاشن - باک)

آنچه که ما انجام داده‌ایم کاهش تقارن به‌وسیله اعمال یک میدان مغناطیسی قوی روی سیستم است. این عمل تبهگنی فضائی یک مسئله نیروی مرکزی را از بین می‌برد. در این صورت ویژه‌تابعها منحصر به‌فرد اند به‌طوری که تنها مجموعه  $|nlm_l m_s\rangle$  (ونه  $|nljm_j\rangle$ ) یک ویژه پایه برای  $\mathcal{H}$  تشکیل می‌دهد.

وجود اسپین ذاتی به‌طور اعجاب‌انگیزی به‌وسیله آزمایش اشترن - گرلاخ آشکار شد. این نظریه به‌صورتی که توسط گودشمیت و اوهلنیک پیشنهاد شد و کمی بعد توسط پاولی فرمولبندی گردید بسیاری از جنبه‌های طیف گسیلی آنها را توضیح داد. با این وجود، از دیدگاه ادراکی، این روش اصل موضوعی اسپین قانع‌کننده نیست. در فصل ۱۱ خواهیم دید که لازم نیست وجود اسپین ذاتی برای الکترون را به‌صورت یک اصل وضع کنیم. در واقع، نشان خواهیم داد که اسپین به‌طور کاملاً "طبیعی" از مکانیک کوانتومی و نظریه نسبیت اینشتین

حاصل می‌شود. معادله نسبیتی کوانتومی الکترون، مشابه معادله شرودینگر، معادله دیراک نامیده می‌شود. در حد  $v \ll c$ ، معادله نسبیتی دیراک به معادله غیرنسبیتی شرودینگر، که شامل اسپین است، تقلیل می‌یابد. بنابراین، وجود پدیده اسپین ذاتی می‌تواند به عنوان نتیجه مستقیم مکانیک کوانتومی نسبیتی در نظر گرفته شود.

با مطالعه یک گروه از مسائل فیزیکی، نتیجه خواهیم گرفت که جواب صحیح غالباً خارج از گستره امکانات ریاضی است. یک مورد مهم که قبلاً نیز به آن اشاره شده است مورد هیدروژن با برهم‌کنش اسپین-مدار است. خوشبختانه در بسیاری از موارد هامیلتونی مورد نظرتفاوت بسیار کمی با یک هامیلتونی که ویژه جوابهای دقیق آن شناخته شده است، دارد. اختلاف کوچک بین این دو هامیلتونی پیریشیدگی نامیده می‌شود. به دست آوردن تصحیحات لازم در مورد ویژه تابعها و ویژه مقدارها موضوع نظریه پیریشیدگی است که در فصل ۷ مورد بحث قرار خواهد گرفت.

### مسائل

۱-۶ (الف) با استفاده از مقایسه با الکتروستاتیک، نشان دهید که مولفه  $z$  نیروی وارد بر یک دوقطبی مغناطیسی در یک میدان مغناطیسی غیریکنواخت عبارت است از

$$F_z = \mu_x \frac{\partial B_z}{\partial x} + \mu_y \frac{\partial B_z}{\partial y} + \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}$$

(ب) با فرض  $B_z \gg B_x, B_y$  و اینکه دوقطبی به طور "فضائی" در امتداد محور  $z$  کوانتیده است، با اثبات  $\langle \mu_x \rangle = \langle \mu_y \rangle = 0$  نشان دهید

$$\langle F_z \rangle = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} = - \frac{eh}{2mc} m \frac{\partial B_z}{\partial z}$$

(چرا برای اینکه رابطه مربوط به  $\langle F_z \rangle$  برقرار باشد باید  $B_x$  و  $B_y$  وجود داشته باشند؟)

۲-۶ خواص ماتریسهای پاولی را برای اسپین، معادلات (۸-۶)، تحقیق کنید.

۳-۶ (الف) ویژه بردارهای (در ویژه پایه  $S_z$ ) ذره‌ای را که مولفه‌های اسپین آن در روی محور  $x$  به ترتیب  $\pm \frac{1}{2} \hbar$  است پیدا کنید.

(ب) اگر ذره در یک حالت کوانتومی، که در آن تصویر اسپین روی محور  $x$  دقیقاً

- ۴-۶  $\frac{1}{2}\hbar$  است، باشد احتمال پیدا کردن آن با مولفه  $\frac{1}{2}\hbar$  روی محور  $z$  چقدر است؟  
 با استفاده از ماتریسهای مناسب مستقیماً نشان دهید که اگر سیستم در یکی از ویژه  
 حالت‌های  $S_z$  باشد داریم  $\langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle = 0$   
 ۵-۶ (الف) ماتریسهای  $S_x$ ،  $S_y$  و  $S_z$  (در ویژه پایه  $S_z$ ) را برای ذره‌ای که مولفه‌های  
 اسپین آن به صورت  $+\hbar, 0, -\hbar$  کوانتیده‌اند بسازید.  
 (ب) عملگر  $S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$  را بسازید و تحقیق کنید که ویژه مقادیرهای آن  
 عبارتند از  $s(s+1)\hbar^2 = 1(1+1)\hbar^2 = 2\hbar^2$   
 ۶-۶ شکل عملگر یکانی‌ای که حالت فیزیکی گسل را به اندازه  $\phi$  رادیان حول یک محور  
 دلخواه که به وسیله بردار یک  $n$  مشخص شده است دوران دهد به دست آورید.  
 ۷-۶ ثابت کنید که مؤلفه‌های  $J$  در رابطه زیر صدق می‌کنند.

$$[J_i, J_j] = i\hbar J_k$$

- ۸-۶ ثابت کنید که تابع داده شده در معادله (۶-۲۵) یک ویژه تابع  $S_z$  و  $J_z$  است.  
 ۹-۶ ذره‌ای با اسپین  $\frac{1}{2}$  در حالت مداری  $l=2$  در نظر بگیرید. نشان دهید که تبهگنی  
 تراز در دو طرحواره  $|m_l m_s\rangle$  و  $|j m_j\rangle$  یکسان است.  
 ۱۰-۶ ضریب ژیرومغناطیسی اسپین برای یک پروتون ( $s=\frac{1}{2}$ ) عبارت است از  $g_s^{(p)} = 5.59$ .  
 (الف) گشتاور دو قطبی مغناطیسی پروتون را پیدا کنید.  
 (ب) تصویرهای این گشتاور را در امتداد یک میدان مغناطیسی بکنواخت  $B_z$  پیدا  
 کنید.  
 (ج) با فرض اینکه یک هسته می‌تواند به وسیله یک پروتون تک که در یک پتانسیل  
 نیروی مرکزی حرکت می‌کند نمایش داده شود، طبیعت شکافتگی ترازهای انرژی در  
 یک میدان مغناطیسی قوی را به طور کیفی بحث کنید.

### مراجع پیشنهادی

- Bohm, D., "Quantum Theory," Chapter 17. Prentice-Hall, Englewood-Cliffs, New Jersey, 1951.  
 Eisberg, R. M., "Fundamentals of Modern Physics," Chapter 11. Wiley, New York, 1961.  
 Jackson, J. D., "Classical Electrodynamics," Chapter 11. Wiley, New York, 1962.  
 Merzbacher, E., "Quantum Mechanics," 2nd ed. Chapter 12. Wiley, New York, 1970.  
 Saxon, D., "Elementary Quantum Mechanics," Chapter 10. Holden-Day, San Francisco, 1968.  
 Stehle, P., "Quantum Mechanics," Chapter 4. Holden-Day, San Francisco, 1966.



## روشهای تقریبی

### ۱ - نظریه پیریشیدگی

در فصلهای پیشین سیستمهای ایده آل شده‌ای را، که برای آنها پیدا کردن ویژه تابعهای دقیق انرژی امکان پذیر بود، بررسی کردیم. متأسفانه، پیچیدگیهای طبیعت به هامیلتونی‌هایی منجر می‌شوند که برای آنها جواب دقیق امکان پذیر نیست. در بسیاری از وضعیتهای فیزیکی تصحیحات لازم برای بعضی از سیستمهای ایده آل شده نسبتاً "کوچک" اند. به عنوان مثال، خواهیم دید که برهم کنش اسپین - مدار در هیدروژن ما را به تصحیحات کسری از مرتبه  $10^{-4}$  در ترازهای بوه‌ر می‌کشد. در این موارد ویژه تابعهای تقریبی انرژی می‌توانند به وسیله روشهای تقریبی گوناگونی به دست آیند.

هامیلتونی‌ای که ما در نظر خواهیم گرفت به صورت عمومی

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \lambda V$$

است که در آن  $\mathcal{H}_0$  هامیلتونی ناپیریشیده و  $\lambda V$  پیریشیدگی است. قسمت اخیر، برای سهولت به یک پارامتر "کوچک"  $\lambda$  و یک تابع پیریشیدگی  $V(p, \mathbf{p})$  تجزیه شده است. پیریشیدگی را می‌توان با دو روش اساساً متفاوت بررسی کرد. روش نخست، که نظریه حالت مانا نامیده می‌شود، به تصحیحات در ویژه تابعها و ویژه مقدارهای انرژی ناپیریشیده  $\mathcal{H}_0$  می‌پردازد. این روش وقتی به کار می‌رود که هامیلتونی کل (پیریشیده) از نظر فیزیکی در درجه اول اهمیت قرار دارد. این نظریه، به عنوان مثال، می‌تواند برای محاسبه تصحیحات ترازهای انرژی هیدروژن که از برهم کنش اسپین - مدار ناشی می‌شوند به کار رود.

دیدگاه دوم، به نام نظریه پیریشیدگی وابسته به زمان، وقتی به کار می‌رود که هامیلتونی ناپیریشیده دارای اهمیت اساسی است. چون  $\mathcal{H}_0$  هامیلتونی کامل نیست (بدون  $\lambda V$ )، ویژه

حالت‌های آن مانا نیستند. بخصوص، اگر سیستم در آغاز ( $t = t_0$ ) در یک ویژه حالت ناپریشیده - مثلاً  $|\varepsilon_i^0\rangle$  - باشد در یک زمان بعدی طبق قاعده زیر تحول پیدا خواهد کرد

$$|\beta_i, t\rangle = \exp[-i\mathcal{H}(t - t_0)/\hbar]|\varepsilon_i^0\rangle = \exp[-i(\mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{V})(t - t_0)/\hbar]|\varepsilon_i^0\rangle$$

که در آن یک پریشیدگی،  $\mathcal{V}$ ، مستقل از زمان در نظر گرفته‌ایم. طبق اصول موضوع مکانیک کوانتومی، احتمال مشاهده سیستم در یک ویژه حالت ناپریشیده دیگر  $|\varepsilon_j^0\rangle$  در زمان دیرتر  $t$  عبارت است از

$$\mathcal{P}_{ij}(t) = |\langle \varepsilon_j^0 | \beta_i, t \rangle|^2$$

کمیت  $d\mathcal{P}_{ij}(t)/dt$  آهنگی است که سیستم با آن "گذارهائی" را از حالت  $i$  ام به حالت  $j$  ام در اثر پریشیدگی انجام می‌دهد. بنابراین، پریشیدگی در اینجا به عنوان عاملی در نظر گرفته می‌شود که باعث گذارهای سیستم بین ویژه حالت‌های ناپریشیده  $\mathcal{H}_0$  می‌شود. آهنگ گذار ارتباط نزدیکی به مقطع موثر پراکندگی دارد. نخست با بحث نظریه پریشیدگی مانا شروع می‌کنیم.

## ۲ - نظریه پریشیدگی مانای حالت مقید ناتبهگن (روش رالی - شرودینگر)\*

فرض خواهیم کرد که هامیلتونی ناپریشده ناتبهگن باشد. این بدان معنی است که ویژه حالتها یکتا هستند و می‌توانیم یک تناظر یک به یک بین ویژه حالت‌های پریشیده  $|\varepsilon_i\rangle$  و ناپریشیده  $|\varepsilon_i^0\rangle$  برقرار کنیم. بنابراین می‌توانیم بنویسیم

$$\mathcal{H}_0|\varepsilon_i^0\rangle = \varepsilon_i^0|\varepsilon_i^0\rangle \quad (۱-۷)$$

و

$$\mathcal{H}|\varepsilon_i\rangle = (\mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{V})|\varepsilon_i\rangle = \varepsilon_i|\varepsilon_i\rangle \quad (۲-۷)$$

که در آن  $|\varepsilon_i\rangle \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} |\varepsilon_i^0\rangle$ . تأکید می‌کنیم که این شرط محدودکننده تنها در مورد هامیلتونی‌های ناتبهگن یکتا است. ما هم چنین بحث خود را به پریشیدگی حالت‌های مقید (گسسته) محدود می‌کنیم.

---

\* این روش اصلتا "به رالی"، که آن را به نظریه صوت اعمال کرد، منسوب است. بعداً این روش به وسیله شرودینگر به نظریه کوانتومی اعمال شد.



می‌توان جواب (۲-۷) را به صورت یک سری پیریشیدگی\* از توانهای  $\lambda$  بسط داد. اما آهنگ همگرایی این سری به میزان کوچکی  $\lambda$  بستگی دارد. فرض خواهد شد که ویژه بردارها و ویژه مقدارهای پیریشیده می‌توانند به صورت سریهای به شکل

$$|\varepsilon_i\rangle = |\varepsilon_i^0\rangle + \lambda|\varepsilon_i^{(1)}\rangle + \lambda^2|\varepsilon_i^{(2)}\rangle + \dots \quad (۳-۷)$$

و

$$\varepsilon_i = \varepsilon_i^0 + \lambda\varepsilon_i^{(1)} + \lambda^2\varepsilon_i^{(2)} + \dots \quad (۴-۷)$$

نوشته شوند. کتهای  $|\varepsilon_i^{(n)}\rangle$  و پارامترهای  $\varepsilon_i^{(n)}$  بیانگر تصحیحات مرتبه  $n$  ام ویژه بردارها و ویژه مقدارها هستند. ما درنمایش دیراک کار خواهیم کرد اما شکل مکانیک موجی نیربه همین نتیجه منجر می‌شود. برای مقادیر به حد کافی کوچک  $\lambda$  می‌توان فرض کرد که تنها چندتوان اول برای نزدیک شدن به جواب دقیق لازم هستند. ما بحث خود را به تقریبهای مرتبه اول و مرتبه دوم محدود می‌کنیم.

با بردن (۳-۷) و (۴-۷) در (۲-۷) خواهیم داشت

$$\begin{aligned} (\mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{V})\{|\varepsilon_i^0\rangle + \lambda|\varepsilon_i^{(1)}\rangle + \lambda^2|\varepsilon_i^{(2)}\rangle + \dots\} \\ = \{\varepsilon_i^0 + \lambda\varepsilon_i^{(1)} + \lambda^2\varepsilon_i^{(2)} + \dots\}\{|\varepsilon_i^0\rangle + \lambda|\varepsilon_i^{(1)}\rangle + \lambda^2|\varepsilon_i^{(2)}\rangle + \dots\} \end{aligned}$$

و با مجتمع کردن توانهای  $\lambda$ ،

$$\begin{aligned} [\mathcal{H}_0|\varepsilon_i^0\rangle - \varepsilon_i^0|\varepsilon_i^0\rangle] + [\mathcal{H}_0|\varepsilon_i^{(1)}\rangle + \mathcal{V}|\varepsilon_i^0\rangle - \varepsilon_i^0|\varepsilon_i^{(1)}\rangle - \varepsilon_i^{(1)}|\varepsilon_i^0\rangle]\lambda \\ + [\mathcal{H}_0|\varepsilon_i^{(2)}\rangle + \mathcal{V}|\varepsilon_i^{(1)}\rangle - \varepsilon_i^{(1)}|\varepsilon_i^{(1)}\rangle - \varepsilon_i^0|\varepsilon_i^{(2)}\rangle - \varepsilon_i^{(2)}|\varepsilon_i^0\rangle]\lambda^2 + \dots \\ = 0 \end{aligned} \quad (۵-۷)$$

چون این معادله باید برای تمام مقادیر  $\lambda$  معتبر باشد، ضریب هر  $\lambda^n$  باید برابر با صفر باشد؛ در نتیجه سلسله معادلات زیر را به دست خواهیم آورد

$$\mathcal{H}_0|\varepsilon_i^0\rangle = \varepsilon_i^0|\varepsilon_i^0\rangle \quad (۶-۷)$$

$$\mathcal{H}_0|\varepsilon_i^{(1)}\rangle + \mathcal{V}|\varepsilon_i^0\rangle = \varepsilon_i^0|\varepsilon_i^{(1)}\rangle + \varepsilon_i^{(1)}|\varepsilon_i^0\rangle \quad (۷-۷)$$

\* البته، در اینجا فرض براین است که یک چنین سری توانی وجود داشته باشد.

$$\mathcal{H}_0 |\varepsilon_i^{(2)}\rangle + \hat{V} |\varepsilon_i^{(1)}\rangle = \varepsilon_i^{(1)} |\varepsilon_i^{(1)}\rangle + \varepsilon_i^0 |\varepsilon_i^{(2)}\rangle + \varepsilon_i^{(2)} |\varepsilon_i^0\rangle \quad (۸-۷)$$

معادله مرتبه صفرم درست همان معادله ویژه مقداری ناپریشیده (۷-۱) است ، ویژه کتها و ویژه مقدارهای آن دانسته فرض می‌شوند . معادله مرتبه  $n$  ام شامل تصحیحات بالاتر از مرتبه  $n$  ام نیست ، اما برای به دست آوردن این تصحیحات ، تمام جملات مرتبه‌های پایین‌تر باید قبلاً محاسبه شده باشند .  
با بررسی نظریه مرتبه اول شروع می‌کنیم و بسط\*

$$|\varepsilon_i^{(1)}\rangle = \sum_{j=1} a_{ij}^{(1)} |\varepsilon_j^0\rangle \quad (i = 1, \dots, \infty) \quad (۹-۷)$$

را انجام می‌دهیم . این بسط مجاز است زیرا  $|\varepsilon_j^0\rangle$  ها یک مجموعه کامل تشکیل می‌دهند که هر کت دلخواهی را می‌توان برحسب آنها بسط داد . وقتی تمام  $a_{ij}^{(1)}$  ها معلوم شدند ، تصحیح مرتبه اول ویژه کت  $i$  ام کامل می‌شود . با بردن (۷-۹) در (۷-۷) خواهیم داشت

$$\mathcal{H}_0 \sum_j a_{ij}^{(1)} |\varepsilon_j^0\rangle + \hat{V} |\varepsilon_i^0\rangle = \varepsilon_i^0 \sum_j a_{ij}^{(1)} |\varepsilon_j^0\rangle + \varepsilon_i^{(1)} |\varepsilon_i^0\rangle .$$

یا

$$\sum_j (\varepsilon_j^0 - \varepsilon_i^0) a_{ij}^{(1)} |\varepsilon_j^0\rangle = (\varepsilon_i^{(1)} - \hat{V}) |\varepsilon_i^0\rangle \quad (۱۰-۷)$$

با ضرب کردن (۷-۱۰) در  $\langle \varepsilon_k^0 |$  و استفاده از شرط تعامد  $\langle \varepsilon_k^0 | \varepsilon_j^0 \rangle = \delta_{kj}$  ، خواهیم داشت

$$\sum_{j=1} (\varepsilon_j^0 - \varepsilon_i^0) a_{ij}^{(1)} \delta_{kj} = \langle \varepsilon_k^0 | (\varepsilon_i^{(1)} - \hat{V}) |\varepsilon_i^0\rangle$$

یا

$$(\varepsilon_k^0 - \varepsilon_i^0) a_{ik}^{(1)} = \varepsilon_i^{(1)} \delta_{ki} - \langle \varepsilon_k^0 | \hat{V} |\varepsilon_i^0\rangle \quad (۱۱-۷)$$

برای به دست آوردن تصحیح مرتبه اول ویژه مقدار ، قرار می‌دهیم  $k = i$  و نتیجه می‌گیریم

$$\varepsilon_i^{(1)} = \langle \varepsilon_i^0 | \hat{V} |\varepsilon_i^0\rangle = V_{ii} = \langle V \rangle_i \quad (۱۲-۷)$$

---

\* جمع‌بندی روی حالت‌های پیوسته  $r$  به انتگرال تبدیل می‌شود .

با استفاده از (۷-۴) ویژه مقدار انرژی (تا مرتبه اول) می‌شود

$$\varepsilon_i = \varepsilon_i^0 + \lambda V_{ii} \quad (7-13)$$

برای پیدا کردن ضرایب  $a_{ik}$ ، در (۷-۱۱) قرار می‌دهیم  $i \neq k$  و نتیجه می‌گیریم

$$(\varepsilon_k^0 - \varepsilon_i^0) a_{ik}^{(1)} = - \langle \varepsilon_k^0 | \hat{V} | \varepsilon_i^0 \rangle \quad (i \neq k)$$

یا

$$a_{ik}^{(1)} = \frac{V_{ki}}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_k^0} \quad (7-14)$$

چون حالت  $i$  ام ناتبهگن فرض شده است، داریم  $\varepsilon_i^0 \neq \varepsilon_k^0$  بنابراین  $a_{ik}^{(1)}$  متناهی است. از (۷-۹) و (۷-۳) ویژه کت پیرشیده (تا مرتبه اول) می‌شود

$$\begin{aligned} |\varepsilon_i\rangle &= |\varepsilon_i^0\rangle + \lambda a_{ii}^{(1)} |\varepsilon_i^0\rangle + \lambda \sum_{j \neq i} \frac{V_{ji}}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_j^0} |\varepsilon_j^0\rangle \\ &= (1 + \lambda a_{ii}^{(1)}) |\varepsilon_i^0\rangle + \lambda \sum_{j \neq i} \frac{V_{ji}}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_j^0} |\varepsilon_j^0\rangle \end{aligned} \quad (7-15)$$

فقط کافی است که ضریب  $a_{ii}^{(1)}$  تعیین شود. شرط خواهیم کرد که (۷-۱۵) تا مرتبه اول نسبت به  $\lambda$  بهنجار شده باشد. با قراردادن  $\langle \varepsilon_i | \varepsilon_i \rangle = 1$  و حذف جملات از مرتبه  $\lambda^2$ ، خواهیم داشت

$$|1 + \lambda a_{ii}^{(1)}|^2 \simeq 1 + 2\lambda \operatorname{Re} a_{ii}^{(1)} = 1 \quad \text{یا} \quad \operatorname{Re} a_{ii}^{(1)} = 0$$

بنابراین  $a_{ii}^{(1)}$  در بدترین وضعیت خود موهومی است. می‌توان قرارداد  $a_{ii}^{(1)} = 0$  بدون اینکه روی مقادیر قابل انتظار عملگرها تا مرتبه اول  $\lambda$  تأثیری داشته باشد. پس از خلاصه کردن نتایج مرتبه اول، خواهیم داشت

$$\varepsilon_i = \varepsilon_i^0 + \lambda V_{ii} \quad (7-16)$$

و

$$|\varepsilon_i\rangle = |\varepsilon_i^0\rangle + \lambda \sum_{j \neq i} \frac{V_{ji}}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_j^0} |\varepsilon_j^0\rangle \quad (7-17)$$

(که چنان‌که باید تا مرتبه اول  $\lambda$  بهنجار شده هستند). مشابه مکانیک موجی آن خواهد بود

$$\varepsilon_i = \varepsilon_i^0 + \lambda V_{ii} \quad (۷-۱۸)$$

$$\psi_i = \psi_i^0 + \lambda \sum_{j \neq i} \frac{V_{ji}}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_j^0} \psi_j^0 \quad (۷-۱۹)$$

که در آن

$$V_{ji} = \int \psi_j^{0*} \mathcal{V} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla, \mathbf{r} \right) \psi_i^0 d\mathbf{r} \quad (۷-۲۰)$$

دقت در (۷-۱۷) روشن می‌کند که چرا همگرایی سریع به شرط

$$\frac{|\lambda| |V_{ij}|}{|\varepsilon_j^0 - \varepsilon_i^0|} \ll 1$$

بستگی دارد.

### ۳- یک کاربرد از نظریه مرتبه اول

نظریه پیرشیدگی مرتبه اول را برای پیدا کردن ویژه تابعها و ویژه مقدارهای هامیلتونی تعدیل شده نوسانگر یک بعدی (شکل ۷-۱) به کار خواهیم برد

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \lambda x^4 \quad \left( \mathcal{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right)$$

این درست همان مسئله نوسانگر هماهنگ معمولی است که یک پیرشیدگی ناهماهنگ کوچک به آن اضافه شده است. با استفاده از

$$\psi_n^0(x) = \left[ \left( \frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/2} \left( \frac{1}{2^n n!} \right) \right]^{1/2} e^{-\alpha x^2/2} H_n(\sqrt{\alpha} x) \quad \left( \alpha = \frac{m\omega}{\hbar} \right)$$

و  $\varepsilon_n^0 = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$  به عنوان ویژه تابعها و ویژه مقدارهای ناپیرشیده، معادلات (۷-۱۸) و (۷-۱۹) کمیات پیرشیده متناظر را به صورت

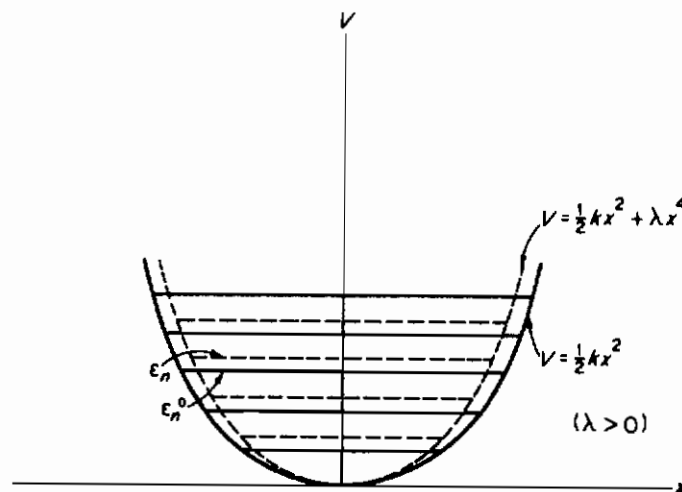
$$\psi_n = \psi_n^0 + \lambda \sum_{m \neq n} \left( \frac{V_{mn}}{\epsilon_n^0 - \epsilon_m^0} \right) \psi_m^0 \quad (۲۱-۷)$$

و  $\epsilon_n = \epsilon_n^0 + \lambda V_{nn}$  به دست می دهند. انرژی می تواند مستقیماً به صورت

$$\epsilon_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega + \lambda \left( \frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/2} \frac{1}{2^n n!} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha x^2} H_n^2(\sqrt{\alpha} x) x^4$$

یا

$$\epsilon_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega + \frac{3\lambda \hbar^2}{4m^2 \omega^2} (2n^2 + 2n + 1) \quad (۲۲-۷)$$



شکل (۷-۱) جابه جاییهای انرژی برای پتانسیل نوسانگر پریشیده. منحنیهای پربیانگر کمیات ناپریشیده هستند.

محاسبه شود. عناصر ماتریس موجود در (۲۱-۷) را محاسبه نخواهیم کرد لیکن خاطرنشان می کنیم که چنانچه داشته باشیم  $|m - n| > 4$ ، این عناصر صفر می شوند. این نتیجه از این واقعیت ناشی می شود که  $x^4 H_n$  می تواند به صورت یک ترکیب خطی از چند جمله ایهای هرمیت واقع در گستره  $H_{n-4}$  تا  $H_{n+4}$  بیان شود. با استفاده از

$$x^4 \psi_n^0 = \sum_{l=n-4}^{n+4} a_l \psi_l^0$$

و شرط تعامد  $\psi_n^0$  ، برای  $|m - n| > 4$  خواهیم داشت

$$V_{mn} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^{0*}(x^4 \psi_n^0) dx = 0$$

بنابراین لازم است که برای تصحیحات مرتبه اول حالت  $\psi_n$  ، حداکثر هشت عنصر ماتریس موجود در (۷-۲۱) را محاسبه کنیم .

از نظر تجربی ، مشاهده ترازهای انرژی یک سیستم فیزیکی آسان تر از مشاهده سایر مشخصات آن است . اگر پریشیدگی کوچک باشد ، ویژه تابعهای مرتبه صفر انرژی معمولاً برای مقایسه با آزمایش مناسب اند . از طرف دیگر ، ویژه مقدارهای مرتبه اول انرژی معمولاً می توانند مستقیماً مشاهده شوند . همان طور که در زیر نشان خواهیم داد ، ویژه تابعهایی که تا مرتبه  $(p - 1)$  تصحیح شده اند ، برای محاسبه مرتبه  $p$  ام ویژه مقدارها مناسب اند . بنابراین ، وقتی که از نظریه مرتبه اول صحبت می کنیم منظور ما انرژیها است و نه ویژه تابعها ، چرا که در این صورت ویژه تابعها به وسیله مولفه های مرتبه صفر (ناپریشیده) خود بیان می شوند .

#### ۴ - نظریه مرتبه دوم

چند دلیل برای ادامه تا تصحیحات مرتبه دوم ، حتی برای  $\lambda$  های کوچک ، وجود دارد . اولاً ، این تصحیحات می توانند از طریق تجربی (به عنوان مثال از طریق طیف نمایی) قابل مشاهده باشند ، و بنابراین برای تأیید یک نظریه بخصوص مفید هستند . ولی مهمترین دلیل ، اگر تصحیحات مرتبه اول صفر باشند این تصحیحات می توانند به عنوان تصحیحات مرتبه اول تلقی شوند . به عنوان مثال ، فرض کنیم پریشیدگی مسئله نوسانگر بالا (به جای  $\lambda x^4$  ) ،  $\lambda x^3$  باشد . در این صورت تصحیحات مرتبه اول ویژه مقدارها خواهند بود

$$V_{nn} = \int dx \psi_n^{0*} x^3 \psi_n^0 = 0$$

که صفر بودن آن از فرد بودن تابع زیر انتگرال ناشی می شود . در اینجا است که تصحیحات مرتبه دوم اهمیت پیدا می کنند .

جملات مرتبه دوم با حل (۷-۸) با استفاده از نتایج مرتبه اول به دست آمده ایجاد می شوند . طرز عمل سر راست است و کاملاً مشابه روشی است که در نظریه مرتبه اول به کار رفته است . نتایج به قرار زیر اند

$$\varepsilon_i = \varepsilon_i^0 + \lambda V_{ii} + \lambda^2 \sum_{j \neq i} \frac{V_{ji} V_{ij}}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_j^0} \quad (۲۳-۷)$$

و

$$\begin{aligned} |\varepsilon_i\rangle = & \left[ 1 - \frac{1}{2} \lambda^2 \sum_{j \neq i} \frac{V_{ji} V_{ij}}{(\varepsilon_i^0 - \varepsilon_j^0)^2} |\varepsilon_i^0\rangle \right] + \lambda \left[ \sum_{j \neq i} \frac{V_{ji}}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_j^0} |\varepsilon_j^0\rangle \right] \\ & + \lambda^2 \left[ \sum_{j \neq i} \frac{1}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_j^0} \left\{ \sum_{k \neq i} \frac{V_{ki} V_{jk}}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_k^0} - \frac{V_{ii} V_{ji}}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_j^0} \right\} |\varepsilon_j^0\rangle \right] \quad (۲۴-۷) \end{aligned}$$

(که تا درجه دوم  $\lambda$  بهنجار شده‌اند).

مطالعه  $\varepsilon_i^{(1)}$  و  $\varepsilon_i^{(2)}$  در (۲۳-۷) نشان می‌دهد که

$$\varepsilon_i^{(1)} = V_{ii} = \langle \varepsilon_i^0 | \hat{V} | \varepsilon_i^0 \rangle$$

و

$$\varepsilon_i^{(2)} = \sum_{j \neq i} \frac{V_{ji} V_{ij}}{\varepsilon_i^0 - \varepsilon_j^0} = \langle \varepsilon_i^0 | \hat{V} | \varepsilon_i^{(1)} \rangle$$

برای تعمیم، می‌بینیم که تصحیح مرتبه  $(p-1)$  ام ویژه بردار مستقیماً ما را به تصحیح مرتبه  $p$  ام ویژه مقدار می‌رساند، یعنی

$$\varepsilon_i^{(p)} = \langle \varepsilon_i^0 | \hat{V} | \varepsilon_i^{(p-1)} \rangle \quad (۲۵-۷)$$

این قاعده کفایت ویژه تابع مرتبه  $(p-1)$  ام در محاسبات انرژی مرتبه  $p$  ام را مورد تاکید قرار می‌دهد.

نظریه مرتبه دوم می‌تواند برای محاسبه تقریبی ترازهای انرژی یک نوسانگر با یک پیریشیدگی ناهمبندگی،  $\lambda^3$ ، به کار رود. با قراردادن

$$\mathcal{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2, \quad \varepsilon_n^0 = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

و

$$\psi_n^0 = \left[ \left( \frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/2} \left( \frac{1}{2^n n!} \right) \right]^{1/2} e^{-\frac{1}{2} \alpha x^2} H_n(\sqrt{\alpha} x)$$

(۷-۲۳) خواهد شد

$$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega + \lambda^2 \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{\hbar \omega (n - m)}$$

که در آن

$$V_{mn} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^{*0} x^3 \psi_n^0 dx.$$

محاسبه انتگرالها به عنوان یک تمرین واگذار می شود (مسئله ۷-۳).

## ۵- پیرشیدگی یک تراز تبهگن

مشاهده می کنیم که اگر تراز  $i$  ام تبهگن باشد (مثلاً،  $\varepsilon_i^0 = \varepsilon_k^0$ )، در این صورت هریک از جمله های (۷-۲۴) که شامل  $V_{ki}/(\varepsilon_i^0 - \varepsilon_k^0)$  باشد واگرا می شود. البته اگر  $V_{ki}$  نیز صفر می بود این اشکال می توانست برطرف گردد. اما، این طرز برخورد صرفاً "نمایانگر، به اصطلاح یک مداوا است نه معالجه".

مشکلاتی که با تراز تبهگن همراه اند از عدم یکتایی ویژه حالتها ناشی می شوند. فرض کنیم  $\mathcal{H}_0$  تبهگن باشد ولی هامیلتونی پیرشیده  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \lambda V$  ناتبهگن باشد، یعنی، پیرشیدگی تبهگنی را از بین می برد. به عنوان مثال،  $\mathcal{H}_0$  ممکن است یک هامیلتونی وابسته به نیروی مرکزی با تبهگنی فضائی (جهتی) باشد، و  $\lambda V$  یک میدان مغناطیسی یکنواخت باشد که این تبهگنی را از بین می برد. در این صورت ویژه حالت های ناپیرشیده یکتا نیستند و هر مجموعه از آنها متفاوت از هر مجموعه دیگر است. اما، ویژه حالت های  $\mathcal{H}$ ، یعنی  $|\varepsilon_i\rangle$ ، باید یکتا باشند و تنها با تقریب می توانند (برای مقادیر کوچک  $\lambda$ ) برابر با یک مجموعه ناپیرشیده خاص  $|\widetilde{\varepsilon}_i^0\rangle$  باشند. این مجموعه را مجموعه ناپیرشیده "انتخابی" می نامیم. بدیهی است که اگر بخواهیم یک محاسبه مرتبه اول انجام دهیم، باید این مجموعه انتخابی را به عنوان یک تقریب مرتبه صفر به کار ببریم. به طور معادل، باید یک تناظر یک به یک بین حالت های پیرشیده و مجموعه ناپیرشیده "انتخابی" برقرار کنیم به طوری که

$$|\varepsilon_i\rangle \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} |\widetilde{\varepsilon}_i^0\rangle \quad (۷-۲۶)$$

بنابراین وظیفه نخست ما عبارت است از پیدا کردن ویژه حالت های درست مرتبه صفر



برای انجام تناظر فوق . وقتی این حالتها پیدا شدند ، همان طور که خواهیم دید ، هیچ جمله واگرائی در (۲۴-۷) ظاهر نخواهد شد . به علاوه ، جابه جاییهای مرتبه اول انرژی ، به سادگی ، به وسیله دو جمله اول (۲۳-۷) داده خواهند شد که عبارتند از

$$\varepsilon_i = \varepsilon_i^0 + \lambda \langle \widetilde{\varepsilon_i^0} | \mathcal{P} | \widetilde{\varepsilon_i^0} \rangle \quad (27-7)$$

پیشیدگی یک تراز  $s$  بار تبهن را در نظر بگیریم و قرار دهیم

$$\varepsilon_i^0 = \varepsilon^0 \quad (i = 1, \dots, s)$$

کتهای  $|\varepsilon_i^0\rangle$  ،  $i = 1, \dots, s$  ، ویژه حالت های یکتای انرژی نبوده و لزوماً متعامد نیستند ، گرچه فرض می کنیم که آنها را متعامد ساخته ایم\* . مجموعه انتخابی که دنبال آن هستیم همیشه می تواند به کمک

$$|\widetilde{\varepsilon_i^0}\rangle = \sum_{j=1}^s b_{ij} |\varepsilon_j^0\rangle \quad (i = 1, \dots, s) \quad (28-7)$$

ساخته شود . چون مجموعه انتخابی (و هم چنین مجموعه اولیه) باید راست هنجار باشند ، خواهیم داشت

$$\begin{aligned} \langle \widetilde{\varepsilon_i^0} | \widetilde{\varepsilon_i^0} \rangle &= 1 \\ \sum_{j,k=1}^s b_{ij}^* b_{ik} \langle \varepsilon_j^0 | \varepsilon_k^0 \rangle &= \sum_{j,k=1}^s b_{ij}^* b_{ik} \delta_{jk} \\ &= \sum_{j=1}^s |b_{ij}|^2 = 1 \end{aligned} \quad (29-7)$$

ضرایب  $b_{ij}$  مجموعه انتخابی "جدید" را تعیین می کنند . با به کار بردن  $|\widetilde{\varepsilon_i^0}\rangle$  در معادله مرتبه اول (۷-۷) ، خواهیم داشت

$$\mathcal{H}_0 |\varepsilon_i^{(1)}\rangle + \mathcal{P} |\widetilde{\varepsilon_i^0}\rangle = \varepsilon_i^0 |\varepsilon_i^{(1)}\rangle + \varepsilon_i^{(1)} |\widetilde{\varepsilon_i^0}\rangle \quad (30-7)$$

\* یادآوری کنیم که همیشه می توان یک چنین مجموعه راست هنجاری ساخت .

$|\varepsilon_i^{(1)}\rangle$  را در پایه "قدیمی" به صورت

$$|\varepsilon_i^{(1)}\rangle = \sum_{j=1}^{\infty} a_{ij}^{(1)} |\varepsilon_j^0\rangle \quad (۳۱-۷)$$

بسط می‌دهیم. با بردن (۳۱-۷) و (۲۸-۷) در (۳۰-۷)، نتیجه می‌گیریم

$$\sum_{j=1}^{\infty} a_{ij}^{(1)} \varepsilon_j^0 |\varepsilon_j^0\rangle + \sum_{j=1}^s \hat{V} b_{ij} |\varepsilon_j^0\rangle = \varepsilon_i^0 \sum_{j=1}^{\infty} a_{ij}^{(1)} |\varepsilon_j^0\rangle + \varepsilon_i^{(1)} \sum_{j=1}^s b_{ij} |\varepsilon_j^0\rangle \quad (۳۲-۷)$$

چون برای  $i \leq s$  داریم  $\varepsilon_j^0 = \varepsilon_i^0 = \varepsilon^0$ ، جمله اول سریهای بینهایت در دو طرف صفر می‌شوند به‌طوری که (۳۲-۷) خواهد شد

$$\sum_{j>s}^{\infty} a_{ij}^{(1)} \varepsilon_j^0 |\varepsilon_j^0\rangle + \sum_{j=1}^s \hat{V} b_{ij} |\varepsilon_j^0\rangle = \varepsilon^0 \sum_{j>s}^{\infty} a_{ij}^{(1)} |\varepsilon_j^0\rangle + \varepsilon_i^{(1)} \sum_{j=1}^s b_{ij} |\varepsilon_j^0\rangle \quad (۳۳-۷)$$

سپس، آنرا در  $\langle \varepsilon_k^0 |$  که در آن  $k = 1, \dots, s$  است، ضرب می‌کنیم و با استفاده از راست هنجاری نتیجه می‌گیریم

$$\sum_{j=1}^s b_{ij} \langle \varepsilon_k^0 | \hat{V} | \varepsilon_j^0 \rangle = \varepsilon_i^{(1)} b_{ik}$$

یا

$$\sum_{j=1}^s V_{kj} b_{ij} = \varepsilon_i^{(1)} b_{ik} \quad (۳۴-۷)$$

این مجموعه معادلات همگن برای ضرایب  $b_{ij}$  فقط برای بعضی از مقادیر  $\varepsilon_i^{(1)}$  دارای جواب غیربدیهی است. درواقع، (۳۴-۷) می‌تواند به‌صورت یک مسئله ویژه مقداری به‌شکل ماتریسی

$$\mathbf{V} \mathbf{b}_i = \varepsilon_i^{(1)} \mathbf{b}_i$$

یا

$$\begin{pmatrix} V_{11} & \cdots & V_{1s} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ V_{s1} & \cdots & V_{ss} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{i1} \\ \vdots \\ b_{is} \end{pmatrix} = \varepsilon_i^{(1)} \begin{pmatrix} b_{i1} \\ \vdots \\ b_{is} \end{pmatrix} \quad (i = 1, \dots, s) \quad (۳۵-۷)$$

نوشته شود که در آن شرط بهنجارش (۲۹-۷) خواهد بود

$$\sum_{j=1}^s |b_{ij}|^2 = 1$$

بدین ترتیب به قاعده زیر می‌رسیم :

ضرایبی که ویژه کت انتخابی  $i$  ام  $|\widetilde{\varepsilon}_i^0\rangle$  را تعیین می‌کنند به وسیله مولفه‌های ویژه-بردار (بهنجار شده)  $i$  ام  $b_i$  از ماتریس پریشیدگی  $V$  داده می‌شوند. به علاوه، جابه‌جایی مرتبه اول در انرژی حالت عبارت است از ویژه مقدار متناظر  $\varepsilon_i^{(1)}$  از ماتریس  $V$ . قاعده فوق طرز عمل زیر را برای ساختن ویژه کتهای انتخابی یک تراز  $s$  مرتبه تبهگن داده شده پیشنهاد می‌کند :

(الف) برای هر تراز تبهگن از ویژه کتهای داده شده  $|\varepsilon_i^0\rangle$  برای ساختن ماتریس  $s \times s$  استفاده کنید، یعنی

$$V = \begin{pmatrix} \langle \varepsilon_1^0 | \hat{V} | \varepsilon_1^0 \rangle & \cdots & \langle \varepsilon_1^0 | \hat{V} | \varepsilon_s^0 \rangle \\ \langle \varepsilon_s^0 | \hat{V} | \varepsilon_1^0 \rangle & \cdots & \langle \varepsilon_s^0 | \hat{V} | \varepsilon_s^0 \rangle \end{pmatrix} \quad (۷-۳۶)$$

(ب)  $s$  ویژه مقدار  $\varepsilon_i^{(1)}$  و ویژه بردارهای بهنجار شده متناظر (ماتریس‌های ستونی)

$$b_i = \begin{pmatrix} b_{i1} \\ \vdots \\ b_{ij} \\ \vdots \\ b_{is} \end{pmatrix} \quad (i = 1, \dots, s) \quad (۷-۳۷)$$

را پیدا کنید. از مولفه‌ها برای ساختن مجموعه انتخابی جدید به صورت

$$|\widetilde{\varepsilon}_i^0\rangle = \sum_{j=1}^s b_{ij} |\varepsilon_j^0\rangle \quad (۷-۳۸)$$

استفاده کنید.

(ج) ویژه مقدارهای متناظر  $V$ ، یعنی  $\varepsilon_i^{(1)}$ ، تصحیحات مرتبه اول انرژی  $|\varepsilon_i\rangle$  را به دست می‌دهند، یعنی،

$$\varepsilon_i = \varepsilon^0 + \lambda \varepsilon_i^{(1)} \quad (i = 1, \dots, s) \quad (۷-۳۹)$$

عموماً، این ویژه مقدارها متمایزاند ( $\varepsilon_i^{(1)} \neq \varepsilon_k^{(1)}, i \neq k$ ) به طوری که تبهگنی معمولاً در مرتبه اول از بین می‌رود.

اگر از آغاز مجموعه انتخابی را، به جای مجموعه داده شده، به عنوان تقریب مرتبه صفر به کار برده بودیم، می‌توانستیم با نظریه ناتبهگن مرتبه اول، که در بخش پیشین شرح داده شد، کار را ادامه دهیم. در این مورد، عناصر ماتریس در شرایط

$$V_{ij} = \langle \widetilde{\varepsilon}_i^0 | \hat{V} | \widetilde{\varepsilon}_j^0 \rangle = V_{ii} \delta_{ij} \quad (۷-۴۰)$$

صدق می‌کردند و جملات واگرایی ( $j \neq i$ ) در (۷-۲۴) وجود نمی‌داشتند. به علاوه، چون  $\varepsilon_i^{(1)}$  معرف ویژه مقدارهای  $\hat{V}$  هستند، باید برابر با عناصر قطری آن باشند، یعنی،

$$\varepsilon_i^{(1)} = \langle \widetilde{\varepsilon}_i^0 | \hat{V} | \widetilde{\varepsilon}_i^0 \rangle$$

بنابراین داریم

$$\varepsilon_i = \varepsilon_i^0 + \lambda \langle \widetilde{\varepsilon}_i^0 | \hat{V} | \widetilde{\varepsilon}_i^0 \rangle$$

که درست همان نتیجه نظریه پیرشیدگی ناتبهگن است.

#### ۶- کاربرد نظریه پیرشیدگی در یک تراز تبهگن - اثر استارک در هیدرژن\*

اثر یک میدان الکتریکی یکنواخت  $E$  روی ترازهای هیدرژن اثر استارک خوانده می‌شود. اگر این میدان به اندازه کافی قوی باشد، می‌توان از برهم‌کنش اسپین - مدار، همان‌طور که در اثر پاشن - باک‌کردیم، کاملاً "صرف نظر کرد". وقتی یک الکترون وارد یک میدان الکتریکی یکنواخت شود، انرژی پتانسیلی برابر با  $\int eE \cdot dr = eE \cdot r$  به دست می‌آورد. در هیدرژن، این عبارت می‌تواند به صورت  $-p \cdot E$ ، که در آن  $p = -er$  گشتاور دو قطبی سیستم پروتون الکترون است، نیز نوشته شود. هامیلتونی مربوطه عبارت است از

$$\mathcal{H}_{\text{Stark}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} + eE \cdot r \quad (۷-۴۱)$$

\* اثر استارک در واقع مثال مناسبی برای مساله پیرشیدگی حالت مقید نیست. پتانسیل در راستای میدان به صورت  $V = -eEz$  تغییر می‌کند. وقتی  $r \rightarrow \infty$ ، پتانسیل به حد کافی منفی می‌شود به طوری که قادر به حفظ حالت‌های مقید نیست. بنابراین احتمال یافتن ذره در بینهایت صفر نیست و میدان توانائی "یونش" سیستم را که در آغاز مقید بوده است دارد. حالت‌ها شبه‌گسسته‌اند و بعضی از خواص وابسته به یک طیف پیوسته را دارند. با وجود این، مادامی که میدان الکتریکی کوچک باشد احتمال یونش کوچک است و مساله را می‌توان با استفاده از روشهای پیرشیدگی حالت مقید حل کرد.

با انتخاب جهت  $E$  در امتداد محور  $z$ ، پریشیدگی به شکل  $\lambda V$ ، که در آن  $\lambda = +eE$  و  $V = z = r \cos \theta$  است، در می آید. در نمایش  $|nlm\rangle^*$ ، حالت پایه  $|100\rangle$  ناتبهگن است. تصحیح در انرژی برای این تراز، از (۷-۱۶)، عبارت است از

$$\lambda \varepsilon^{(1)} = +eE \langle 100 | z | 100 \rangle$$

عنصر ماتریس عبارت است از

$$\langle 100 | z | 100 \rangle = \int \psi_{100}^* z \psi_{100} dr$$

اما، چون  $|\psi_{100}|^2$  تابع زوج و  $z$  تابع فردی است، تابع زیر انتگرال تابع فردی است. بنابراین، این، انتگرال صفر می شود و جابه جایی مرتبه اول استارک در حالت پایه هیدرژن وجود ندارد.

اولین حالت برانگیخته چهاربار تهیگن است، یعنی تمام حالات  $|200\rangle$ ،  $|210\rangle$  و  $|21 \pm 1\rangle$  دارای انرژی  $\varepsilon_2 = \varepsilon_1/2^2$  هستند. در اصل، باید یک ماتریس  $4 \times 4$  برای  $V$  بسازیم. خوشبختانه این مسئله می تواند به مسئله ای که شامل یک ماتریس  $2 \times 2$  است تبدیل شود. برای انجام این کار نخست مشاهده می کنیم که عناصر غیر قطری ماتریس  $4 \times 4$  وابسته به حالت های  $|21 + 1\rangle$  و  $|21 - 1\rangle$  صفراند. چون پریشیدگی مستقل از زاویه سمتی  $\phi$  است عناصر ماتریس مورد نظر شامل حاصل ضرب های داخلی قسمت های وابسته به  $\phi$  ی حالت های نیروی مرکزی است. اما چون این قسمت ها متعامداند نتیجه می گیریم

$$\langle 211 | z | 21 - 1 \rangle = \langle 211 | z | 210 \rangle = \langle 211 | z | 200 \rangle = 0$$

$$\langle 21 - 1 | z | 211 \rangle = \langle 21 - 1 | z | 210 \rangle = \langle 21 - 1 | z | 200 \rangle = 0$$

بنابراین حالت های  $|21 \pm 1\rangle$  اکنون جزئی از مجموعه انتخابی هستند. جابه جایی های انرژی آنها به وسیله  $\langle 21 \pm 1 | z | 21 \pm 1 \rangle$  داده می شوند. لیکن نتیجه می شود که انتگرال های وابسته به این عناصر نیز صفر می شوند. این نکته می تواند به وسیله کاربرد استدلال پاریته در مورد توابع زیر انتگرال اثبات شود. در نتیجه جابه جایی مرتبه اول استارک وابسته به حالت های  $|21 \pm 1\rangle$  وجود ندارد.

حالت های انتخابی باقی مانده باید از  $|210\rangle$  و  $|200\rangle$  ساخته شوند. عناصر ماتریسی

برای این حالتها انتگرالهایی را وارد می‌کنند که با استفاده از توابع هیدروژنی در (۷۴-۵) به صورت

$$\langle 210|z|210\rangle = \langle 200|z|200\rangle = 0$$

و

$$\langle 210|z|200\rangle = \int \psi_{210}^* r \cos \theta \psi_{200} dr = \frac{-3\hbar^2}{me^2} = -3a$$

محاسبه می‌شوند. ماتریس تقلیل یافته خواهد شد

$$\begin{aligned} \mathbf{V} &= \begin{pmatrix} \langle 200|r \cos \theta|200\rangle & \langle 200|r \cos \theta|210\rangle \\ \langle 200|r \cos \theta|210\rangle & \langle 210|r \cos \theta|210\rangle \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & -3a \\ -3a & 0 \end{pmatrix} \quad (a = \hbar^2/me^2) \end{aligned}$$

ویژه مقدارهای رابطه ماتریسی

$$\begin{pmatrix} 0 & -3a \\ -3a & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{i1} \\ b_{i2} \end{pmatrix} = \epsilon_i^{(1)} \begin{pmatrix} b_{i1} \\ b_{i2} \end{pmatrix} \quad (i = 1, 2) \quad (۷-۴۲)$$

به وسیله جوابهای معادله (مفسر)

$$\begin{vmatrix} 0 - \epsilon_i^{(1)} & -3a \\ -3a & 0 - \epsilon_i^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

یا

$$\epsilon_i^{(1)} = \pm 3a \quad (۷-۴۳)$$

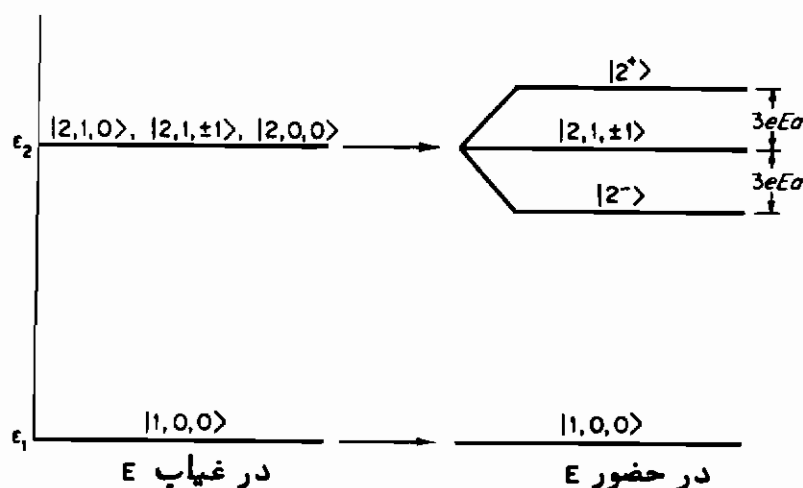
تعیین می‌شوند. با قراردادن  $\epsilon_+^{(1)} = 3a$  و  $\epsilon_-^{(1)} = -3a$ ، ویژه بردارهای بهنجار شده متناظر خواهند شد

$$\mathbf{b}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \text{و} \quad \mathbf{b}_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ +1 \end{pmatrix} \quad (۷-۴۴)$$

بنابراین حالتهای صحیح (انتخابی) مرتبه صفر برای تراز  $n = 2$  و جابه جاییهای انرژی آنها

عبارتند از (شکل ۷-۲)

$$\begin{aligned}
 & |21 \pm 1\rangle \quad (\text{بدون جابه‌جایی}) \\
 & |2^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|200\rangle - |210\rangle) [\text{جابه‌جایی} = \lambda \varepsilon_+^{(1)} = +eE(3a)] \\
 & |2^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|200\rangle + |210\rangle) [\text{جابه‌جایی} = \lambda \varepsilon_-^{(1)} = +eE(-3a)]
 \end{aligned} \quad (۷-۴۵)$$



شکل (۷-۲) جابه‌جایی مرتبه اول ستارک در هیدرژن

به‌طور خلاصه، اگر یک تراز ناپریشیده تهیگن باشد، ابتدا باید یک "ویژه پایه انتخابی" مناسب  $|\varepsilon_i^0\rangle$  پیدا کرد که ماتریس پریشیدگی نسبت به آن قطری باشد. این کتها با کتهای پریشیده دارای یک تناظر یک به یک هستند و به‌عنوان یک تقریب مرتبه صفر مناسب به‌کار می‌روند. در اغلب موارد، لازم است که مجموعه انتخابی را با حل معادله ماتریسی (۷-۳۵) پیدا کنیم.

اما، در بعضی موارد بهینش فیزیکی و تقارن ما را در پیدا کردن این مجموعه یاری می‌کند. این نکته را در مورد برهم‌کنش اسپین - مدار در هیدرژن نشان خواهیم داد.

## ۷ - اتم هیدرژن با برهم‌کنش اسپین - مدار

دیدیم که حتی در یک وضعیت منزوی، پتانسیلی که یک الکترون اتمی می‌بیند پتانسیل نیروی مرکزی خالص نیست. انحراف کوچک ناشی از آثار مغناطیسی، برهم‌کنش اسپین - مدار خوانده می‌شود. هامیلتونی مربوطه، از (۶-۳۴)، عبارت است از

$$\mathcal{H}_{s=0} = \mathcal{H}_0 + \frac{e^2 f(r)}{2m^2 c^2} \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} \quad (۷-۴۶)$$

که در آن

$$\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_{cf} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r) \quad \text{و} \quad f(r) = \frac{1}{e^2 r} \frac{dV}{dr}$$

این مسئله را با استفاده از روشهای پیریشیدگی مذکور در فوق بررسی خواهیم کرد. ویژه حالت‌های ناپیریشیده نیروی مرکزی نسبت به  $m_l$  و  $m_s$  تبه‌گن‌اند و دارای انرژی  $\epsilon_{nl}$  می‌باشند. دو مجموعه مخصوصاً "جالب ناپیریشیده که قبلاً" مشخص گردید عبارتند از  $|nlm_l m_s\rangle$  و  $|nljm_j\rangle$ . مناسب است که پیریشیدگی اسپین - مدار را به صورت

$$\lambda = \frac{e^2}{2m^2 c^2}, \quad \mathcal{V} = f(r) \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$$

تجزیه کنیم.

یک مجموعه از ویژه بردارهای ناپیریشیده می‌تواند به عنوان تقریب مرتبه صفر در مسئله پیریشیدگی به کار رود به شرط اینکه این مجموعه ماتریس  $\mathcal{V}$  را قطری کند. از این نظر مجموعه  $|nlm_l m_s\rangle$  در برهم کنش اسپین - مدار با شکست مواجه می‌شود زیرا

$$\langle nlm_l m_s | f(r) \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} | nlm_l m_s \rangle \neq C \delta_{m_l m_l'} \delta_{m_s m_s'}$$

می‌توانستیم از مجموعه  $|nlm_l m_s\rangle$  برای ساختن مجموعه مناسبی که ماتریس  $\mathcal{V}$  در آن قطری باشد استفاده کنیم. ولی این مجموعه را با استفاده از بعضی از بهینش‌های فیزیکی پیدا خواهیم کرد.

هامیلتونی (۷-۴۶)،  $\mathcal{H}_{s=0}$ ، با  $\hat{L}_x$  و  $\hat{S}_x$  جابه‌جاپذیر نیست. این عدم سازگاری از این واقعیت ناشی می‌شود که  $\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$  شامل  $\hat{L}_x$ ،  $\hat{L}_y$ ،  $\hat{S}_x$  و  $\hat{S}_y$  است. بنابراین تعجب‌آور نخواهد بود که ویژه حالت‌های  $\hat{L}_x$  و  $\hat{S}_x$ ، یعنی،  $|nlm_l m_s\rangle$ ، ویژه حالت‌های  $\mathcal{H}_{s=0}$  نباشند. از طرف دیگر،  $\mathcal{H}_{s=0}$  با  $\hat{J}^2$  و  $\hat{J}_z$  سازگار است. به عنوان مثال، با استفاده از اتحاد

$$\hat{J}^2 = \hat{L}^2 + 2\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} + \hat{S}^2$$

یا

$$\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} = \frac{1}{2}(\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2) \quad (۷-۴۷)$$



نتیجه می‌گیریم

$$[\hat{L} \cdot \hat{S}, J^2] = \frac{1}{2} \{ [J^2, J^2] - [\hat{L}^2, J^2] - [\hat{S}^2, J^2] \} = 0$$

یک محاسبه مشابه نشان می‌دهد که

$$[\hat{L} \cdot \hat{S}, J_z] = 0$$

چون  $\mathcal{H}_0$ ،  $J^2$  و  $J_z$  دو به دو جابه‌جاپذیراند این عملگرها حداقل یک ویژه پایه مشترک دارند. بخصوص، در حالی که ویژه حالت‌های نیروی مرکزی  $|nljm_j\rangle$  ممکن است دقیق نباشند، محتمل است که این حالت‌ها یک مجموعه انتخابی تشکیل دهند و بتوانند به عنوان تقریب مرتبه صفر ویژه پایه دقیق  $\mathcal{H}_0$  به کار روند.

اگر این استدلال فیزیکی متقاعدکننده نباشد، ما صرفاً "نیاز به تحقیق این نکته داریم که آیا ماتریس  $V$  در پایه  $|nljm_j\rangle$  قطری است یا نه. با نوشتن

$$V_{jj'm_jm_j'}^{nl} = \langle nlj'm_j' | f(r) \hat{L} \cdot \hat{S} | nljm_j \rangle$$

و استفاده از (۷-۴۷)، نتیجه می‌گیریم

$$\begin{aligned} V_{jj'm_jm_j'}^{nl} &= \langle nlj'm_j' | f(r) \frac{1}{2} (J^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2) | nljm_j \rangle \\ &= \frac{1}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \hbar^2 \langle nlj'm_j' | f(r) | nljm_j \rangle \\ &= \frac{1}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \hbar^2 \langle nl | f(r) | nl \rangle \delta_{jj'm_jm_j'} \quad (s = \frac{1}{2}) \end{aligned} \quad (48-7)$$

یعنی،  $V$  قطری است.

اکنون روشن است که مجموعه  $|nljm_j\rangle$  بیانگر تقریب مرتبه صفر درست ویژه حالت‌های دقیق هامیلتونی اسپین - مدار است. با قراردادن  $j = j'$  و  $m_j = m_j'$  در (۷-۴۸)، انرژی تصحیح شده تا مرتبه اول خواهد شد

$$\begin{aligned} \varepsilon_{nlj} &= \varepsilon_{nl} + \lambda V_{jjm_jm_j}^{nl} \\ &= \varepsilon_{nl} + \frac{e^2}{2m^2c^2} \left[ \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{2} \right] \hbar^2 \langle n, l | f(r) | n, l \rangle \end{aligned} \quad (49-7)$$

شکافتگی تراز در (۷-۴۹) به قاعده بازه  $l$  نده معروف است و به طور کلی به هر مسئله نیروی مرکزی اعمال می‌شود. به عنوان مثال، این قاعده می‌تواند در مورد الکترون ظرفیت هراتم

قلیائی، که در آن پتانسیل کولنی به وسیله پوشش الکترونهاى داخلی تصحیح شده است، اعمال شود.

در هیدروژن، عنصر ماتریسی  $\langle nl | f(r) | nl \rangle$  عبارت است از

$$\langle nl | \frac{1}{r^3} | nl \rangle = \int_0^\infty R_{nl}(r) \frac{1}{r^3} R_{nl}(r) r^2 dr$$

که در آن قرار داده‌ایم

$$f(r) = \frac{1}{e^2 r} \frac{dV}{dr} = \frac{1}{r^3}$$

$R_{nl}$  عبارت است از ویژه تابع شعاعی هیدروژنی. پس از انتگرال‌گیری نتیجه خواهد شد\*

$$\langle nl | \frac{1}{r^3} | nl \rangle = \frac{1}{a^3 n^3 (l+1)(l+\frac{1}{2})l} \quad \left( a = \frac{\hbar^2}{me^2} \right)$$

بنابراین قاعده لانده برای هیدروژن می‌شود

$$\begin{aligned} \varepsilon_{nlj} &= \varepsilon_n + \frac{\hbar^2}{m^2 c^2 a^2} \left[ \frac{1}{2} \frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{n(l+1)(l+\frac{1}{2})l} \right] \frac{e^2}{2n^2 a} \\ &= \varepsilon_n + \alpha^2 |\varepsilon_n| \left[ \frac{1}{2} \frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{n(l+1)(l+\frac{1}{2})l} \right] \quad (50-7) \end{aligned}$$

که در آن از علامتهای اختصاری زیر استفاده کرده‌ایم

$$|\varepsilon_n| = \frac{e^2}{2n^2 a} = \frac{|\varepsilon_1|}{n^2} \quad \text{و} \quad \alpha = \frac{\hbar}{mca} = \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137}$$

جمله داخل پرانتزها از مرتبه واحد است بنابراین تصحیح نسبى ناشی از برهم‌کنش اسپین - مدار عبارت است از

\* به کتاب زیر رجوع کنید

H.A. Bethe and E.E. Salpeter, " Quantum Mechanics of one and Two Electron Atomes", P. 17. Springer- Verlag, Berlin, 1957.

$$\frac{\varepsilon_{s-o}}{|\varepsilon_n|} = \alpha^2 \simeq \left(\frac{1}{137}\right)^2 \simeq 10^{-4}$$

به این دلیل، ثابت بدون بعد  $\alpha$  ثابت ساختار ریز نامیده می‌شود. توجه کنیم که چون اکنون انرژی به  $n$ ،  $l$  و  $j$  بستگی دارد تبهگنی تصادفی کم شده است. تبهگنی جهتی هنوز وجود دارد.

به‌طور تجربی نتیجه شده است که تصحیحات ساختار ریز برای اتم هیدرژن تنها از نظر کیفی با (۵-۷) مطابقت می‌کنند. این نکته از این واقعیت ناشی می‌شود که این تصحیحات انرژی با تصحیحات نسبیتی مرتبه اول، که در همه جا از آن صرف‌نظر کرده‌ایم، از یک مرتبه هستند. بنابراین، علاوه بر انرژی اسپین - مدار باید تصحیح مرتبه اول ناشی از تغییرات جرم با سرعت را نیز ملحوظ کنیم. جمله سومی نیز وجود دارد که باید ملحوظ گردد، این جمله کوانتومی - نسبیتی (جمله داروین) است و مشابه کلاسیکی ندارد. هرسه جمله (اسپین-مدار + تغییرات جرم + جمله داروین) به‌طور کامل<sup>\*</sup> طبیعی در حد غیرنسبیتی معادله نسبیتی دیراک (فصل ۱۱) برای الکترون ظاهر می‌شوند. ترکیب اثرهای آنها، به جای (۵-۷)، می‌دهد

$$\varepsilon_{nj} = \varepsilon_n + \alpha^2 \varepsilon_n \left[ \frac{1}{n} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right] \quad (j = l \pm \frac{1}{2}) \quad (51-7)$$

این فرمول ساختار ریز در فصل ۱۱ به دست خواهد آمد، فرمول فوق یک تبهگنی دوگانه<sup>\*</sup> (علاوه بر تبهگنی  $m_j$ ) نشان می‌دهد زیرا برای یک  $j$  ی معین عموماً<sup>\*</sup> دو مقدار برای  $l$  وجود دارد ( $l = j \mp \frac{1}{2}$ )

به‌طور خلاصه، می‌بینیم که هامیلتونی هیدرژنی کامل با ساختار ریز عبارت است از

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{cf} + (\text{جمله‌های ساختار ریز})$$

که در آن

$$\mathcal{H}_{cf} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$$

\* در واقع این تبهگنی به‌خاطر اثرات نسبتاً پیچیده الکترودینامیک کوانتومی (جابه‌جایی لمب) قدری شکافته می‌شود.

و جملات ساختار ریز برابراند با (اسپین - مدار + تغییرات جرم + جمله داروین). به علاوه ویژه حالت های انتخابی عبارتند از  $|nljm_j\rangle$  با انرژی های مرتبه اول که به وسیله (۷-۵) داده می شوند.

#### ۸- اثر غیرعادی زیمن در هیدروژن

وقتی یک اتم هیدروژن وارد یک میدان مغناطیسی یکنواخت (در امتداد محور  $z$ ) می شود هامیلتونی خواهد شد

$$\mathcal{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} + (\text{جمله های ساختار ریز}) + \frac{eB}{2mc} (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) \quad (۷-۵۲)$$

در عمل، تصحیحات مربوط به ساختار ریز و میدان خارجی همیشه در مقایسه با انرژی نیروی مرکزی الکتروستاتیکی کوچک اند. در اصل، ملزم هستیم که یک مجموعه ناپیشیده که هم انرژی ساختار ریز و هم انرژی مغناطیسی را قطری کند انتخاب نمائیم. اما در دو مورد مهم که مورد بررسی قرار خواهند گرفت یک روش ساده تر کافی است. اگر جمله آخر (۷-۵۲) بزرگتر از انرژی ساختار ریز باشد (میدان  $B$  قوی باشد)، می توانیم از انرژی اخیر بکلی صرف نظر کنیم. این همان اثر پاشن - باک است که قبلاً در فصل ۶ مورد بحث قرار گرفت. اما اگر  $B$  به قدر کافی ضعیف باشد، یک مجموعه انتخابی ای به کار خواهیم برد که فقط پیشیدگی های غالب را، که در این مورد ساختار ریز است، قطری کند. چون پیدا کردیم که این مجموعه باید  $|nljm_j\rangle$  باشد، تصحیحات انرژی مربوط به میدان خارجی  $B$  به طور ساده خواهند شد

$$\begin{aligned} \varepsilon_B &= \frac{eB}{2mc} \langle nljm_j | \hat{L}_z + 2\hat{S}_z | nljm_j \rangle \\ &= \frac{eB}{2mc} \langle nljm_j | \hat{J}_z + \hat{S}_z | nljm_j \rangle \\ &= \frac{eB}{2mc} \{ m_j \hbar + \langle nljm_j | \hat{S}_z | nljm_j \rangle \} \end{aligned} \quad (۷-۵۳)$$

عنصر ماتریس  $\langle S_z \rangle$  می تواند با کاربرد (۶-۲۴) برای بیان حالت  $|nljm_j\rangle$  بر حسب  $|nlm_1 m_s\rangle$  محاسبه شود. چون  $|nlm_1 m_s\rangle$  ویژه کتهای  $\hat{S}_z$  هستند محاسبه مذکور سراسر است. یک روش جالب تر این است که مدل برداری را به کار ببریم. در حالت  $|nljm_j\rangle$  بردار  $S$  حول بردار  $J$  حرکت تقدیمی انجام می دهد. بنابراین مقدار متوسط مؤلفه  $S$  در

امتداد عمود بر  $\mathbf{J}$  صفر می‌شود. تا آنجایی که به متوسطها مربوط می‌شود، می‌توان نوشت (شکل ۳-۷)

$$\langle \mathbf{S} \rangle = \langle \mathbf{S}_J \rangle = \langle (\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{J}}) \hat{\mathbf{J}} \rangle \quad (۵۴-۷)$$

که در آن  $\hat{\mathbf{J}} = \mathbf{J}/J$  برداریکه در امتداد  $\mathbf{J}$  است. با استفاده از اتحاد

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

یا

$$\mathbf{J} \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2}(J^2 + S^2 - \mathbf{L}^2)$$

(۵۴-۷) خواهد شد

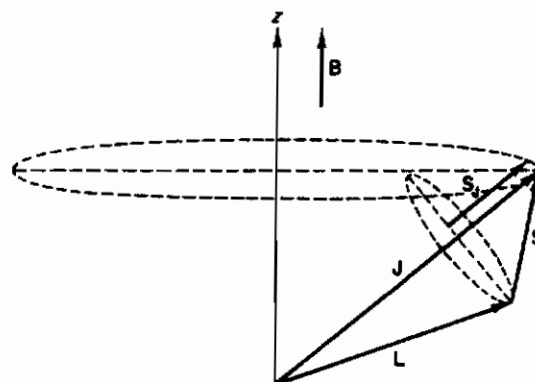
$$\langle \mathbf{S} \rangle = \left\langle \left( \frac{J^2 + S^2 - \mathbf{L}^2}{2J^2} \right) \mathbf{J} \right\rangle \quad (۵۵-۷)$$

برای مولفه  $z$  خواهیم داشت

$$\langle S_z \rangle = \left\langle \left( \frac{J^2 + S^2 - \mathbf{L}^2}{2J^2} \right) J_z \right\rangle$$

یا

$$\langle nlsjm_j | \hat{S}_z | nlsjm_j \rangle = \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} m_j \hbar \quad (۵۶-۷)$$



شکل (۳-۷) بردار  $\mathbf{S}_J = \frac{(\mathbf{S} \cdot \mathbf{J})\mathbf{J}}{J^2}$  توجه کنیم که برای میدانهای ضعیف  $\mathbf{B}$  "حرکت تقدیمی"  $\mathbf{S}$  و  $\mathbf{L}$  حول  $\mathbf{J}$  خیلی سریع تر از حرکت تقدیمی  $\mathbf{J}$  حول  $\mathbf{B}$  است.

با بازگشت به (۵۳-۷)، نتیجه می‌گیریم که شکافتگی مغناطیسی خواهد شد

$$\varepsilon_B = \frac{eB\hbar}{2mc} \left\{ 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \right\} m_j \quad (57-7)$$

مناسب است که ضریب  $g$  را به صورت

$$g_L = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}$$

$$= 1 \pm \frac{1}{2l+1} \quad , \quad s = \frac{1}{2}, \quad j = l \pm \frac{1}{2} \quad \text{برای} \quad (58-7)$$

تعریف کنیم که برحسب آن (۵۷-۷) می‌تواند به صورت زیر نوشته شود

$$\varepsilon_B = \mu_B B g_L m_j$$

پارامتر  $g_L$  عملاً عبارت است از ضریب زیرو مغناطیسی مؤثر وابسته به  $J$  و تابع نحوه پیوند بین  $L$  و  $S$  است. اگر  $l=0$  باشد داریم  $g_L = g_s = 2$ ، اگر  $s=0$  باشد داریم  $g_L = g_l = 1$ .

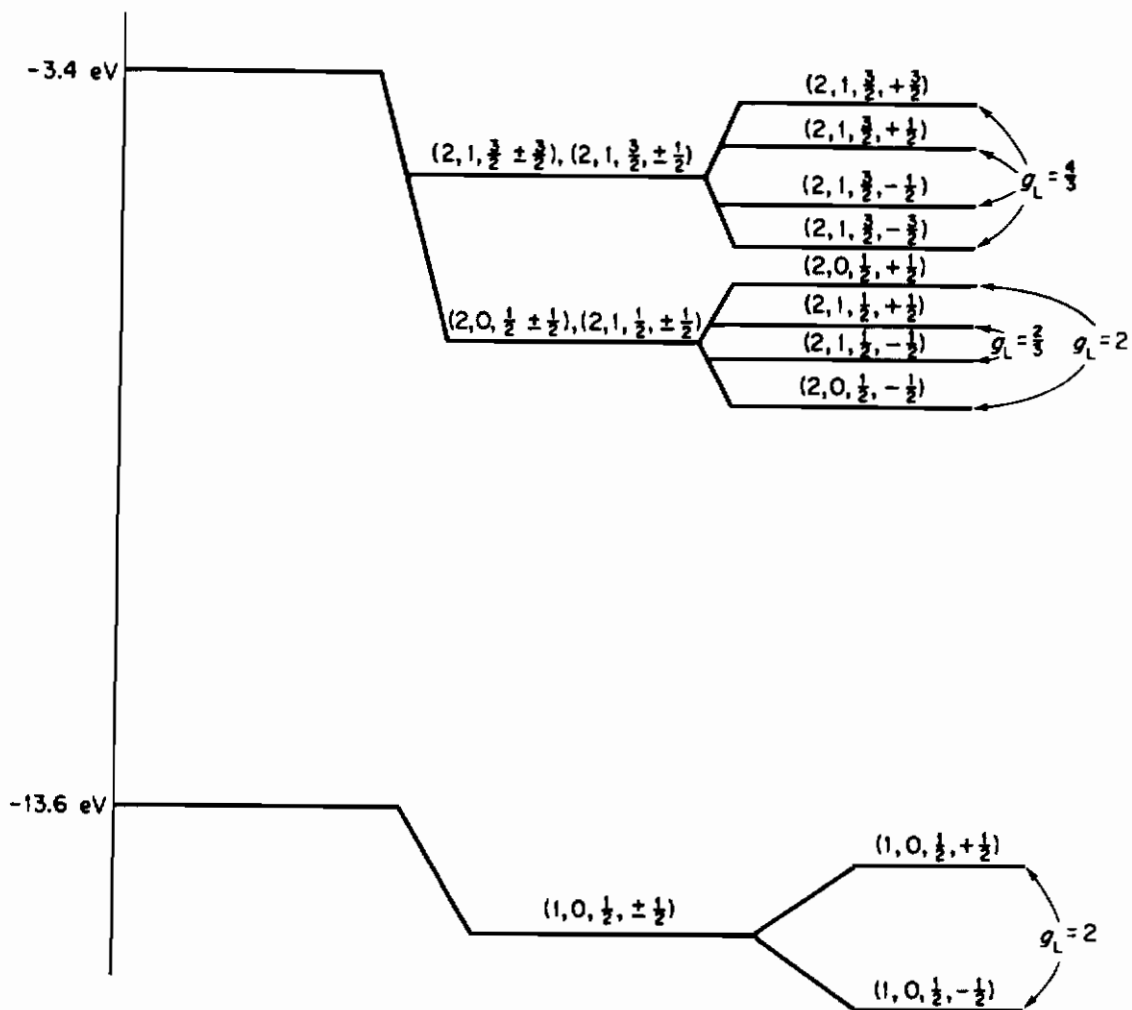
ترازهای انرژی برای الکترون هیدروژنی در حضور یک میدان ضعیف  $B$  خواهند شد (شکل (۷-۴))

$$\varepsilon_{njlm_j} = \varepsilon_n + \alpha^2 \varepsilon_n \left\{ \frac{1}{n} \left( \frac{1}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right\} + \mu_B B g_L m_j \quad (59-7)$$

معادله (۵۸-۷) نشان می‌دهد که برای هر  $j$  معین دو مقدار متفاوت برای  $g_L$  وجود دارد ( $l = j \mp \frac{1}{2}$ ). این امر منجر به شکافتگیهای نابرابری در زیر ترازهای مغناطیسی  $m_j$  می‌شود. به این دلیل، این اثر به نام اثر غیرعادی زمین نامیده می‌شود. وقتی که میدان از یک میدان ضعیف به یک میدان قوی افزایش می‌یابد، به تدریج طیف غیرعادی زمین تبدیل به طیف پاشن-باک، (۳۸-۶)، می‌شود. بررسی حالت واسطه که در آن انرژیهای مغناطیسی واسپین-مداری از یک مرتبه هستند خارج از سطح این کتاب است، بحث این حالت می‌تواند در هر مقاله پیشرفته‌ای در مورد طیف‌های اتمی یافت شود\*.

\* به عنوان مثال به کتاب زیر مراجعه کنید.

E.u. Condon and G.H. Shorteley, "The Theory of Atomic Spectra", P. 152. Cambridge Univ. Press, London and New York, 1935.



میدان ضعیف  $B$  + انرژی ساختار ریز + انرژی الکتروستاتیکی

شکل (۷-۴) اثر غیرعادی زمین (در هیدروژن). پرانتزها معرف  $(nljm_s)$  می‌باشند.

#### ۹ - نظریه پیرشیدگی وابسته به زمان

وقتی سیستم فیزیکی مورد نظر به وسیله هامیلتونی ناپیرشیده  $\mathcal{H}_0$  نمایش داده می‌شود، معمول است که پیرشیدگی  $\mathcal{P}$  به عنوان القاءکننده گذارهایی بین حالات ناپیرشیده  $|\varepsilon_i^0\rangle$  در نظر گرفته شود. از (۳-۶۶) نتیجه می‌شود که عملگر تحول کل برای سیستم ما در معادله انتگرالی

$$U(t, t_0) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t \mathcal{H}(\tau_1) U(\tau_1, t_0) d\tau_1 \quad (۷-۶۰ \text{ الف})$$

که در آن

$$\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{V}(t) \quad \text{و} \quad t > t_0$$

است، صدق می‌کند. در مورد خاصی که پیرشیدگی مستقل از زمان است، جواب (۷-۶۰ الف) خواهد شد

$$O(t, t_0) = \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(t - t_0) \right] \quad (۷-۶۰ ب)$$

که در آن  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{V}$ . ما به نحوه تحول حالت‌های ناپیرشیده  $\mathcal{H}_0$  تحت تأثیر عملگر (۷-۶۰) علاقه‌مند خواهیم بود. به این دلیل مناسب است که  $O(t, t_0)$  را برحسب عملگر تحول ناپیرشیده

$$O^{(0)}(t, t_0) = \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0(t - t_0) \right]$$

بیان کنیم. وسوسه‌انگیز است که این کار را با نوشتن (۷-۶۰ ب) به صورت

$$O(t, t_0) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{V}](t - t_0) \right\} = O^{(0)}(t - t_0) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \lambda \mathcal{V}(t - t_0) \right\} \quad (۷-۶۱)$$

انجام دهیم. تأکید می‌کنیم که (۷-۶۱) کاملاً "نادرست" است زیرا  $\mathcal{H}_0$  و  $\mathcal{V}$  جابه‌جاپذیر نیستند و اتحاد  $e^{A+B} = e^A e^B$  فقط وقتی معتبر است که  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  جابه‌جاپذیر باشند.

رابطه دادن  $O$  به  $O^{(0)}$  با یک تابع تحلیلی عملاً غیر ممکن است. با این وجود، اگر  $\lambda$  کوچک باشد، با یک سری پیرشیده از توانهای  $\lambda$  معمولاً امکان‌پذیر است. به دست آوردن ریاضیاتی یک چنین سری پیچیده‌تر از آن است که در اینجا نمایش داده شود، بنابراین ما فقط نتایج را ارائه می‌کنیم\*.

$$O(t, t_0) = O^{(0)}(t, t_0) + \sum_{n=1}^{\infty} O^{(n)}(t, t_0) \quad (۷-۶۲)$$

\* برای به دست آوردن این سری به کتاب زیر مراجعه کنید

A. Messiah, "Quantum Mechanics," Volume II, PP. 722-724, Wiley, New York, 1962.

هم چنین به پیوست ب از کتاب حاضر نیز رجوع کنید.



در می آید که در آن

$$O^{(n)} = \left(\frac{\lambda}{i\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t d\tau_n \int_{t_0}^{\tau_n} d\tau_{n-1} \cdots \int_{t_0}^{\tau_2} d\tau_1 \\ \times O^{(0)}(t, \tau_n) \hat{V}(\tau_n) O^{(0)}(\tau_n, \tau_{n-1}) \cdots O^{(0)}(\tau_2, \tau_1) \hat{V}(\tau_1) O^{(0)}(\tau_1, t_0)$$

معادله (۶۲-۷) نمایش دقیقی از جواب (۷-۶۰ الف) است به شرط اینکه سری همگرا باشد. این سری وقتی  $\lambda$  کوچک باشد، به طوری که چند جمله اول تقریب خوبی را به ما بدهند، خیلی مفید خواهد بود. وقتی  $\lambda \rightarrow 0$ ،  $O$  به  $O^{(0)}$  تقلیل پیدا می کند.

به ترتیب انتگرالهای زمانی برای جمله مرتبه  $n$  ام  $O^{(n)}$ ، یعنی،  $\tau_n > \tau_{n-1}$ ، توجه کنیم. این نکته به این واقعیت مربوط می شود که، از نظر غیرنسبیتی، تحول با گذشت زمان فقط به پیش می رود. در وضعیتهای نسبیتی به پدیده هایی که در جهت منفی زمان انتشار می یابند می توان مفهوم فیزیکی نسبت داد\*.

#### ۱۰ - گذارهای القاء شده به وسیله یک پریشیدگی ثابت

نخست موردی را در نظر بگیریم که در آن  $\hat{V}$  مستقل از زمان باشد. به علاوه فرض کنیم که سیستم در آغاز (در  $t = t_0$ ) در یکی از ویژه حالت های  $\mathcal{H}_0$ ، مثلاً  $|\varepsilon_i^0\rangle$ ، باشد. ایسن تحول حالت به وسیله

$$|\beta_i, t\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\varepsilon_i^0\rangle$$

داده می شود. از (۷-۶۰) آشکار است که وقتی  $\hat{V}$  مستقل از زمان است، عملگر تحول تابعی از بازه زمانی  $\tau = t - t_0$  است، یعنی

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(\tau)$$

احتمال مشاهده سیستم در یک ویژه حالت دیگر  $\mathcal{H}_0$ ، مثلاً  $|\varepsilon_j^0\rangle$ ، پس از گذشت زمان  $\tau$  با رابطه

---

\* به عنوان مثال، به کتاب زیر مراجعه کنید

R.P. Feynman, The Theory of Positrons, phys. Rev. 76,

764 (1949).

$$\mathcal{P}_{ij}(\tau) = |\langle \varepsilon_j^0 | \beta_i t \rangle|^2 = |\langle \varepsilon_j^0 | \hat{U}(\tau) | \varepsilon_i^0 \rangle|^2 \quad (۶۳-۷)$$

داده می‌شود. به‌طورمعمول، احتمال گذار از حالت  $i$  به حالت  $j$  به‌وسیله مجذور عنصر متناظر ماتریس عملگر تحول داده می‌شود. به‌تقارن نسبت به‌تعویض  $i$  و  $j$  توجه کنید. این نکته برگشت‌پذیری میکروسکوپیکی فرایند را نشان می‌دهد.

سپس رفتار این احتمال گذار را وقتی بازه زمانی به‌بینهایت میل می‌کند بررسی می‌کنیم. آهنگ‌گذار بین حالت  $\varepsilon_i^0$  و  $\varepsilon_j^0$  را به‌صورت

$$R_{ij} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{d\mathcal{P}_{ij}(\tau)}{d\tau} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{d}{d\tau} |\langle \varepsilon_j^0 | \hat{U}(\tau) | \varepsilon_i^0 \rangle|^2 \quad (۶۴-۷)$$

تعریف می‌کنیم. با استفاده از نمایش  $\hat{U}(\tau)$  به‌صورت سری،  $(۶۲-۷)$ ، آهنگ‌گذار را به‌صورت

$$R_{ij} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{d}{d\tau} \left\{ \left| \langle \varepsilon_j^0 | \hat{U}^0 | \varepsilon_i^0 \rangle + \langle \varepsilon_j^0 | \sum_{n=1}^{\infty} \hat{U}^{(n)} | \varepsilon_i^0 \rangle \right|^2 \right\} \quad (۶۵-۷)$$

به‌دست می‌آوریم. با این همه، با استفاده از

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon_j^0 | \hat{U}^0 | \varepsilon_i^0 \rangle &= \langle \varepsilon_j^0 | \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(t - t_0) \right] | \varepsilon_i^0 \rangle \\ &= \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \varepsilon_i^0 (t - t_0) \right] \langle \varepsilon_j^0 | \varepsilon_i^0 \rangle \end{aligned}$$

و با به‌خاطر داشتن اینکه وقتی  $i \neq j$  باشد داریم  $\langle \varepsilon_j^0 | \varepsilon_i^0 \rangle = 0$ ، نتیجه می‌گیریم

$$R_{ij} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{d}{d\tau} \left\{ \left| \langle \varepsilon_j^0 | \sum_{n=1}^{\infty} \hat{U}^{(n)}(\tau) | \varepsilon_i^0 \rangle \right|^2 \right\} \quad (۶۶-۷)$$

آهنگ کلی‌گذار از حالت  $i$  به حالت  $j$  شامل مجذور حاصل جمع به‌بینهایت جمله است، که جمله  $n$ ام آن متناسب است با  $\lambda^n$ . وقتی  $\lambda \rightarrow 0$ ، نتیجه می‌گیریم  $R_{ij} \rightarrow 0$  و گذار متوقف می‌شود. بنابراین تنها عامل گذارها پدیده پریشیدگی است. نخست موردی را در نظر می‌گیریم که در آن  $\lambda$  آنقدر کوچک است که تنها جمله  $n=1$  محتاج به‌نگاهداری است. این مطلب مستقیماً "منجر به آنچه که قاعده طلایی فرمی خوانده می‌شود، می‌گردد.

## ۱۱ - گذارهای مرتبه اول - قاعده پلائی فرمی

آهنگ گذار مرتبه اول از (۶۶-۷) با استفاده از فقط جمله  $n = 1$  به دست می آید .  
به این نتیجه می رسیم که این آهنگ باید عبارت باشد از

$$R_{ij} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{d}{d\tau} \left| \langle \varepsilon_j^0 | \hat{O}^{(1)}(\tau) | \varepsilon_i^0 \rangle \right|^2 \quad (\tau = t - t_0) \quad (67-7)$$

با استفاده از (۶۲-۷) داریم (برای  $\hat{P}$  ی مستقل از زمان)

$$\begin{aligned} \hat{O}^{(1)} &= \frac{\lambda}{i\hbar} \int_{t_0}^t d\tau_1 \hat{O}^{(0)}(t, \tau_1) \hat{P} \hat{O}^{(0)}(\tau_1, t_0) \\ &= \frac{\lambda}{i\hbar} \int_{t_0}^t d\tau_1 \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0(t - \tau_1)\right] \hat{P} \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0(\tau_1 - t_0)\right] \end{aligned}$$

بنابراین آهنگ گذار مرتبه اول در (۶۷-۷) می تواند به صورت

$$\begin{aligned} R_{ij} &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{d}{d\tau} \left| \langle \varepsilon_j^0 | \frac{\lambda}{i\hbar} \int_{t_0}^t d\tau_1 \right. \\ &\quad \times \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0(t - \tau_1)\right] \hat{P} \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0(\tau_1 - t_0)\right] | \varepsilon_i^0 \rangle \left. \right|^2 \end{aligned}$$

نوشته شود . با استفاده از رابطه

$$\exp\left[\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0(\tau_1 - t_0)\right] | \varepsilon_i^0 \rangle = \exp\left[\frac{i}{\hbar} \varepsilon_i^0(\tau_1 - t_0)\right] | \varepsilon_i^0 \rangle$$

پس از قدری مرتب کردن ، داریم

$$\begin{aligned} R_{ij} &= \frac{\lambda^2}{\hbar^2} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{d}{d\tau} \left| \exp\left[-\frac{i}{\hbar} (\varepsilon_j^0 t - \varepsilon_i^0 t_0)\right] \langle \varepsilon_j^0 | \hat{P} | \varepsilon_i^0 \rangle \right. \\ &\quad \times \left. \int_{t_0}^t \exp\left[\frac{i}{\hbar} (\varepsilon_j^0 - \varepsilon_i^0) \tau_1\right] d\tau_1 \right|^2 \end{aligned}$$

انتگرال ساده و سراسر است و به عنوان تمرین واگذار می شود (رک مسئله ۷-۱۰) که نشان

دهید نتیجه می‌تواند به صورت

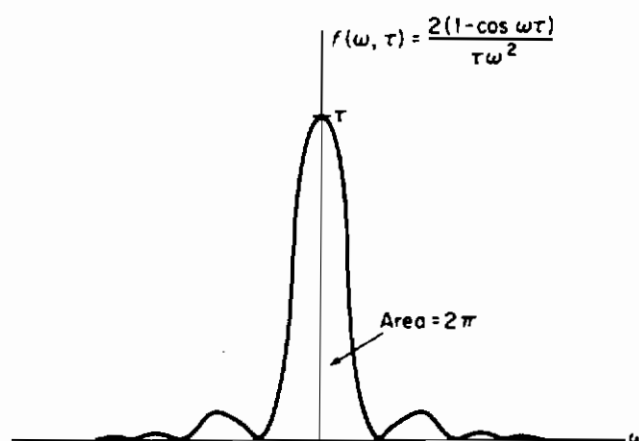
$$R_{ij} = \frac{\lambda^2}{\hbar^2} |V_{ji}|^2 \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{d}{d\tau} g(\omega_{ji}, \tau) \quad (۶۸-۷)$$

ساده شود که در آن

$$g(\omega, \tau) = \frac{2(1 - \cos \omega\tau)}{\omega^2} \quad , \quad \omega_{ji} = \frac{\epsilon_j^0 - \epsilon_i^0}{\hbar}$$

نخست رفتار تابع  $g(\omega, \tau)$  را به منظور درک معنی آن مطالعه می‌کنیم. با وارد کردن تابع کمکی  $f(\omega, \tau) = g(\omega, \tau)/\tau$ ، می‌بینیم که  $f(\omega, \tau)$  به ازای  $\tau$  ثابت یک تابع نوسانی از  $\omega$  است (شکل ۵-۷). قله آن در  $\omega = 0$  است و مقدار بیشینه در آنجا عبارت است از\*

$$f(0, \tau) = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{2(1 - \cos \omega\tau)}{\tau\omega^2} \rightarrow \tau$$



شکل (۵-۷) تابع  $f(\omega, \tau)$

بنابراین قله تابع  $f(\omega, \tau)$  با افزایش  $\tau$  به سمت بینهایت میل می‌کند. سطح زیر منحنی برابر است با

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(\omega, \tau) d\omega = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2(1 - \cos \omega\tau)}{\tau\omega^2} d\omega = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2(1 - \cos \theta)}{\theta^2} d\theta = 2\pi$$

---

\* این شکل مبهم می‌تواند به سادگی با استفاده از قاعده هویتهال محاسبه شود.

که در آن قرار داده ایم  $\theta = \omega\tau$ . نکته مهم این است که سطح زیرمنحنی مستقل از  $\tau$  است. در نتیجه وقتی  $\tau \rightarrow \infty$ ، قله مرکزی بالا می‌رود و پهنای منحنی در شکل (۷-۵) در حوالی  $\omega = 0$  کاهش می‌یابد به طوری که مساحت زیر منحنی ثابت بماند. اما این دقیقاً همان خاصیت تابع دلتا است و می‌توان برابری زیر را انجام داد

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} f(\omega, \tau) = 2\pi\delta(\omega) \quad \text{یا} \quad \lim_{\tau \rightarrow \infty} g(\omega, \tau) = 2\pi\tau\delta(\omega)$$

بالاخره آهنگ‌گذار در (۷-۶۸) می‌شود\*

$$R_{ij} = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar^2} |V_{ji}|^2 \delta(\omega_{ji}) \quad \left( \omega_{ji} = \frac{\epsilon_j^0 - \epsilon_i^0}{\hbar} \right) \\ = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar} |V_{ji}|^2 \delta(\epsilon_j^0 - \epsilon_i^0) \quad (7-69)$$

بنابراین آهنگ‌گذار تنها بین حالت‌های هم انرژی، یعنی  $\epsilon_j^0 = \epsilon_i^0$ ، غیر صفر است. نتیجه می‌گیریم که یک پیرشیدگی ایستا (مستقل از زمان) تنها باعث گذارهایی می‌شود که انرژی را پایسته نگاه می‌دارند و نه به سیستم ناپیرشیده انرژی می‌افزاید و نه از آن می‌کاهد. توجه خود را به گذارهایی معطوف می‌کنیم که حالت نهایی قسمتی از یک پیوستار باشد. این مطلب بخصوص در فرایندهای پراکندگی که در آنها پتانسیل پیرشیدگی مسئول گذارهای بین حالت‌های ذرات آزاد است مهم است. حالت‌های اخیر، البته، جزو طیف پیوسته‌اند. عموماً، فرایندهای اساسی از قبیل واکنش‌های شیمیایی و هسته‌ای و برهم‌کنش‌های فوتوالکتریکی شامل حالت‌هایی هستند که در طیف پیوسته قرار دارند. در اینجا حالت‌ها را به جای  $|\epsilon_i^0\rangle$  و  $|\epsilon_j^0\rangle$  با نمادهای  $|n\rangle$  و  $|m\rangle$  نمایش می‌دهیم و با استفاده از نمادگذاریهای قراردادی، (۷-۶۹) را به صورت

$$R_{nm} = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar} \int |\langle m | \hat{V} | n \rangle|^2 \delta(\epsilon_m - \epsilon_n) d\epsilon_m$$

بازنویسی می‌کنیم. وجود انتگرال لازم است زیرا در طیف پیوسته باید آهنگ کلی‌گذار به یک گروه از حالت‌های نهایی  $|m\rangle$ ، به جای یک حالت تک‌گسسته، را در نظر بگیریم. انتگرال فوق می‌تواند با استفاده از

$$d\epsilon_m = \rho(m) d\epsilon_m \quad (7-70)$$

\* تابع دلتا دارای خاصیت  $\delta(ax) = |a|^{-1} \delta(x)$  است.

به انتگرالی روی انرژی (به جای انتگرال روی حالت‌های نهایی) تبدیل شود. در این رابطه  $\rho(m) = dm/d\varepsilon_m$  بیانگر تعداد حالت‌های پیوستار بر واحد بازه انرژی، یعنی، چگالی حالت‌ها است. در نهایت، آهنگ‌گذار خواهد شد

$$R_{nm} = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar} \int |\langle m | \hat{V} | n \rangle|^2 \delta(\varepsilon_m - \varepsilon_n) \rho(m) d\varepsilon_m$$

یا، با استفاده از خاصیت غربالی تابع دلتا،

$$R_{nm} = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar} [ |V_{mn}|^2 \rho(m) ]_{\varepsilon_m = \varepsilon_n} \quad (۷۱-۷)$$

معادله (۷۱-۷) همان قاعده طلایی فرمی است و بیان می‌دارد که آهنگ‌گذار  $R_{nm}$ :

(الف) فقط بین حالت‌های پیوسته هم انرژی غیرصفر است.

(ب) متناسب با مجذور عنصر ماتریس پریشیدگی‌ای است که این حالت‌ها را به یکدیگر می‌پیوندد.

(ج) متناسب با چگالی حالت‌های نهایی است.

در فصل ۸، قاعده طلایی را به مسائل پراکندگی که در آنها پتانسیل پراکندگی به عنوان یک پریشیدگی که باعث گذار از یک ویژه حالت اولیه تکانه،  $|k\rangle$ ، به یک ویژه حالت نهایی،  $|k'\rangle$ ، می‌شود اعمال خواهیم کرد. تغییر در بردار تکانه (که انرژی آن تغییر نکرده است) بیانگر پراکندگی کشسان است و آهنگ پیشگویی شده به وسیله (۷۱-۷) ارتباط خیلی نزدیکی با مقطع مؤثر دارد.

## ۱۲ - تصحیحات مرتبه‌های بالاتر قاعده طلایی

قاعده طلایی فرمی (۷۱-۷) با استفاده از تنها جمله مرتبه اول بسط عملگر تحول به دست آمد. غالباً نظریه مرتبه اول ناکافی است. به دست آوردن جملات مرتبه بالاتر برای منظور ما خیلی پیچیده است. اما، نتیجه آن به قرار زیر است\*

\* برای بحث در باره (۷۲-۷) به کتاب زیر مراجعه کنید

L.P. Landau and E.M. Lifshitz, "Quantum Mechanics," 2nd ed., Section 43. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts 1965.

$$R_{nm} = \frac{2\pi}{\hbar} \left[ \left| \sum_{j=1}^{\infty} \lambda^j M_{nm}^{(j)} \right|^2 \rho(m) \right]_{\epsilon_n = \epsilon_m} \quad (۷-۷۲)$$

که در آن

$$\begin{aligned} M_{nm}^{(1)} &= V_{nm} \\ M_{nm}^{(2)} &= \int \frac{V_{n1} V_{1m} d1}{\epsilon_m - \epsilon_1} \\ M_{nm}^{(3)} &= \int \frac{V_{n1} V_{11'} V_{1'm}}{(\epsilon_m - \epsilon_1)(\epsilon_m - \epsilon_{1'})} \\ &\vdots \end{aligned}$$

$M^{(j)}$  ها دامنه‌های گذار نامیده می‌شوند. هر دامنه در  $\lambda^j$  ضرب می‌شود و برای پریشیدگی‌های به حد کافی ضعیف تنها چند دامنه اول در (۷-۷۲) کافی است. اگر اتفاقاً  $M_{nm}^{(1)}$  صفر شود (ایمن مورد گاهی اوقات پیش می‌آید)، جمله عمده (مرتبه دوم) در قاعده پلائی می‌دهد

$$R_{nm} = \frac{2\pi}{\hbar} [\lambda^4 |M_{nm}^{(2)}|^2 \rho(m)]_{\epsilon_n = \epsilon_m} \quad (۷-۷۳)$$

معمولاً لازم نخواهد بود که از مرتبه اول فراتر رویم.

اهمیت قاعده پلائی فرمی، (۷-۷۱) و (۷-۷۲)، در کاملاً "عمومی بودن آن است. توجه کنیم که در هیچ کجا نمایش مختصای (مکانیک موجی) در به دست آوردن آن به کار نرفته است. تعدادی از فرایندهای بنیادی پراکندگی وجود دارد که در آنها  $\tau$  مشاهده‌پذیر مناسبی نیست.

یک مثال خیلی مهم که قبلاً نیز مورد بررسی قرار گرفته است برهم‌کنش وابسته به اسپین است. در پراکندگی هسته‌ای، نیروهای وابسته به اسپین نقش مهمی بازی می‌کنند. یک مثال دیگر در برهم‌کنشهای فوتوالکتریکی، یعنی، پراکندگی فوتونها و الکترونها، رخ می‌دهد. همان‌طور که در فصل ۱۲ خواهیم دید، کوانتش میدان تابشی که مستقیماً منجر به مفهوم فوتونی می‌شود عملکرد  $\hbar$  را در بر ندارد. در این مثال فوق‌الذکر مکانیک موجی برای توصیف کامل پراکندگی یا فرایند گذار نامناسب است. اما قاعده پلائی فرمی کاملاً "عمومی است و احتمالاً متداول‌ترین فرمول برای محاسبه آهنگهای گذار (یا مقطع مؤثر) در فرایندهای بنیادی است.

### ۱۳ - گذارهای القاء شده به وسیله یک پریشیدگی هماهنگ

یکی از معمولترین راههای القاء گذار بین حالت‌های مانای یک سیستم کوانتومی اعمال یک پریشیدگی هماهنگ است. به عنوان مثال، میدانهای الکتریکی و مغناطیسی نوسانی وابسته به نور می‌توانند باعث گذار بین حالت‌های مانا در اتمها شوند. رابطه (۶۴-۷) را در مورد گذارهای بین حالت‌های گسسته  $|\varepsilon_i\rangle$  و  $|\varepsilon_j\rangle$  که به وسیله یک پریشیدگی هماهنگ به شکل

$$\lambda \hat{V} = \lambda \hat{V}(\mathbf{r}) \cos \omega t = \lambda \hat{V}(\mathbf{r}) \frac{1}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})$$

القاء شده‌اند به کار خواهیم برد. روشها اصولاً "شبه به روشهایی هستند که در مورد مستقل از زمان به کار رفتند. آهنگ گذار با مقایسه با (۶۹-۷) عبارت است از

$$R_{ij}(\omega) = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar^2} |V_{ij}|^2 \frac{1}{2} [\delta(\omega_{ji} - \omega) + \delta(\omega_{ji} + \omega)] \quad (۷۴-۷)$$

آهنگ گذار تابع فرکانس است و به جز در  $\omega = |\omega_{ji}|$  صفر است. این مثالی از تشدید مکانیک کوانتومی است که در آن سیستم کوانتومی متاثر نمی‌شود مگر اینکه فرکانس پریشیده کاملاً بر یکی از فرکانسهای برانگیختگی

$$\omega = |\omega_{ji}| = \frac{|\varepsilon_j - \varepsilon_i|}{\hbar}$$

"منطبق" شود.

در عمل غیرممکن است یک موج تکرنگ واقعی ایجاد کرد. از این رو پریشیدگی معمولاً "به شکل یک بسته موج

$$\lambda \hat{V}(\mathbf{r}, t) = \lambda \hat{V}(\mathbf{r}) \int_0^\infty A(\omega) \cos \omega t d\omega$$

است که نمایشگر برهم نهشی از فرکانسهای مختلف است. بنابراین آهنگ گذار کل باید به صورت انتگرالی روی فرکانسهای فرودی نوشته شود، یعنی،

$$R_{ij} = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar^2} |V_{ij}|^2 \frac{1}{2} \int_0^\infty |A(\omega)|^2 [\delta(\omega_{ji} - \omega) + \delta(\omega_{ji} + \omega)] d\omega \quad (۷۵-۷)$$

اگر  $\varepsilon_j > \varepsilon_i$  باشد ( $\omega_{ji} > 0$ )، تابع دلتای دوم صفر می‌دهد و خاصیت غربالی تابع دلتای



اول می‌دهد

$$R_{ij} = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar^2} |V_{ij}|^2 \frac{1}{2} |A(\omega_{ji})|^2 \quad (\varepsilon_j > \varepsilon_i) \quad (۷-۷۶)$$

آهنگ‌گذار در (۷-۷۶) فرایندی را توصیف می‌کند که در آن سیستم کوانتومی از یک حالت با انرژی پایین‌تر به یک حالت با انرژی بالاتر می‌رود: این فرایند فرایند جذب القایی است که در آن انرژی از چشمه پریشنده به سیستم منتقل می‌شود. در اینجا آهنگ متناسب با شدت (مجذور دامنه) پریشیدگی در فرکانس تشدیدگر  $\omega_{ji}$  و با مجذور عنصر ماتریس  $|V_{ij}|^2$  است.

اگر  $\varepsilon_j < \varepsilon_i$  باشد ( $\omega_{ji} < 0$ )، تابع دلتای اول صفر می‌دهد و تابع دلتای دوم می‌دهد

$$R_{ij} = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar^2} |V_{ij}|^2 \frac{1}{2} |A(\omega_{ji})|^2 \quad (\varepsilon_j < \varepsilon_i) \quad (۷-۷۷)$$

بنابراین آهنگ‌گسیل القایی با آهنگ جذب بین دو تراز یکسان است. این ارتباط مثالی است از اصل برگشت‌پذیری میکروسکوپیکی.

بنابراین وقتی یک سیستم در معرض یک پریشیدگی هماهنگ شامل فرکانس  $\omega = |\omega_{ji}|$  قرار گیرد، گذارهایی بین ترازهای  $\varepsilon_j$  و  $\varepsilon_i$  القاء می‌شوند. در مورد جذب، گذارها با یک افزایش در انرژی سیستم کوانتومی همراه است، سرچشمه این انرژی همان پریشیدگی است. برای گسیل، انرژی به چشمه پریشنده داده می‌شود. اگر عنصر ماتریسی که حالات را به هم ربط می‌دهد صفر شود، گذار اتفاق نمی‌افتد (در مرتبه اول) و اصطلاحاً "گفته می‌شود که گذار ممنوع است".

#### ۱۴- گذارهای تابشی در هیدرژن

روابط (۷-۷۶) و (۷-۷۷) را به گذارهایی در هیدرژن که به وسیله تابش الکترومغناطیسی حرارتی (جسم سیاه) القاء می‌شوند اعمال می‌کنیم. اگر طول موج تابش در مقایسه با ابعاد سیستم اتمی بزرگ باشد\*، از تغییرات فضائی میدان الکتریکی در تقرب اول می‌توان صرف‌نظر

---

\* ابعاد یک اتم در حدود  $d \sim 10^{-8}$  cm است در حالی که تابش مورد توجه معمولاً دارای طول موج  $\lambda \sim 10^{-5}$  cm می‌باشد.

کرد. در این صورت پیریشیدگی معادل است با یک میدان الکتریکی نوسانی یکنواخت\*  
 $E = E_0 \cos \omega t$ . پتانسیل پیریشنده شبیه به پتانسیلی است که در اثر استارک وجود داشت یعنی،  
 $\mathcal{P} = eE \cdot \mathbf{r} = eE_0 \cdot \mathbf{r} \cos \omega t$ ، که در آن  $\omega$  فرکانس تابش فرودی است. چون  $\mathbf{p} = -e\mathbf{r}$   
 معرف گشتاور دوقطبی اتم هیدروژن است، بنابراین ما تقریبی را اعمال کرده ایم که تقریب  
 دوقطبی الکتریکی نامیده می شود. این تقریب نیز تنها وقتی معتبر است که طول موج تابش  
 در مقایسه با ابعاد اتم بزرگ باشد.  
 آهنگ جذب و گسیل القایی می شود

$$R_{ij} = \frac{2\pi e^2}{\hbar^2} \frac{1}{2} |E_0(\omega_{ij}) \cdot \langle i|\mathbf{r}|j \rangle|^2 \quad (78-7)$$

چون تابش حرارتی (جسم سیاه) به طور کاتوره ای قطبی شده است باید روی سه مؤلفه  $E$   
 متوسط گرفت و نوشت

$$R_{ij} = \frac{2\pi e^2}{\hbar^2} \frac{1}{2} \frac{|E_0(\omega_{ij})|^2}{3} |\langle i|\mathbf{r}|j \rangle|^2 \quad (79-7)$$

که در آن

$$|\langle i|\mathbf{r}|j \rangle|^2 = |x_{ij}|^2 + |y_{ij}|^2 + |z_{ij}|^2$$

چگالی انرژی تابشی به وسیله رابطه  $\rho_{\text{rad}} = (|E|^2/4\pi)$  به میدان الکتریکی مربوط می شود،  
 به طوری که آهنگ در نهایت خواهد شد

$$R_{ij} = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2} \rho_{\text{rad}}(\omega_{ij}) |\langle i|\mathbf{r}|j \rangle|^2 \quad (80-7)$$

بنابراین گذارهای تابشی تنها در صوتی در مرتبه اول رخ می دهند که

(الف) تابش با فرکانس برانگیختگی موجود باشد، و

(ب) عنصر ماتریس  $\langle i|\mathbf{r}|j \rangle$  صفر نباشد.

شرط (ب) منجر به قواعدی می شود که اصطلاحاً "قواعد گزینش" نامیده می شوند و

برگذارهای مجاز و ممنوع حاکمند. به عنوان مثال، در یک مسئله نیروی مرکزی که در آن کتهای  
 $|nlm_l m_s\rangle$  سیستم را مشخص می کنند، گذارها تنها بین حالت هایی رخ می دهند که در آنها  
 عنصر ماتریس،  $\langle n'l'm'_l m'_s | \mathbf{r} | nlm_l m_s \rangle$ ، صفر نباشد.

---

\* در این تقریب دوقطبی الکتریکی اثرات میدان مغناطیسی قابل اغماض است.

عنصر ماتریس دوقطبی عبارت است از

$$z_{ij} = \int \psi_{n'l'm_l'm_s'}^* r \cos \theta \psi_{nlm_l m_s} d\mathbf{r} \\ = \int R_{n'l'} r R_{nl} r^2 dr \int_{-1}^1 du P_{l'm_l'}(u) u P_{lm_l}(u) \int_0^{2\pi} e^{-im_l' \phi} e^{im_l \phi} d\phi \langle m_s' | m_s \rangle \quad (۷-۸)$$

دو حاصلضرب آخر نشان می‌دهند که

$$z_{ij} \propto \delta_{m_l m_l'} \delta_{m_s m_s'}$$

بنابراین  $z_{ij}$  فقط برای گذارهایی وجود دارد که در آنها  $\Delta m_l = 0$  و  $\Delta m_s = 0$ . انتگرال  $\theta$  (یا  $\mu$ ) می‌تواند با استفاده از یک اتحاد برای توابع وابسته لوژاندر، یعنی،

$$\mu P_{lm_l} = \left[ \frac{l - m_l + 1}{2l + 1} \right] P_{l+1, m_l} + \left[ \frac{l + m_l}{2l + 1} \right] P_{l-1, m_l}$$

محاسبه شود. با بردن در (۷-۸) و با استفاده از تعامد توابع وابسته لوژاندر، نتیجه می‌گیریم

$$z_{ij} \propto \delta_{m_l m_l'} \delta_{m_s m_s'} [\delta_{l, l'+1} + \delta_{l, l'-1}]$$

$z_{ij}$  به جز برای  $\Delta l = \pm 1$  صفر است. ممکن است محدودیتهای دیگری ناشی از انتگرال شعاعی وجود داشته باشد اما این محدودیتها بسته به مسئله نیروی مرکزی مورد نظر تغییر می‌کنند.

اثبات اینکه عنصرهای  $x_{ij}$  و  $y_{ij}$  منجر به قواعد گزینش  $\Delta m_l = \pm 1$ ،  $\Delta m_s = 0$  و  $\Delta l = \pm 1$  می‌شوند به عنوان تمرین واگذار می‌شود. به طور خلاصه، می‌بینیم که در تقریب دوقطبی الکتریکی، سیستمهایی که به وسیله حالت‌های  $|nlm_l m_s\rangle$  مشخص می‌شوند متحمل گذارهای تابشی می‌شوند که در آنها قواعد گزینش  $\Delta m_l = 0, \pm 1$ ،  $\Delta m_s = 0$  و  $\Delta l = \pm 1$  برقرار است. تمام گذارهای دیگر در مرتبه اول ممنوع هستند. هم چنین می‌توان قواعد گزینش  $\Delta l = \pm 1$ ،  $\Delta m_j = 0, \pm 1$  و  $\Delta j = 0, \pm 1$  را برای طرحواره  $|nljm_j\rangle$  اثبات کرد. آهنگ (۸-۷) به شرطی معتبر است که هم طول موج تابش بزرگ باشد (تقریب دوقطبی) و هم شدت تابش کم باشد (پیشیدگی مرتبه اول).

اکنون، با استفاده از یک استدلال آماری، نشان خواهیم داد که (۷-۸) در واقع ناکامل است. در واقع همین استدلال جملات از قلم افتاده در فرایندگذار را ایجاد می‌کند.

استدلال به صورت زیر است:

مجموعه‌ای از سیستمهای کوانتومی، مثلاً "اتمها"، در نظر بگیریم که هرکدام از آنها می‌توانند فقط در یکی از دو حالت  $|\epsilon_i\rangle$  یا  $|\epsilon_j\rangle$  با  $\epsilon_i > \epsilon_j$  قرار گیرند. فرض کنیم که اتمها و تابشهای با فرکانس شدید  $\omega = \omega_{ij}$  در یک جعبه قرار داشته باشند. به علاوه، فرض کنیم که در آغاز تعداد اتمهای موجود در هر دو حالت با هم برابرند، یعنی،  $N_i = N_j$ . از اصل بزرگشت پذیری میکروسکوپیکی، نتیجه می‌گیریم

$$\frac{dN_{i \rightarrow j}}{dt} = \frac{dN_{j \rightarrow i}}{dt}$$

بنابراین ترازها هم جمعیت باقی می‌مانند. چون در مجموع هیچ انرژی توسط اتمها جذب یا گسیل نمی‌شود، حالت تابش بدون تغییر باقی می‌ماند. متأسفانه، این نتایج با مشاهدات تجربی ناسازگاراند. در فصل ۱ دیدیم که توزیع فرکانس تابش در یک کاواک به سمت چگالی طیفی جسم سیاه که فقط به وسیله دمای دیواره‌های محفظه، و نه به وسیله ترکیب محفظه یا ثابتهای آن، تعیین می‌شود میل می‌کند.

هم چنین می‌توان تحقیق کرد که اتمهای داخل جعبه به یک توزیع تعادل می‌رسند که با قانون بولتزمن سازگار است. نسبت جمعیتهای ترازها باید به سمت

$$\frac{N_j}{N_i} = \frac{e^{-\epsilon_j/kT}}{e^{-\epsilon_i/kT}} \quad (۷-۸۲)$$

میل کند. چون ترازهای با انرژی پایین‌تر میل دارند که پرجمعیت‌تر شوند، باید فرایندی وجود داشته باشد که گذارهای از انرژی بالاتر به انرژی پایین‌تر را تسهیل نماید. به علاوه چون باید، صرف‌نظر از حالت اولیه تابش، به توزیعی نظیر توزیع موجود در (۷-۸۲) برسیم نتیجه می‌گیریم که این فرایند باید مستقل از  $\rho_{\text{rad}}(\omega)$  باشد و می‌تواند فقط تابع سیستم اتمی باشد. لذا گذارهای تابشی باید به‌طور خودبه‌خود از حالتی با انرژی بالاتر به حالتی با انرژی پایین‌تر، حتی در غیاب تابش، صورت گیرند. اگر از یک حالت معینی گذار نتواند به‌طور خودبه‌خود صورت گیرد، آن حالت باید حالت پایه یا حالت با پایین‌ترین انرژی باشد. توضیح منشاء این گسیلهای خودبه‌خود و محاسبه آهنگ آن نمی‌تواند تنها با استفاده از مکانیک کوانتومی ماده انجام گیرند.

با این وجود، دو روش وجود دارد که عموماً "برای به دست آوردن این "آهنگ" به کار برده می‌شوند. یکی از آنها که دقیق‌تر است متکی به این واقعیت است که یک پریشیدگی تابشی

وابسته به زمان دارای هویت مخصوص به خود است و تابع قوانین نظریه کوانتومی است. کوانتش این میدان تابشی مستقیماً "به مفهوم کوانتای نور یا فوتون منجر می شود. علاوه بر این، یک چنین کوانتشی به طور کامل "طبیعی منجر به آهنگهای خودبه خودی و هم چنین آهنگهای القائی می شود. بنابراین کل سیستم تشکیل می شود از ماده به اضافه تابش که انرژی بین آنها به صورت فوتون مبادله می شود. بحث مشروح تر این روش را به فصل ۱۲ موکول می کنیم.

برای مقصود فعلی ما می توان آهنگ خودبه خودی را با استفاده از روش آماری به دست آورد. در حالی که این روش فاقد دقت به نظر می آید، با این وجود معتبر است و منجر به همان نتایجی می شود که از روش بحث شده در بالا به دست می آید.

#### ۱۵ - دیدگاه اینشتین در گسیل خودبه خود - توازن دقیق

برای تعقیب دیدگاه اینشتین، مناسب است که آهنگ القائی (جذب و گسیل) در (۸۵-۷) را به صورت

$$R_{ij}^{(ind)} = B_{ij} \rho_{rad}(\omega_{ij})$$

بنویسیم که در آن

$$B_{ij} = \frac{4\pi^2 e^2}{3 \hbar^2} |\langle \varepsilon_i | \mathbf{r} | \varepsilon_j \rangle|^2 \quad (۸۳-۷)$$

ضریب "B" ی اینشتین نامیده می شود. به طور مشابه آهنگ خودبه خودی برای گذار از  $|\varepsilon_j\rangle$  به  $|\varepsilon_i\rangle$  را به صورت

$$R_{ij}^{(spont)} = A_{ij} \quad (\varepsilon_j > \varepsilon_i) \quad (۸۴-۷)$$

وارد می کنیم که در آن  $A_{ij}$  ضریب "A" نامیده می شود. تعداد اتمهایی که (در واحد زمان) از  $|\varepsilon_j\rangle$  به  $|\varepsilon_i\rangle$ ، با  $\varepsilon_j > \varepsilon_i$ ، عبور می کنند عبارت است از

$$\begin{aligned} \frac{dN_{j \rightarrow i}}{dt} &= N_j [R_{ij}^{(ind)} + R_{ij}^{(spont)}] \\ &= N_j [B_{ij} \rho_{rad}(\omega_{ji}) + A_{ij}] \end{aligned} \quad (۸۵-۷)$$

هم چنین، تعدادی که از انرژی پایین تر به بالاتر می روند ( $\varepsilon_j > \varepsilon_i$ ) عبارت است از

$$\frac{dN_{i \rightarrow j}}{dt} = N_i R_{ij}^{(ind)} = N_i B_{ij} \rho_{rad}(\omega_{ji}) \quad (۷-۸۶)$$

وقتی تعادل حرارتی برقرار شود، داریم

$$\frac{dN_{i \rightarrow j}}{dt} = \frac{dN_{j \rightarrow i}}{dt}$$

یا

$$N_j [B_{ij} \rho_{rad}(\omega_{ji}) + A_{ij}] = N_i B_{ij} \rho_{rad}(\omega_{ji}) \quad (۷-۸۷)$$

به علاوه، در حالت تعادل نسبت جمعیتها با قانون بولتزمن داده می شود

$$\frac{N_j}{N_i} = \frac{e^{-\epsilon_j/kT}}{e^{-\epsilon_i/kT}} = e^{-\hbar\omega_{ji}/kT} \quad \left( \omega_{ji} = \frac{\epsilon_j - \epsilon_i}{\hbar} \right) \quad (۷-۸۸)$$

با ترکیب (۷-۸۷) و (۷-۸۸) و حل آن برای  $\rho_{rad}$ ، خواهیم داشت

$$\rho_{rad}(\omega_{ji}) = \frac{A_{ij}}{B_{ij}} \frac{1}{e^{\hbar\omega_{ji}/kT} - 1} \quad (۷-۸۹)$$

بالاخره، انتظار داریم که چگالی طیفی تعادل با قانون پلانک

$$\rho(\omega, T) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} \quad (۷-۹۰)$$

مطابقت داشته باشد. از مقایسه (۷-۸۹) و (۷-۹۰) مشاهده می شود که

$$\frac{A_{ij}}{B_{ij}} = \frac{\hbar\omega_{ij}^3}{\pi^2 c^3}$$

در نتیجه

$$A_{ij} = \frac{\hbar\omega_{ji}^3}{\pi^2 c^3} B_{ij} \quad (۷-۹۱)$$

توجه کنیم که توازن دقیق آماری منجر به رابطه ای بین ضرایب  $A$  و  $B$  می شود، اما اطلاعاتی در مورد ساختار فردی آنها نمی دهد. چون  $B_{ij}$  قبلاً در (۷-۸۳) به دست آمده است، آهنگ

خودبه خودی به صورت زیر به دست می آید

$$R_{ij}^{(\text{spont})} = A_{ij} = \frac{\hbar \omega_{ji}^3}{\pi^2 c^3} \frac{4\pi^2}{3} \frac{e^2}{\hbar^2} |\langle \varepsilon_i | \mathbf{r} | \varepsilon_j \rangle|^2$$

$$= \frac{4\omega_{ji}^3 e^2}{3\hbar c^3} |\langle \varepsilon_i | \mathbf{r} | \varepsilon_j \rangle|^2$$

به طور خلاصه، مشاهده می کنیم که وقتی نظریه پیرشیدگی به یک پیرشیدگی هماهنگ اعمال شود، منجر به آهنگهای گذار ناکامل می شود. علت این مطلب این است که فرض کرده ایم می توان بستگی زمانی پیرشیدگی در مجاورت یک سیستم کوانتومی را "کنترل" کرد. در مکانیک کلاسیکی، به ندرت وجود چنین قیدهای وابسته به زمانی مورد سوال قرار می گیرد. در نظریه کوانتومی، خود پیرشیدگی در معرض محدودیتهایی است که به وسیله اصل عدم قطعیت تحمیل می شوند. در حالی که استدلالهای آماری می توانند برای به دست آوردن آهنگهای خودبه خودی به کار روند، یک روش دقیق تر مستلزم کوانتس میدان پیرشیده است.

## ۱۶ - روش وردشی (رالی - ریتس)

در روشهای تقریبی بحث شده در بالا لازم است که ثابت پیرشیدگی  $\lambda$  کوچک باشد. به علاوه، وقتی  $\lambda \rightarrow 0$  جملات مرتبه اول برای نزدیک شدن به انرژیها و هم چنین ویژه حالتها، کافی هستند.

اکنون یک روش تقریبی در نظر خواهیم گرفت که مستقل از مقدار  $\lambda$  است و حتی در موردی که پیرشیدگی بزرگ باشد اعمال می شود. اما، تعیین دقت این روش مشکل است. به علاوه، این روش معمولاً برای ارزشیابی ویژه مقدارها مفیدتر است تا برای ویژه تابعها.

روش وردشی بخصوص در تعیین انرژی حالت پایه هامیلتونی وقتی این تراز جزء یک طیف گسسته باشد مفید است. در این روش نیاز به لم زیر خواهیم داشت.

لم - فرض کنیم  $|\alpha\rangle$  یک گت بهنجار شده و  $\varepsilon_1$  انرژی حالت پایه  $\mathcal{H}$  باشد. در این صورت نامساوی زیر همیشه برقرار است

$$\langle \alpha | \mathcal{H} | \alpha \rangle \geq \varepsilon_1 \quad (7-92)$$

اثبات - با بسط  $|\alpha\rangle$  در ویژه پایه راست هنجار  $\mathcal{H}$ ، یعنی  $|\alpha\rangle = \sum_i a_i |\varepsilon_i\rangle$  طرف

چپ (7-92) خواهد شد

$$\begin{aligned} \left\{ \sum_i^{\infty} \langle \varepsilon_i | a_i^* \right\} \mathcal{H} \left\{ \sum_j^{\infty} a_j | \varepsilon_j \rangle \right\} &= \sum_{ij}^{\infty} a_i^* a_j \varepsilon_j \langle \varepsilon_i | \varepsilon_j \rangle \\ &= \sum_{ij}^{\infty} a_i^* a_j \varepsilon_j \delta_{ij} = \sum_{i=1}^{\infty} \varepsilon_i |a_i|^2 \end{aligned}$$

چون  $\varepsilon_1$  انرژی حالت پایه است، داریم  $\varepsilon_1 \leq \varepsilon_i$  و

$$\langle \alpha | \mathcal{H} | \alpha \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \varepsilon_i |a_i|^2 \geq \varepsilon_1 \sum_{i=1}^{\infty} |a_i|^2$$

کت  $|\alpha\rangle$  بهنجارشده فرض می‌شود، بنابراین جمع طرف راست برابر با یک است و لم اثبات شده است.

در مکانیک موجی، این نامساوی به شکل

$$I = \int \psi_{\alpha}^* \mathcal{H} \psi_{\alpha} d\mathbf{r} \geq \varepsilon_1 \quad (۷-۹۳)$$

در می‌آید که در آن

$$\int \psi_{\alpha}^* \psi_{\alpha} d\mathbf{r} = 1$$

توجه کنیم که انتگرال طرف چپ میانگر حد بالای انرژی دقیق حالت پایه  $\mathcal{H}$ ، بدون توجه به  $\psi_{\alpha}$  است.

روش و ردشی را با انتخاب یک تابع آزمایشی "معقول" که وابسته به  $N$  پارامتر  $\xi_1, \dots, \xi_N$  می‌باشد، یعنی،

$$\psi_{\text{trial}} = \psi_{\text{trial}}(\mathbf{r}, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N)$$

به کار خواهیم برد. با بردن شکل فرضی  $\psi$  در (۷-۹۳)، عنصر ماتریس  $\langle \alpha | \mathcal{H} | \alpha \rangle$  خواهد شد.

$$\int \psi_{\text{trial}}^* \mathcal{H} \psi_{\text{trial}} d\mathbf{r} = I(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) \quad (۷-۹۴)$$

از لم فوق نتیجه می‌شود که، بدون توجه به مقادیر عددی  $\xi$  ها،  $I \geq \varepsilon_1$ . بنابراین می‌توان با کمینه کردن  $I$  کمترین حد بالایی برای انرژی دقیق حالت پایه  $\varepsilon_1$ ، به دست آورد. این امر با پیدا کردن جواب  $N$  معادله



$$\left. \frac{\partial I}{\partial \xi} \right|_{\xi_i = \xi_{i0}} = 0 \quad (i = 1, \dots, N)$$

حاصل می‌شود. انرژی وردشی خواهد شد

$$\varepsilon_{\text{var}} = I_{\min}(\xi_{10}, \xi_{20}, \dots, \xi_{N0}) \geq \varepsilon_1 \quad (95-7)$$

روش مزبور را با توابع آزمایشی متفاوتی تکرار می‌کنیم. کمترین انرژی وردشی نگاه داشته می‌شود و معرف بهترین تقریب برای  $\varepsilon_1$  است. در عمل، با توابع آزمایشی‌ای که پارامترهای بسیاری داشته باشند نتایج بهتری به دست می‌آید، زیرا  $\psi$  انعطاف بیشتری نسبت به تغییرات خواهد داشت.

اگر تابع آزمایشی طوری باشد که بتواند با تغییر پارامترها کاملاً "بر تابع دقیق حالت پایه منطبق شود، کمینه مقدار انتگرال وردشی با انرژی دقیق حالت پایه متناظر خواهد بود. در واقع، اگر  $\psi_{\text{trial}} = \psi_1$  باشد، داریم

$$\langle \varepsilon_1 | \mathcal{H} | \varepsilon_1 \rangle = \int \psi_1^* \mathcal{H} \psi_1 d\tau = \varepsilon_1 \quad (96-7)$$

تغییر شکل تابع آزمایشی برای رسیدن به مقدار کمتری از  $I_{\min}$  و در نتیجه نزدیک‌تر به مقدار  $\varepsilon_1$  ممکن است منجر به تقریب ضعیفتری برای  $\psi_1$  گردد. چون  $\psi_1$  معمولاً شناخته شده نیست، تعیین دقت  $\psi_{\text{var}}(r, \xi_{10}, \dots, \xi_{N0})$  مشکل است.

روش فوق را در محاسباتی که شامل حالت پایه هیدروژن است روشن خواهیم کرد\* . البته، در این مورد می‌دانیم که جواب دقیق به صورت

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{a^{3/2}} e^{-r/a} \quad \varepsilon_1 = -e^2/2a \quad (a = \hbar^2/me^2) \quad (97-7)$$

است. بنابراین ارزیابی دقت روش وردشی برای توابع آزمایشی متعددی امکان پذیر خواهد بود.

اگر یک تابع آزمایشی بهنجار شده به شکل

\* به عنوان مثال به کتاب زیر مراجعه کنید

A. Messiah, "Quantum Mechanics", Volume II P.767.  
wiley, New York, 1962.

$$\psi_{\text{trial}}(r, \xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{\xi}{a}\right)^{3/2} e^{-\xi r/a} \quad (۷-۹۸)$$

به کار بریم ، انتگرال وردشی به شکل

$$I(\xi) = \int \psi_{\text{trial}}^* \left( \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{r} \right) \psi_{\text{trial}} d\mathbf{r} = \frac{-e^2}{2a} (\xi^2 - 2\xi) \quad (۷-۹۹)$$

در خواهد آمد . این انتگرال وقتی کمینه است که

$$\left. \frac{\partial I}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_0} = \frac{-e^2}{2a} (2\xi_0 - 2) = 0 \quad \text{یا} \quad \xi_0 = 1$$

انرژی وردشی عبات است از

$$I_{\min} = \frac{-e^2}{2a} = \varepsilon_1$$

که با (۷-۹۷) یکسان است . اینجا موردی است که تابع آزمایشی با ویژه تابع دقیق سازگار است . روش وردشی ، وقتی  $\xi_0 = 1$  باشد ، منجر به یک مقدار کمینه برای انرژی می شود . این تابع وردشی و انرژی وردشی نمایشگر جواب دقیق هستند . اگر یک تابع آزمایشی بهنجار شده (با یک پارامتر) به شکل

$$\psi_{\text{trial}}(r, \xi) = \left(\frac{\xi^5}{3\pi a^5}\right)^{1/2} r e^{-\xi r/a} \quad (۷-۱۰۰)$$

انتخاب کرده بودیم ، انتگرال وردشی مشابه (۷-۹۹) می شد

$$I_{\text{var}}(\xi) = \frac{-e^2}{2a} \left( \xi - \frac{\xi^2}{3} \right)$$

مقدار کمینه در  $\xi_0 = \frac{3}{2}$  رخ می دهد که در آن  $I$  مقدار

$$\varepsilon_{\text{var}} = I_{\min} = \frac{-e^2}{2a} \left( \frac{3}{2} - \frac{1}{3} \left(\frac{3}{2}\right)^2 \right) = \frac{-3}{4} \frac{e^2}{2a} = 0.75\varepsilon_1 \quad (۷-۱۰۱)$$

را می گیرد و ۲۵ درصد خطا ایجاد می کند . چون  $\varepsilon_1$  منفی است ، نتیجه می گیریم  $\varepsilon_{\text{var}} > \varepsilon_1$  ،

همان چیزی که لم فوق ایجاب می‌کند. تابع وردشی در (۷-۱۰۰) خواهد شد

$$\psi_{\text{var}}(r, \zeta) = \left[ \frac{(\frac{3}{2})^5}{3\pi a^5} \right]^{1/2} r e^{-3r/2a}$$

بالاخره، تابع آزمایشی

$$\psi_{\text{trial}}(r, \zeta) = \frac{1}{\pi a^{3/2}} \sqrt{\xi} \frac{1}{[\xi^2 + (r/a)^2]} \quad (7-102)$$

را در نظر می‌گیریم. انتگرال وردشی در این مورد می‌دهد

$$I_{\text{var}}(\xi) = \frac{-e^2}{2a} \left[ \frac{8\xi - \pi}{2\pi\xi^2} \right] \quad (7-103)$$

مشتق‌گیری نشان می‌دهد که  $\xi_0 = \pi/4$  و

$$I_{\text{min}} = \frac{8\varepsilon_1}{\pi^2} \simeq 0.8\varepsilon_1 \quad (7-104)$$

این بالغ بر ۲۰ درصد خطا می‌شود. جالب است که تابع آزمایشی به ظاهر ضعیفتر (۷-۱۰۲) عملاً منجر به انرژی کمتر و در نتیجه درست‌تر از تابع موجود در (۷-۱۰۰) می‌شود. روش وردشی بخصوص وقتی که انرژیهای دقیق حالت پایه مورد نیازاند مفید است. ارزیابی دقت تابع آزمایشی متناظر مشکل است و اعتبار آن باید به درستی مورد سؤال قرار گیرد. روش فوق با قدری اصلاح می‌تواند به حالت‌های پراکنده نیز اعمال شود، اما ما در اینجا این کار را نخواهیم کرد. در بحث‌هایی که از اتم‌های چندالکترونی خواهیم داشت (فصل ۱۰) فرصت خواهیم یافت که روش وردشی را به کار ببریم.

زمان و فضا اجازه توصیف تمام روش‌های تقریبی را به ما نمی‌دهد. در بین آن‌ها روش‌هایی عددی وجود دارند که در عصر کامپیوتر بیشتر رواج یافته‌اند. یک روش تحلیلی مهم که در بحث ما فراموش شده است تقریب "انتگرال فاز" یا تقریب و ننتزل - کرامرز - بریلوئن (WKB) است. بحث مختصر این روش در پیوست (الف) آورده شده است.

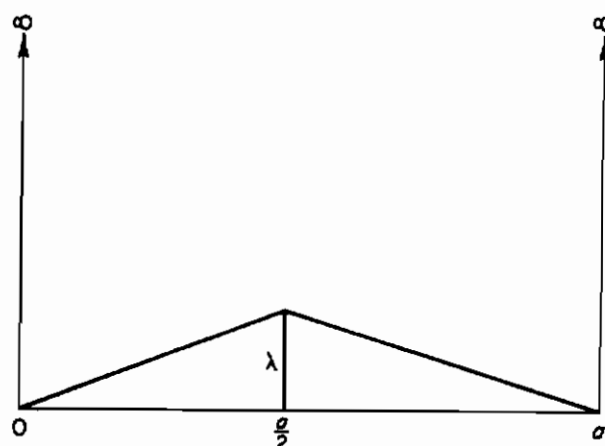
## مسائل

۱-۷ انرژی حالت پایه را، تا تقریب مرتبه اول، برای ذره‌ای واقع در یک چاه یک بعدی پیریشیده (شکل ۶-۷) زیر پیدا کنید

$$V = \frac{2\lambda}{a}x \quad , \quad 0 \leq x \leq \frac{1}{2}a \quad \text{برای}$$

$$V = 2\lambda\left(1 - \frac{x}{a}\right) \quad , \quad \frac{1}{2}a < x \leq a \quad \text{برای}$$

$$V = \infty \quad \text{جاهای دیگر}$$



شکل (۶-۷)

۲-۷ (الف) ویژه مقدارهای تقریبی انرژی (تا تقریب مرتبه دوم) ذره‌ای را که در پتانسیل  $V = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 + \lambda x$  قرار دارد پیدا کنید.

(ب) این مسئله را با تکمیل کردن مربع در پتانسیل و تغییر متغیر مستقل، به‌طور دقیق حل کنید. نتیجه را با نتیجه فوق مقایسه کنید.

۳-۷ انرژی تقریبی حالت پایه یک ذره در پتانسیل  $V = \frac{1}{2}m\omega x^2 + \lambda x^3$  را پیدا کنید.

۴-۷ روابط (۲۴-۷) و (۲۵-۷) را برای به‌دست آوردن فرمولی برای تصحیحات مرتبه سوم ویژه مقدارهای انرژی به‌کار ببرید.

۵-۷ (الف) نشان دهید که گشتاور دوقطبی الکتریکی هیدروژن در حالت پایه ناپیریشیده  $|100\rangle$  صفر است.

(ب) نشان دهید که گشتاور دوقطبی وابسته به حالت‌های برانگیخته اول  $|2^\pm\rangle$

[ که به وسیله (۷-۴۵) داده شده اند ] عبارت است از  $p = \mp 3ea$  و در امتداد محور  $z$  قرار دارد. آیا این گشتاور دائمی است یا القائی؟ توضیح دهید.

۶-۷ معادله‌ای برای پیدا کردن جابه‌جایی اثر استارک در چند تراز اول هیدروژن برای یک میدان ضعیف  $E$  بسازید (راهنمایی: جملات ساختار ریز را به عنوان پیریشیدگی غالب، همان‌طور که در اثر غیرعادی زمین انجام شد، به کار ببرید. سپس، فرض کنید که  $\psi_{nljm_l}$  یک مجموعه ناپیریشیده با انرژی ناپیریشیده‌ای که فقط تابع  $n$  و  $l$  است باشد. بالاخره ماتریس پیریشیدگی وابسته به میدان  $E$  نسبت به حالت‌های با  $l$  و  $m_l$  متفاوت را بسازید و قطری کنید.)

۷-۷ (الف) یک ذره بدون اسپین را در یک چاه مربعی دوبعدی

$$V = 0 \quad (0 \leq x, y \leq a)$$

$$V = \infty \quad (\text{جاهای دیگر})$$

در نظر بگیرید. انرژی‌ها و ویژه تابع‌های حالت‌های پایه و برانگیخته‌ای را که در تفکیک متغیرها در مختصات دکارتی ظاهر می‌شوند به دست آورید.  
(ب) سپس فرض کنید که یک پیریشیدگی به شکل

$$V = \lambda xy \quad , \quad 0 \leq x, y \leq a \quad \text{برای}$$

اضافه می‌شود. ویژه تابع‌های ناپیریشیده و جابه‌جایی‌های مرتبه اول انرژی را برای حالت پایه و حالت‌های برانگیخته اول پیدا کنید.

۸-۷ رابطه  $[\hat{L} \cdot \hat{S}, \hat{J}_z] = 0$  را تحقیق کنید.

۹-۷ با استفاده از نتایج (۶-۲۴)، مستقیماً نشان دهید که (۷-۵۶) درست است.

۱۰-۷ با انتگرال‌گیری ساده کردن نشان دهید که (۷-۶۸) از معادله پیشین به دست می‌آید.

۱۱-۷ در روی یک دیاگرام تراز (شامل آثار ساختار ریز) برای هیدروژن، چند گذار مجاز اول را در تقریب دو قطبی الکتریکی نشان دهید.

۱۲-۷ (الف) ثابت بهنجارش را برای تابع آزمایشی

$$\psi(\xi, r) = Ne^{-\xi(r/a)^2} \quad (a = \hbar^2/me^2)$$

که در آن  $\xi$  یک پارامتر وردشی است، پیدا کنید.

(ب) این تابع را برای پیدا کردن حد بالای انرژی حالت پایه هیدروژن به کار ببرید.

(ج) نتیجه مقایسه این انرژی با مقدار دقیق آن چیست؟ (توجه کنید که این تابع

آزمایشی اصولاً ویژه تابع حالت پایه نوسانگر هماهنگ است .

۱۳-۷ نشان دهید که عناصر ماتریسی  $\langle nlm_l m_s | \hat{x} | n'l'm_l' m_s' \rangle$  و

$\langle nlm_l m_s | \hat{y} | n'l'm_l' m_s' \rangle$  تنها در صورتی غیر صفرند که داشته باشیم  $\Delta l = l - l' = \pm 1$  ،

$$\Delta m_s = m_s' - m_s = 0 \quad \text{و} \quad \Delta m_l = m_l - m_l' = \pm 1$$

۱۴-۷ یک الکترون هیدروژنی (با صرف نظر کردن از اسپین) را در یک میدان الکتریکی یکنواخت

در امتداد محور  $z$  در نظر بگیرید .

(الف) با استفاده از (۷-۴۱) ، معادله ویژه مقداری انرژی را برای الکترون در مختصات

قطبی  $\lambda = eE$  بنویسید . قرار دهید  $\lambda = eE$  .

(ب) تحقیق کنید که تابع

$$\psi = \left( \frac{1}{\pi a^3} \right)^{1/2} e^{-r/a} \left[ 1 - \frac{\lambda \cos \theta}{e^2} \left( ar + \frac{r^2}{2} \right) \right]$$

(که در آن  $a = \hbar^2 / me^2$  است) معرف تقریب مرتبه اول ویژه تابع حالت پایه اتم

هیدروژن است . این کار را مستقیماً با قراردادن نتیجه در معادله به دست آمده در

بخش (الف) انجام دهید . ویژه مقدار درست تا مرتبه اول را پیدا کنید (راهنمایی :

از جملات  $\lambda^2$  و بالاتر صرف نظر کنید)

(ج) با استفاده از (۷-۲۵) ، نشان دهید که تصحیح مرتبه دوم انرژی عبارت است

از

$$\lambda^2 \varepsilon^{(2)} = -\frac{9}{4} a^3 E^2$$

(د) انرژی وابسته به یک گشتاور دو قطبی الکتریکی القائی یک سیستم به صورت

$$\varepsilon = -\frac{1}{2} \alpha E^2$$

بیان شود می شود که در آن  $\alpha$  قطبش پذیری سیستم نامیده می شود . نشان دهید که

قطبش پذیری اتم هیدروژن در حالت پایه اش عبارت است از

$$\alpha = \frac{9}{2} a^3$$

### مراجع پیشنهادی

- Bethe, H. A., and Salpeter, E., "Quantum Mechanics of One and Two Electron Atoms." Springer-Verlag, Berlin, 1957.
- Bohm, D., "Quantum Theory." Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1951.
- Borowitz, S., "Fundamentals of Quantum Mechanics," Benjamin, New York, 1967.
- Eisberg, R. M., "Fundamentals of Modern Physics." Wiley, New York, 1961.
- Merzbacher, E., "Quantum Mechanics." 2nd ed. Wiley, New York, 1970.
- Messiah, A. "Quantum Mechanics," Volume II. Wiley, New York, 1962.
- Saxon, D., "Elementary Quantum Mechanics." Holden-Day, San Francisco, 1964.







## نظریه پراکندگی

در تمام طول گسترش فیزیک جدید، فیزیکدانها به دنبال درک برهم کنشهای اساسی طبیعت بودند. بیشتر دانش ما از این برهم کنشها را آزمایشهای پراکندگی فراهم ساخته‌اند. در این فصل، مکانیک کوانتومی فرایند پراکندگی را مورد بررسی قرار خواهیم داد. مطلب را با یادآوری مختصر نظریه کلاسیکی پراکندگی شروع می‌کنیم.

### ۱ - نظریه کلاسیکی پراکندگی

یک آزمایش نمونه‌ای پراکندگی مشاهده مسیرهای اولیه و نهایی ذراتی است که تحت تأثیر یک نیرو - غالباً یک نیروی مرکزی - حرکت می‌کنند. در فیزیک اتمی و هسته‌ای یک باریکه از ذرات روی یک مرکز نیرو می‌تابد و سپس پراکنده می‌شود. هر ذره باریکه تحت زاویه‌ای که بستگی به انرژی و تکانه اولیه آن و هم چنین طبیعت مرکز نیرو دارد منحرف می‌شود. ما بحث خود را به مسائلی محدود می‌کنیم که در آنها انرژی ذره در فرایند پراکندگی پایسته می‌ماند (پراکندگی کشسان).

پتانسیل نیروی مرکزی به شکل  $V(\mathbf{r}) = V(r)$  است، در نتیجه مناسب است که از مختصات قطبی  $\theta$  و  $\phi$  که مرکز نیرو در مبداء آن است استفاده کنیم و جهت فرود را منطبق بر جهت  $\theta = 0$ ، معمولاً "جهت محور  $z$ "، انتخاب کنیم. جهت پراکندگی به وسیله زوایای قطبی و سمتی  $\theta$  و  $\phi$  مشخص می‌شود. باریکه فرودی به وسیله انرژی  $\epsilon$  و چگالی شار یا شدت  $J$  آن مشخص می‌شود. تعداد ذرات پراکنده شده (در واحد زمان) در داخل زاویه حجمی  $d\Omega$  در اطراف زوایای  $\theta$  و  $\phi$  هم با  $J$  و هم با  $d\Omega$  متناسب است، و می‌توان نوشت  $dN \propto J d\Omega$ .

ثابت تناسب تابعی است از  $\theta$  و  $\phi$  و موسوم است به مقطع موثر دیفرانسیلی، یعنی،

$$dN = \sigma(\theta, \phi) J d\Omega$$

یا

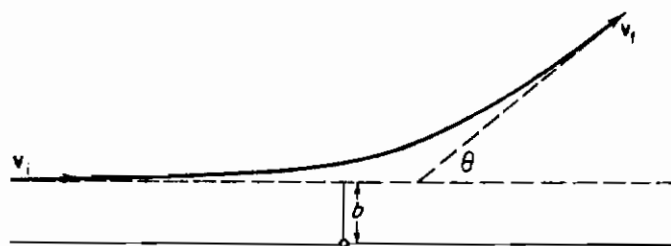
$$\sigma(\theta, \phi) = \frac{1}{J} \frac{dN}{d\Omega} \quad (۱-۸)$$

برای نیروی مرکزی پراکننده، تقارن ایجاب می‌کند که مقطع موثر مستقل از زاویه سمتی باشد. بنابراین پراکندگی نسبت به جهت تابش (محور  $z$ ) متقارن است. مناسب است که تعداد کل ذرات پراکنده شده (در واحد زمان) را محاسبه کنیم. این کار با انتگرال گیری (۱-۸) روی یک زاویه حجمی کامل انجام می‌گیرد

$$N = J \int_{4\pi} \sigma(\theta, \phi) d\Omega = J \sigma_T \quad (۲-۸)$$

انتگرال فوق مقطع موثر کل را، که عبارت از مساحت موثر پراکننده است که به وسیلهٔ باریکه دیده می‌شود، به دست می‌دهد.

در آنچه در زیر می‌آید بحث خود را به پراکننده‌های با نیروی مرکزی محدود می‌کنیم. برای محاسبه مقطع موثر  $\sigma(\theta)$ ، باید نخست زاویه پراکندگی را برای هر ذره باریکه بدانیم. مسیر یک ذره در شکل (۱-۸) رسم شده است.

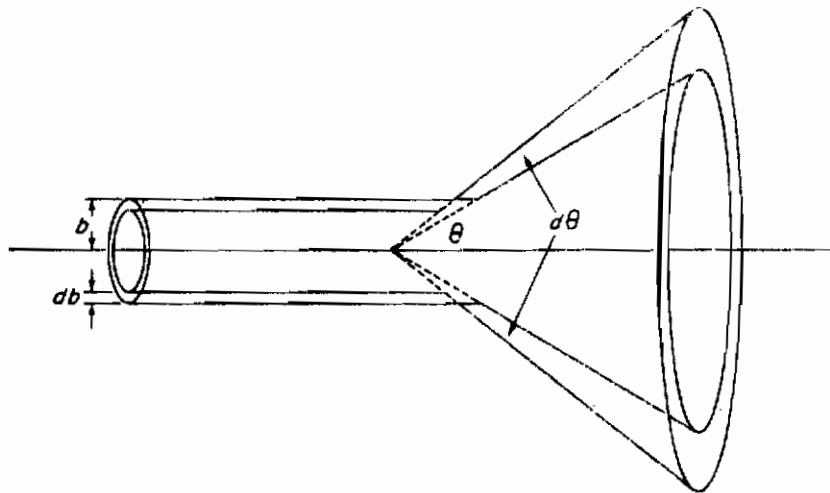


شکل (۱-۸) یک مسیر پراکندگی نمونه‌ای که سرعت‌های اولیه و نهایی، پارامتر برخورد و زاویه پراکندگی را نشان می‌دهد.

برای یک انرژی معین، زاویه پراکندگی به پارامتر برخورد  $b$  بستگی دارد. این پارامتر با فاصله عمودی مرکز نیرو از امتداد سرعت اولیه  $v_i$  (شکل ۱-۸) تعریف شده است. معادله  $b = b(\theta)$ ، که پارامتر برخورد را به زاویه پراکندگی ربط می‌دهد، باید قبل از اینکه هرگونه پیشگویی در باره مقطع موثر بتواند صورت گیرد از مسیر ذره محاسبه شود. در بیشتر مسائل

پراکندگی، زاویه پراکندگی با افزایش  $b$  به سرعت کاهش می‌یابد. تعداد ذرات پراکنده شده در داخل یک زاویه حجمی بین  $\theta$  و  $\theta + d\theta$  باید با تعداد ذراتی که در باریکه فرودی در حلقه‌ای به شعاع  $b$  و ضخامت  $db$  حول محور  $z$  قرار دارند برابر باشد (شکل ۸-۲). این تعداد عبارت است از

$$dN = J dA = J 2\pi b db = J 2\pi b \frac{db}{d\Omega} d\Omega$$



شکل (۸-۲) پراکندگی ذرات از یک حلقه دیفرانسیلی در داخل یک زاویه حجمی دیفرانسیلی

با استفاده از (۸-۱)، مقطع موثر به صورت

$$\sigma(\theta) = 2\pi b \frac{db}{d\Omega}$$

در می‌آید. این عبارت، با استفاده از\*

$$d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$$

به صورت

$$\sigma(\theta) = \frac{-b(\theta)}{\sin \theta} \frac{db(\theta)}{d\theta} \quad (۸-۳)$$

\* چون  $b$  با کاهش  $\theta$  افزایش می‌یابد،  $db/d\theta$  منفی است، از این رو یک علامت منفی در (۸-۳) وارد کرده‌ایم تا مقطع موثر مثبت بماند.

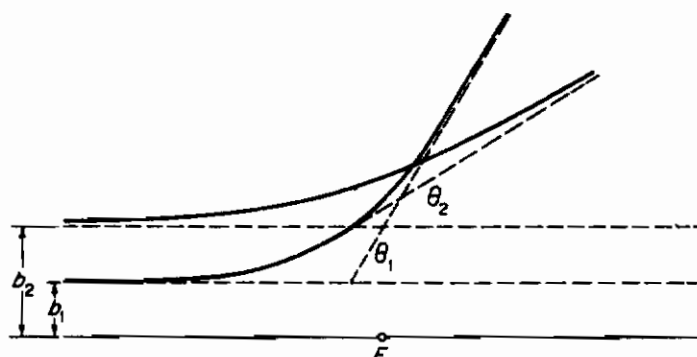
در می‌آید. وقتی  $b = b(\theta)$  معلوم شد، مقطع موثر می‌تواند مستقیماً محاسبه شود. این روش را با به‌کاربردن آن در مورد نیروی دافعه کولنی (پراکندگی راترفورد) روشن می‌کنیم. فرض می‌کنیم که پرتابه و هدف به ترتیب دارای بارهای  $Ze$  و  $Z'e$  باشند. پتانسیل دافعه عبارت است از

$$V = \frac{ZZ'e^2}{r}$$

مسیر پرتابه همیشه یک شاخه هذلولی است (شکل ۳-۸) که مرکز نیرو (هدف) در کانون بیرونی آن قرار دارد. بدون اثبات بیان می‌کنیم که رابطه بین  $b$  و  $\theta$  عبارت است از\*

$$b = \frac{ZZ'e^2}{2\varepsilon} \cot\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

که در آن  $\varepsilon$  انرژی پرتابه است.



شکل (۳-۸) دو مسیر هذلولی شکل با پارامترهای برخورد متفاوت در پراکندگی کولنی

با استفاده از (۳-۸)، مقطع موثر کلاسیکی راترفورد به صورت

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{ZZ'e^2}{4\varepsilon}\right)^2 \sin^{-4} \frac{\theta}{2} \quad (۴-۸)$$

\* به عنوان مثال، به کتاب زیر مراجعه کنید.

J, B. Marion " Classical Dynamics of Particles and Systemes" 2nd ed. Academic Press, New York, 1970.

به دست می آید .

با انتگرال گیری ، نتیجه می گیریم که مقطع موثر کل راترفورد ، در واقع ، واگرا می شود ، یعنی ،

$$\sigma_T = \left( \frac{ZZ'e^2}{4\epsilon} \right)^2 \int \sin^{-4} \frac{\theta}{2} d\Omega = \left( \frac{ZZ'e^2}{4\epsilon} \right)^2 2\pi \int_0^\pi \sin^{-4} \frac{\theta}{2} (\sin \theta d\theta) \rightarrow \infty$$

انتگرال در حد پائین ،  $\theta \rightarrow 0$  ، یعنی ،  $b \rightarrow \infty$  ، واگرا می شود . این واگرایی به این واقعیت مربوط می شود که پتانسیل  $1/r$  خیلی بلند برد است ، در نتیجه ، حتی آن ذراتی که پارامتر برخورد آنها به بینهایت میل می کند پراکنده می شوند به طوریکه  $\sigma_T$  را واگرا می سازند . برای پتانسیلهای کوتاه بر دتر ،  $\sigma_T$  عموماً "متناهی" است .

بررسی مکانیک کوانتومی پراکندگی معمولاً "به یکی از دو روش زیر انجام می گیرد . روش نخست ، پراکندگی مانا ، مقطع موثر را از ویژه حالت های پیوسته پتانسیل پراکندگی به دست می آورد . این روش شبیه به روشی است که در مورد مسائل یک بعدی در فصل ۴ ، که در آن ضریب بازتاب  $\mathcal{R}$  مشابه پارامتر برخورد است ، به کار برده شد .

روش دوم ، پراکندگی دینامیکی ، تحول یک ویژه حالت تکانه را در حضور یک پریشیدگی پراکنده تجزیه و تحلیل می کند . همان طور که نشان خواهیم داد ، آهنگ گذار به ویژه حالت های دیگر تکانه مستقیماً "به مقطع موثر پراکندگی ارتباط پیدا می کند . هر چند که هر دو روش اساساً به مقطع موثرهای یکسانی منجر می شوند ، روش دینامیکی عمومی تر است . از یک نظر ، این روش مستقل از مکانیک موجی است . با این حال ، بحث خود را با روش های پراکندگی مانا شروع خواهیم کرد .

## ۲- نظریه کوانتومی مانای (حالت پابرجا) پراکندگی

در نظریه کلاسیکی ، قادر بودیم ارتباطی بین مسیرهای نامقید یک پرتابه و مقطع موثر پراکندگی متناظر برقرار کنیم . ارتباط مشابهی بین ویژه حالت های مربوط به مقادیر پیوسته انرژی یک پتانسیل و مقطع موثر پراکندگی کوانتومی متناظر وجود دارد . بنابراین به آنچه که حالت های پراکندگی معادله شرودینگر

$$\left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right\} \psi = \epsilon \psi \quad (5-8)$$

نامیده می‌شود خواهیم پرداخت. فرض می‌شود که  $V(r)$  برای مقادیر بزرگ  $|r|$  به سمت صفر میل می‌کند. چون ویژه تابعهای پراکندگی حالت‌های نامقید را نشان می‌دهند، نمی‌توانیم بخواهیم که در بینهایت صفر شوند. ولی، می‌توانیم چند شرط جانبی که با شرایط تجربی سازگار باشند تحمیل نمائیم.

در آزمایشهای پراکندگی، ناحیه مورد توجه دور از هدف واقع است. در این ناحیه مجانبی، انتظار داریم یک شار فرودی مربوط به یک موج تخت که در امتداد محور  $z$  حرکت می‌کند، یعنی،  $e^{ikz}$ ، و یک شار پراکنده شده وابسته به یک موج کروی خروجی، یعنی،  $f(\theta, \phi)e^{ikr}/r$  وجود داشته باشد. این جوابها مربوط به ذرات آزاد با انرژی  $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m$  می‌باشند. بنابراین شرط مجانبی

$$\psi \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{ikz} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad \left( k = \left( \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} \right)^{1/2} \right) \quad (8-6)$$

را به جوابهای معادله شرودینگر (۵-۸) تحمیل می‌کنیم. اثبات اینکه جوابی با این شکل مجانبی وجود دارد به شرط اینکه پتانسیل خیلی بلند برد نباشد، مشکل نیست. در زیر نشان خواهیم داد که پتانسیل کولنی، با برد بلندش، دارای جوابی با شکل مجانبی خواسته شده نیست. با این وجود، جوابی دارد که برای پیدا کردن مقطع موثر کولنی به قدر کافی به آن نزدیک است.

در حالی که برای یک  $\varepsilon$  معین، جوابهای زیادی برای (۵-۸) وجود دارد، مسئله ما پیدا کردن جوابی است که رفتار مجانبی آن مانند رفتار (۶-۸) باشد. این کار به آن سادگی که به نظر می‌رسد نیست. اما، وقتی  $\psi$  مطلوب پیدا شد و شکل مجانبی آن ایجاد گردید،  $f(\theta, \phi)$  می‌تواند مستقیماً به مقطع موثر ارتباط داده شود. برای انجام این کار، شار فرودی با استفاده از معادله شار (۳-۹۶)، از موج فرودی  $e^{ikz}$  به صورت زیر به دست می‌آید

$$J_{\text{inc}} = -\frac{i\hbar}{2m} \left[ (e^{ikz})^* \frac{\partial}{\partial z} e^{ikz} - e^{ikz} \frac{\partial}{\partial z} (e^{ikz})^* \right] = \frac{\hbar k}{m}$$

همین‌طور، شار پراکنده شده (شعاعی) از  $f(\theta, \phi)e^{ikr}/r$  با استفاده از معادله شار (۳-۹۶) به دست می‌آید

$$J_{\text{scat}} = -\frac{i\hbar}{2m} |f(\theta, \phi)|^2 \left[ \left( \frac{e^{ikr}}{r} \right)^* \frac{\partial}{\partial r} \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{ikr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{e^{ikr}}{r} \right)^* \right] = \frac{\hbar k}{m} \frac{|f(\theta, \phi)|^2}{r^2}$$

تعداد ذرات پراکنده شده در واحد زاویه حجمی عبارت است از

$$\frac{dN}{d\Omega} = J_{\text{scat}} r^2 = \frac{\hbar k}{m} |f(\theta, \phi)|^2$$

با تقسیم بر  $J_{\text{inc}} = \hbar k/m$  ، مقطع موثر به صورت زیر به دست می آید

$$\sigma(\theta, \phi) = \frac{1}{J_{\text{inc}}} \frac{dN}{d\Omega} = |f(\theta, \phi)|^2 \quad (۷-۸)$$

این رابطه دقیق است. ضریب مدولاسیون زاویه‌ای  $f(\theta, \phi)$  دامنه پراکندگی نامیده می‌شود. در جدول (۸-۱) یک مقایسه اجمالی بین روشهای کلاسیکی و کوانتومی پراکندگی انجام داده‌ایم.

#### جدول (۸-۱)

مقایسه‌ای بین روشهای کلاسیکی و کوانتومی محاسبات پراکندگی

نظریه کوانتومی	نظریه کلاسیکی
(الف) برای پیدا کردن ویژه تابع (پیوسته) یک ذره با شکل مجانبی خواسته شده در یک انرژی و پتانسیل پراکندگی داده شده، معادله شرودینگر را حل کنید.	(الف) برای پیدا کردن مسیر (نامقید) یک ذره، قوانین نیوتن را برای یک انرژی، پارامتر برخورد، و پتانسیل پراکندگی داده شده حل کنید.
(ب) از شکل مجانبی جواب (الف) دامنه پراکندگی $f(\theta, \phi)$ را پیدا کنید.	(ب) زاویه پراکندگی $\theta$ را بر حسب پارامتر برخورد $b$ پیدا کنید.
(ج) مقطع موثر را با استفاده از	(ج) مقطع موثر را با استفاده از
$\sigma(\theta, \phi) =  f(\theta, \phi) ^2$	$\sigma(\theta) = \frac{-b}{\sin \theta} \frac{db}{d\theta}$
محاسبه کنید	محاسبه کنید

نظریه فوق را به تحلیل مکانیک کوانتومی پراکندگی راترفورد اعمال خواهیم کرد.

## ۳- پراکندگی راترفورد (مورد کوانتومی)

مسئله کوانتومی راترفورد، مثل مشابه کلاسیکی اش، می تواند به طور دقیق حل شود. توجه خود را مستقیماً به حل مناسب معادله شرودینگر

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{K}{r}\right)\psi = \varepsilon\psi \quad (۸-۸)$$

یا

$$\left(-\nabla^2 + \frac{2mK}{\hbar^2 r}\right)\psi = k^2\psi$$

معطوف می کنیم که در آن

$$K = ZZ'e^2 \quad \text{و} \quad k = \left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\right)^{1/2}$$

این معادله، البته، در مختصات کروی تفکیک پذیر است. اما جوابهای حاصله شکل مجانبی خواسته شده را ندارند. البته می توانیم از ترکیبات خطی این ویژه تابعهای کروی تبهگن برای ساختن شکل مجانبی مناسب استفاده کنیم. با این همه، تفکیک متغیرها در (۸-۸) در مختصات سهموی ساده تر است. ویژه تابعهای سهموی به طور طبیعی با شرط مجانبی مورد نظر مطابقت می کنند.

تبدیلی که مختصات سهموی را به دست دهد عبارت است از\*

$$\xi = r(1 + \cos \theta) = r + z$$

$$\eta = r(1 - \cos \theta) = r - z$$

$$\phi = \phi = \tan^{-1} \frac{y}{x}.$$

ضرایب متریک، لاپلاسی و عنصر حجم در مختصات سهموی می توانند به ترتیب به صورت

زیر نوشته شوند

$$h_\xi = \left[\frac{(\eta + \xi)}{4\xi}\right]^{1/2}, \quad h_\eta = \left[\frac{(\eta + \xi)}{4\eta}\right]^{1/2}, \quad h_\phi = (\xi\eta)^{1/2}$$

$$\nabla^2 = \left\{ \frac{4}{\xi + \eta} \left[ \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \xi \frac{\partial}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \eta \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \right] + \frac{1}{\xi\eta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\}$$

\* تعریف و نمادگذاری مختصات سهموی در کتابهای مختلف تا حدودی متفاوت است.



و

$$dr = \frac{1}{4}(\xi + \eta) d\xi d\eta d\phi$$

با به کار بردن جوابی به شکل

$$\psi(\xi, \eta, \phi) = F(\xi)G(\eta)\Phi(\phi)$$

معادله (۸-۸) به معادلات دیفرانسیل معمولی زیر تجزیه می شود

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = -m_l^2 \Phi, \quad \frac{d}{d\xi} \left( \xi \frac{dF}{d\xi} \right) + \left( -\frac{m_l^2}{4\xi} + \frac{k^2}{4} \xi - \beta \right) F = 0$$

(۹-۸)

$$\frac{d}{d\eta} \left( \eta \frac{dG}{d\eta} \right) + \left( -\frac{m_l^2}{4\eta} + \frac{k^2}{4} \eta + \beta - \frac{Km}{\hbar^2} \right) G = 0$$

که در آنها  $m_l$  و  $\beta$  ثابتهای تفکیک هستند.

حاصل ضربهای جوابهای این معادلات دیفرانسیل بدون توجه به مقادیر  $m_l$  و  $\beta$ ، منجر به جوابهای معادله شرودینگر (۸-۸) می شوند. سعی ما براین است که  $m_l$  و  $\beta$  را طوری انتخاب کنیم که  $\psi$  شکل مجانبی موردنظر

$$\psi \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

را بگیرد. عدم حضور  $\phi$  در دامنه پراکندگی نتیجه ای از خاصیت مرکزی بودن پتانسیل کولنی است.

جواب معادله  $\phi$  در (۹-۸) عبارت است از  $\Phi = e^{im_l\phi}$ . اما چون شکل مجانبی مستقل از زاویه سمتی است، جواب دقیق نمی تواند شامل  $\phi$  باشد. بنابراین ثابت تفکیک را  $m_l = 0$  انتخاب می کنیم به طوری که  $\Phi \equiv 1$ . در این صورت جواب به شکل

$$\psi(\xi, \eta) = F(\xi)G(\eta)$$

در می آید که در آن  $F$  و  $G$  جوابهای معادلات

$$\frac{d}{d\xi} \left( \xi \frac{dF}{d\xi} \right) + \left( \frac{k^2}{4} \xi - \beta \right) F = 0 \quad (۱۰-۸ \text{ الف})$$

۹

$$\frac{d}{d\eta} \left( \eta \frac{dG}{d\eta} \right) + \left( \frac{k^2}{4} \eta + \beta - \frac{Km}{\hbar^2} \right) G = 0 \quad \left( k = \left( \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} \right)^{1/2} \right) \quad (۱۰-۸ \text{ ب})$$

هستند. شکل مجانبی مطلوب می‌تواند در مختصات سهموی به صورت زیر بیان شود\*

$$\begin{aligned} \psi(\xi, \eta)_{r-z \approx \eta \rightarrow \infty} &\sim e^{ikz} + f \frac{e^{ikr}}{r} = e^{ikz} \left( 1 + \frac{f e^{ik(r-z)}}{r} \right) \\ &= e^{ik(\xi-\eta)/2} \left( 1 + \frac{f e^{ik\eta}}{r} \right) \quad (۱۱-۸) \end{aligned}$$

از معادله (۱۱-۸) استنباط می‌شود که جواب دقیق باید به شکل

$$\psi(\xi, \eta) = e^{ik(\xi-\eta)/2} W(\eta) = e^{ik\xi/2} e^{-ik\eta/2} W(\eta)$$

باشد که در آن

$$W(\eta)_{\eta \rightarrow \infty} \sim \left( 1 + \frac{f e^{ik\eta}}{r} \right)$$

با قراردادن  $F(\xi) = e^{ik\xi/2}$  در (۱۰-۸ الف)، نتیجه می‌گیریم  $\beta = \frac{1}{2}ik$ . با استفاده از این انتخاب برای ثابت تفکیک  $\beta$  و قراردادن  $G(\eta) = e^{-ik\eta/2} W(\eta)$  در (۱۰-۸ ب)، نتیجه می‌گیریم

$$\eta \frac{d^2 W(\eta)}{d\eta^2} + (1 - ik\eta) \frac{dW(\eta)}{d\eta} - \gamma W(\eta) = 0 \quad (۱۲-۸)$$

که در آن  $\gamma = Km/\hbar^2 k$ .

معادله (۱۲-۸) همان معادله ابر هندسی است، که قبلاً در فصل ۵ مورد بحث قرار

\* چون، بنا به تعریف، باریکه پراکنده شده در خارج از محور فرودی ( $z$ ) مشاهده می‌شود، (یعنی،  $r > z$ )، حد مجانبی می‌تواند به جای  $r \rightarrow \infty$  به صورت  $r \rightarrow \infty$  ( $r - z$ ) نوشته شود.

گرفته است. جوابی که در مبداء (  $\eta = 0$  ) خوشرفتار باشد سری ابر هندسی نامیده شده و با  $F(-i\gamma|1|ik\eta)$  نمایش داده می شود. بالاخره، جواب کلی می تواند به صورت

$$\psi(\xi, \eta) = N e^{ik(\xi-\eta)/2} F(-i\gamma|1|ik\eta) \quad (۱۳-۸)$$

نوشته شود. برای سهولت، ثابت ضربی  $N$  را به صورت \*

$$N = \frac{\Gamma(1+i\gamma)}{e^{\pi\gamma/2}}$$

انتخاب خواهیم کرد.

معادله (۱۳-۸) جواب دقیقی از معادله شرودینگر است که به طور رضایت بخشی دارای شکل مجانبی مناسب است. با استفاده از روشهای تا اندازه ای پیشرفته ریاضی می توان نشان داد که شکل مجانبی (۱۳-۸) عبارت است از

$$\psi \underset{\eta \rightarrow \infty}{\sim} \exp i[kz + \gamma \ln kr(1 - \cos \theta)] + f(\theta) \frac{\exp[i(kr - \gamma \ln 2kr)]}{r}$$

که در آن

$$f(\theta) = \frac{-\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)} \frac{\gamma}{k} \frac{\exp[-i\gamma \ln \sin^2 \theta/2]}{2 \sin^2 \theta/2} \quad (۱۴-۸)$$

به نظر می آید که در اثر کوششمان، (۱۴-۸) تا آنجا که ممکن است به شکل مجانبی مناسب نزدیک است. جمله های فاز لگاریتمی در توانهای موجهای فرودی و پراکنده شده بهیانه تغییر شکلهائی هستند که مشخصه پتانسیل بلندبرد کولنی است. این تغییرشکلهادر جوابهای مجانبی برای پتانسیلهای کوتاه برد برطرف می شوند. خوشبختانه، جملات لگاریتمی هیچ اشکالی ایجاد نمی کنند زیرا سریع تر از جملات خطی در توان (۱۴-۸) به سمت صفر میل می کنند. سهم آنها در شارهای مجانبی را می توان نادیده گرفت و مقطع موثر را با استفاده از

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{\gamma^2}{4k^2 \sin^4 \theta/2} \left| \frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)} \right|^2$$

---

\* تابع گاما به صورت  $\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t} dt$  تعریف شده است.

محاسبه کرد. چون  $|\Gamma(1 + i\gamma)| = |\Gamma(1 - i\gamma)|$  ، بالاخره داریم

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{\gamma^2}{4k^2}\right) \sin^{-4} \frac{\theta}{2} = \left(\frac{K}{4\varepsilon}\right)^2 \sin^{-4} \frac{\theta}{2} = \left(\frac{ZZ'e^2}{4\varepsilon}\right)^2 \sin^{-4} \frac{\theta}{2} \quad (۱۵-۸)$$

از مقایسه این نتیجه با (۸-۴) مشاهده می‌کنیم که مقطع موثرهای کلاسیکی و کوانتومی راترفورد یکسان‌اند. این یکسانی باید تصادفی تلقی شود. مقطع موثرهای مکانیک کوانتومی برای سایر پتانسیلهای "خوش‌رفتار" معمولاً شامل  $\hbar$  هستند و بنابراین با همتای کلاسیکی خود تفاوت دارند.

در عمل، فرمول راترفورد به‌ندرت مشاهده می‌شود زیرا پتانسیل کولنی به‌وسیله عواملی کمکی تعدیل می‌شود. در آزمایش اصلی راترفورد که پراکندگی ذرات  $\alpha$  از هسته‌های طلا را شامل می‌شد، انحرافهایی از پتانسیل کولنی خالص در  $r \sim 0$  (ساختار هسته‌ای) و  $r \sim \infty$  (پوشش توسط الکترونهای اتمهای طلا) رخ داد.

همان‌طور که در بالا دیدیم، پیدا کردن جوابی برای معادله شرودینگر با شکل مجانبی مناسب‌کار ساده‌ای نیست. برای پتانسیلهای پراکندگی پیچیده‌تر وابسته به نیروهای هسته‌ای، روشهای دیگر و احتمالاً "روشهای تقریبی لازم می‌شوند. دو روش را که عموماً در به‌دست آوردن مقطع‌های موثر به‌کار می‌روند بررسی خواهیم کرد. روش نخست، بسط بورن، وقتی قابل اعمال است که شدت  $\lambda$  ی پراکننده خیلی کوچک‌تر از انرژی فرودی باشد. در این حالت دامنه پراکندگی به‌صورت یک سری پریشیدگی شامل توانهای  $\lambda$  بیان می‌شود. این روش شبیه به‌روش رالی - شرودینگر است که برای حالت‌های مقید به‌کار می‌رود.

روش دوم، تحلیل موج جزئی، منجر به مجموعه‌ای از نوع دیگر می‌شود و به‌شرطی مفید است که پتانسیل کوتاه برد باشد. این روش کاملاً "مستقل از شدت پراکننده است. هم‌روش بورن و هم‌روش موج جزئی هردو مفید هستند؛ روش خاص به‌کار برده شده معمولاً "به‌انرژی باریکه فرودی و به‌طبیعت پتانسیل پراکندگی، مثلاً "شدت و برد آن، بستگی دارد.

#### ۴- بررسی پراکندگی مانا به‌روش پریشیدگی - سری بورن

توجه خود را به معادله شرودینگر برای یک پتانسیل پراکندگی  $\mathcal{P}$   $\lambda$ ، که پارامتر  $\lambda$  مشخص کننده شدت پراکننده است، معطوف می‌کنیم. معادله‌ای که باید حل شود عبارت است از

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \lambda V\right) \psi = \varepsilon \psi \quad (۱۶-۸)$$

که جواب آن باید در شرط مجانبی

$$\psi \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad \left( |\mathbf{k}| = k = \left( \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} \right)^{1/2} \right)$$

صدق کند. بردار تگانه فرودی،  $\mathbf{k}$ ، در امتداد محور  $z$  قرار دارد (یعنی،  $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = e^{ikz}$ ). شرط مجانبی تنها برای پتانسیلهائی ممکن است که سریع تر از  $1/r$  سقوط می‌کنند و بنابراین لازم است که پتانسیل در شرط

$$\lim_{r \rightarrow \infty} rV(r) \rightarrow 0$$

صدق کند.

اشکال حل معادله دیفرانسیل (۸-۱۶) این است که برای هر انرژی معین تعداد زیادی جوابهای تبهکن می‌تواند وجود داشته باشد. تنها جوابی را که شکل مجانبی مناسب را دارا باشد جستجوی می‌کنیم. برای بیرون کشیدن این جواب، بهتر است که (۸-۱۶) را به یک معادله انتگرالی که فقط ویژه تابع مورد نظر را به عنوان جواب قبول می‌کند، تبدیل کنیم. با قراردادن

$$u(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} \lambda V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r})$$

در (۸-۱۶) و جابه‌جا کردن جملات، معادله شرودینگر خواهد شد

$$(\nabla^2 + k^2)\psi = u \quad (۸-۱۷)$$

درواقع، معادله اصلی (۸-۱۶) یک معادله دیفرانسیل همگن است که در آن هر کدام از جملات شامل  $\psi$  است. اما، (۸-۱۷) اکنون یک معادله ناهمگن است که در آن  $u(\mathbf{r})$  به عنوان "چشمه" یا ناهمگنی در نظر گرفته می‌شود. جواب عمومی (۸-۱۷) ترکیب شده است از جواب عمومی معادله همگن  $(\nabla^2 + k^2)\psi_1 = 0$  به اضافه هر جواب خصوصی معادله کلی  $(\nabla^2 + k^2)\psi_2 = u$ . جواب عمومی عبارت است از  $\psi = \psi_1 + \psi_2$ .

چون  $\psi_1$  معرف موردی است که در آن  $u = 0$  (یا  $V = 0$ ) است، باید معرف موج تخت فرودی باشد. بنابراین قرار می‌دهیم  $\psi_1 = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ . سپس جواب خصوصی را به دست می‌آوریم و شرط

$$\psi_s \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (= \text{ موج کروی خروجی }) \quad (۱۸-۸)$$

را به آن تحمیل می‌کنیم. به بیان دیگر، انتظار داریم که جواب خصوصی معرف موج پراکنده شده باشد. جواب موردنظر به شکل

$$\psi = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \psi_s \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r}$$

درمی‌آید. ما مسئله را به پیدا کردن یک جواب خصوصی (۱۷-۸) که به طور مجانبی معرف یک موج کروی خروجی باشد تقلیل داده‌ایم.

فرض کنیم بتوانیم تابعی مثل  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  (تابع گرین) با خاصیت

$$(\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (۱۹-۸)$$

پیدا کنیم، در این صورت تابع

$$\psi_s(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') u(\mathbf{r}') \quad (۲۰-۸)$$

خود به خود جوابی از (۱۷-۸) است. با جایگذاری مستقیم تحقیق می‌شود که

$$\begin{aligned} (\nabla^2 + k^2)\psi_s &= \int d\mathbf{r}' (\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') u(\mathbf{r}') \\ &= \int d\mathbf{r}' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') u(\mathbf{r}') = u(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

بنابراین  $\psi_s$  واقعا یک جواب است.

در حالی که تعداد زیادی تابع گرین ممکن با خاصیت موجود در (۱۹-۸) وجود دارد، فقط یکی از آنها که شرط

$$\psi_s = \int d\mathbf{r}' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') u(\mathbf{r}') \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r}$$

را برآورده می‌کند مورد توجه ما است. می‌توان نشان داد که تابع گرین خاص

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{-1}{4\pi} \frac{e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (۲۱-۸)$$

تمام خواص موردنظر را در بردارد. همان طور که یک محاسبه مستقیم نشان می دهد (رک مسئله ۸-۶)، این تابع در (۷-۱۹) صدق می کند. اما خود ساختار آن برای  $r$  بزرگ ( $r \gg r'$ ) شکل مجانبی درخواست شده به وسیله (۸-۱۸) را تضمین می کند. با استفاده از (۸-۲۰) و (۸-۲۱)، بالاخره، یک معادله انتگرالی اساسی برای پراکندگی به صورت

$$\psi(r) = e^{ik \cdot r} - \frac{\lambda 2m}{4\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r}' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \psi(r') V(r') \quad (۸-۲۲)$$

خواهیم داشت.

در حالی که (۸-۲۲) در (۸-۱۶) صدق می کند، تنها به مفهوم صوری یک جواب است. معادله (۸-۲۲) به این جهت معادله انتگرالی نامیده می شود\* که تابع مجهول  $\psi$  در داخل انتگرال در طرف راست قرار گرفته است. موفق شده ایم که معادله دیفرانسیل را به یک معادله انتگرالی تبدیل کنیم. مزیت این تبدیل آن است که در حالی که معادله دیفرانسیل، برای یک  $\epsilon$  داده شده، جوابهای زیادی دارد، معادله انتگرالی تنها دارای جواب با شکل مجانبی مناسب است. متأسفانه، حل (۸-۲۲) معمولاً "مشکل تر از حل معادله دیفرانسیل همتای آن است".

یک روش که می تواند در حل (۸-۲۲) به کار رود به روش تکراری موسوم است. این روش منجر به یک جواب به صورت یک سری از توانهای  $\lambda$  (موسوم به سری بورن) می شود و وقتی معتبر است که  $\lambda$  آنقدر کوچک باشد که سری را همگرا کند. جواب مرتبه صفر ( $\lambda = 0$ ) آشکاراً عبارت است از  $\psi^{(0)} = e^{ik \cdot r}$  و بیانگر حالت پراکندگی صفر است. با قراردادن این جواب در انتگرال طرف راست (۸-۲۲)، جواب مرتبه اول  $\psi^{(1)}$  را به دست خواهیم آورد. جواب مرتبه  $n$  ام با استفاده از  $\psi^{(n-1)}$  به طریق مشابهی به دست می آید، یعنی،

$$\psi^{(n)}(r) = e^{ik \cdot r} - \frac{2m\lambda}{4\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r}' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \psi^{(n-1)}(r') V(r') \quad (۸-۲۳)$$

تقریب مرتبه  $n$  ام منجر به یک سری از توانهای  $\lambda$  می شود که بالاترین توان آن  $\lambda^n$  است. وقتی  $\psi^{(n)}$  پیدا شد، باید دارای شکل مجانبی

\* به طور دقیق تر، یک معادله فرد هلم<sup>۱</sup> از نوع دوم است.

$$\psi^{(n)} \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{ik \cdot r} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r}$$

باشد که در آن  $f(\theta, \phi) = \sum_{j=1}^n f^{(j)}(\theta, \phi)$  . در هر کدام از جملات سری بورن برای  $\psi^{(n)}$  جمله‌ای به نام دامنه مرتبه  $j$  ام بودن وجود دارد . مقطع موثر تا مرتبه  $n$  به وسیله

$$\sigma^{(n)} = \left| \sum_{j=1}^n f^{(j)} \right|^2$$

داده می‌شود . مقطع موثر دقیق در حد  $n \rightarrow \infty$  به دست می‌آید ، به شرط اینکه سری همگرا شود ، و می‌توانیم بنویسیم

$$\sigma_{\text{excl}} = \left| \sum_{j=1}^{\infty} f^{(j)} \right|^2 \quad (8-24)$$

۵- تقریب اول بورن

اگر  $\lambda$  به اندازه کافی کوچک باشد ، کافی است تنها جملاتی را که از یک بار تکرار (۸-۲۲) به دست می‌آیند نگه داریم ، یعنی

$$\psi^{(1)}(\mathbf{r}) = e^{ik \cdot \mathbf{r}} - \frac{m\lambda}{2\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r}' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') e^{ik \cdot \mathbf{r}'} \quad (8-25)$$

این جواب در همه جای فضا (برای  $\lambda$  ی کوچک) معتبر است . ولی ما فقط به آن دامنه پراکندگی علاقه مندیم که از شکل مجانبی به دست می‌آید . برای  $r$  بزرگ ، می‌توان بسط زیر را انجام داد

$$\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \underset{r \gg r'}{\sim} \frac{\exp[i(kr - k\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'/r)]}{r} = (e^{-ik \cdot \mathbf{r}'}) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (8-26)$$

عبارت  $\mathbf{k}' = k\mathbf{r}/r$  برداری است با بزرگی  $k$  که در امتداد شعاعی (پراکنده شده) قرار دارد . شکل مجانبی (۸-۲۵) خواهد شد

$$\psi^{(1)}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{ik \cdot \mathbf{r}} - \frac{m\lambda}{2\pi\hbar^2} \left[ \int d\mathbf{r}' e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \right] \frac{e^{ikr}}{r}$$



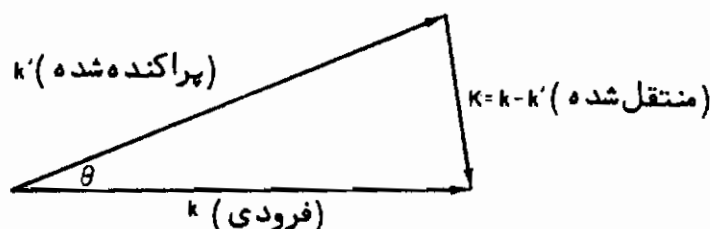
می‌توان قرار داد

$$f^{(1)}(\theta, \phi) = \frac{-m\lambda}{2\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r}' e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \quad (۲۷-۸)$$

را که در آن  $f^{(1)}(\theta, \phi)$  دامنه اول بورن نامیده می‌شود، در نظر گرفت. انتگرال می‌تواند به صورت

$$V(\mathbf{K}) = \int d\mathbf{r}' e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \quad (۲۸-۸)$$

نوشته شود که در آن  $\mathbf{K} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$  بردار انتقال تگانه نامیده می‌شود. مفهوم هندسی آن در شکل (۴-۸) نشان داده شده است. تابع  $V(\mathbf{K})$  تبدیل فوری  $V(\mathbf{r})$  است. مقطع موثر در تقریب



شکل (۴-۸) ارتباط بین بردارهای  $\mathbf{K}$ ،  $\mathbf{k}'$  و  $\mathbf{k}$  و زاویه پراکندگی  $\theta$ . توجه کنیم که برای پراکندگی کشسان،  $k = k'$ ، مثلث متساوی الساقین است.

اول بورن، اکنون می‌تواند به صورت

$$\sigma^{(1)}(\theta, \phi) = |f^{(1)}(\theta, \phi)|^2 = \left( \frac{-m\lambda}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |V(\mathbf{K})|^2 \quad (۲۹-۸)$$

نوشته شود. توجه کنیم که  $\sigma^{(1)}$  مستقل از علامت  $\lambda$  است و بنابراین برای پراکننده‌های جاذبه و دافعه یکسان است. در مرتبه‌های بالاتر علامت  $\lambda$  اهمیت پیدا می‌کند.

معادله (۲۹-۸) تقریب خوبی برای مقطع موثر است به شرطی که  $f^{(1)}(\theta, \phi)/r$  برای تمام مقادیر  $r$  کوچک باشد، یعنی،

$$\frac{|f^{(1)}|}{r} = \left| \frac{m\lambda}{2\pi\hbar^2} \frac{V(\mathbf{K})}{r} \right| \ll 1 \quad \text{معیار بورن}$$

این شرط برای اینکه سری بورن (۲۴-۸) همگرا باشد لازم است. به طور کاملاً عمومی این

شرط برای پتانسیلهای کوتاه برد، وقتی انرژی باریکه فرودی در مقایسه با قدرت پتانسیل پراکندگی بزرگ باشد، برقرار است\*. اما، تعیین میزان تحقق این شرط عموماً "خیلی مشکل است و بستگی به طبیعت خاص تابع پتانسیل پراکندگی دارد. زاویه پراکندگی  $\theta$  (یعنی، زاویه بین  $\mathbf{k}$  و  $\mathbf{k}'$ ) به طور ضمنی، همان طور که از رابطه

$$K^2 = |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2 = k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \theta$$

دیده می شود، در اندازه  $K$  نهفته است. چون پراکندگی کشان است (یعنی، انرژی پایسته است) قرار می دهیم  $k = k'$  و نتیجه می گیریم

$$K^2 = 2k^2(1 - \cos \theta) = 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad \text{یا} \quad K = 2k \sin \frac{\theta}{2} \quad (۳۰-۸)$$

تبدیل فوری پتانسیل نیروی مرکزی،  $V(r)$ ، می تواند با استفاده از مختصات قطبی کروی محاسبه شود.

با انتخاب  $K$  در امتداد محور  $z'$  (به منظور انتگرال گیری)، داریم

$$\begin{aligned} V(\mathbf{K}) &= \int d\mathbf{r}' e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}'} V(r') \\ &= 2\pi \int_0^\infty V(r') r'^2 dr' \int_{-1}^1 du' e^{iKr'u'} \quad (u' = \cos \theta') \\ &= \frac{4\pi}{K} \int_0^\infty \frac{V(r') \sin Kr'}{r'} r'^2 dr' \quad (۳۱-۸) \end{aligned}$$

مشاهده می کنیم که برای یک پتانسیل نیروی مرکزی،  $V(\mathbf{K})$  تنها تابعی از بزرگی  $K$  است، یعنی  $V(\mathbf{K}) = V(K)$ . چون  $|\mathbf{K}| = K$  فقط زاویه قطبی  $\theta$  را در بر دارد، نتیجه می شود که  $f^{(1)}$  و  $\sigma^{(1)}$ ، همان طور که انتظار می رفت، مستقل از  $\phi$  هستند. مقطع موثر اول بورن برای  $V(r)$  خواهد شد

\* برای انرژیهای بالا، معیار بورن می تواند به صورت زیر بیان شود

$$\frac{m\lambda^2 V_0^2 R^2}{2\hbar^2 \varepsilon} \ll 1$$

که در آن  $R$  برد موثر و  $\lambda V_0$  قدرت پتانسیل است. بنابراین وقتی تقریب بورن معتبر است که انرژی پراکندگی بزرگ و پتانسیل پراکندگی ضعیف و کوتاه برد باشد.

$$\sigma^{(1)}(\theta) = \left( -\frac{m\lambda}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \left| \frac{4\pi}{K} \int_0^\infty \frac{V(r') \sin Kr'}{r'} r'^2 dr' \right|^2 \quad (۸-۳۲)$$

چون پتانسیل کولنی با افزایش  $r$  به حد کافی سریع سقوط نمی‌کند، معادله انتگرالی (۸-۳۲) و سری بورن برای پراکندگی راترفورد مناسب نیستند. با این وجود، نتایج تقریب بورن در این مورد جالب است. تبدیل فوریه پتانسیل کولنی  $1/r$ ، با استفاده از (۸-۳۱)، عبارت است از\*

$$V(K) = \frac{4\pi}{K} \int_0^\infty \frac{1}{r'} \frac{\sin Kr'}{r'} r'^2 dr' = \frac{4\pi}{K^2}$$

مقطع موثر می‌شود

$$\sigma^{(1)}(\theta) = \left( -\frac{m\lambda}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \left| \frac{4\pi}{K^2} \right|^2 = \frac{4m^2\lambda^2}{\hbar^4 16k^4 \sin^4 \theta/2}$$

با قراردادن  $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m$  و  $\lambda = ZZ'e^2$ ، تقریب اول بورن می‌دهد

$$\sigma^{(1)}(\theta) = \left( \frac{ZZ'e^2}{4\varepsilon} \right)^2 \sin^{-4} \frac{\theta}{2}$$

که دقیقاً همان مقطع موثر کلاسیکی راترفورد است. این درست انطباق "تصادفی" دیگری با پتانسیل کولنی است.

تقریب بورن می‌تواند به‌طور مناسبی به پتانسیل مرکزی کوتاه بردتر اعمال شود. به‌عنوان مثال، در مورد پتانسیل گاوسی (شکل ۸-۵ الف)

$$V = \lambda \exp \left[ -\left( \frac{r}{R} \right)^2 \right]$$

تبدیل فوریه عبارت است از

\* این انتگرال معمولاً با استفاده از یک ضریب همگرایی به‌صورت زیر انجام می‌شود

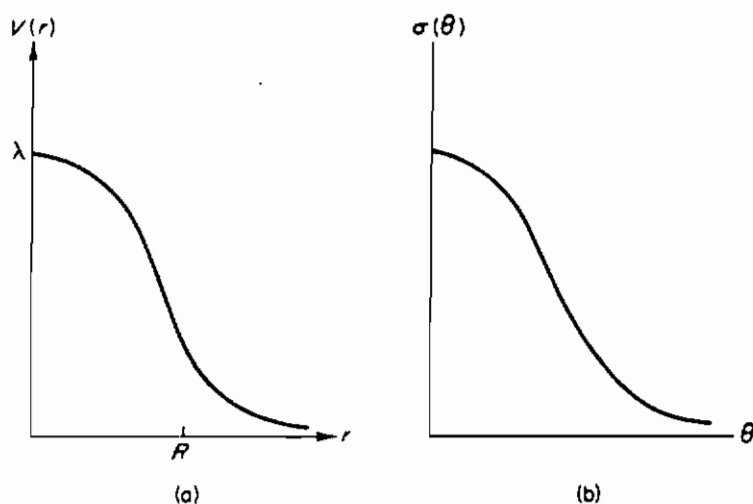
$$\int_0^\infty \sin Kr dr = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_0^\infty \sin Kr e^{-\alpha r} dr = \frac{1}{K}$$

$$V(K) = \int d\mathbf{r}' e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}'} e^{-(r'/R)^2} = (2\pi)^{3/2} R^3 e^{-K^2 R^2/2}$$

مقطع موثر بورن می شود (شکل ۸-۵ ب)

$$\begin{aligned} \sigma^{(1)}(\theta) &= \left( = \frac{m\lambda}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |V(K)|^2 = \frac{m^2\lambda^2}{4\pi^2\hbar^4} (2\pi)^3 R^6 e^{-K^2 R^2} \\ &= \frac{2\pi m^2\lambda^2}{\hbar^4} R^6 \exp\left(-4k^2 R^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}\right) \\ &= \frac{2\pi m^2\lambda^2}{\hbar^4} R^6 \exp\left[-\left(\frac{8m\varepsilon}{\hbar^2}\right) R^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}\right] \end{aligned}$$

توجه کنیم که انتظار می رود این مقطع موثر تنها وقتی درست باشد که  $\lambda$  کوچک و  $\varepsilon$  بزرگ باشد (معیار بورن).



شکل (۸-۵) منحنی (الف) یک پتانسیل دافعه گاوسی و (ب) مقطع موثر مکانیک کوانتومی آن در تقریب بورن

#### ۶- تقریبهای بالاتر بورن

اگر روش تکراری معادله انتگرالی (۸-۲۲) را ادامه دهیم، سری بورن را ایجاد خواهیم کرد و به مجموعه ای از دامنه های  $f^{(n)}$  بورن هدایت خواهیم شد که حاصل جمع آنها دامنه کل پراکندگی را به دست می دهد، یعنی،

$$f(\theta, \phi) = \sum_{j=1}^{\infty} f^{(j)}(\theta, \phi)$$

چند دامنه اول عبارتند از\*

$$\begin{aligned} f^{(1)} &= -\frac{2m\lambda}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = -\frac{m\lambda}{2\pi\hbar^2} V(\mathbf{K}) \\ f^{(2)} &= \left(\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{4\pi} \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{V(\mathbf{k} - \mathbf{k}'') V(\mathbf{k}'' - \mathbf{k}') d\mathbf{k}''}{(k''^2 - k^2)} \\ f^{(3)} &= -\left(\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\right)^3 \frac{1}{4\pi} \frac{1}{(2\pi)^6} \int \frac{V(\mathbf{k} - \mathbf{k}'') V(\mathbf{k}'' - \mathbf{k}''') V(\mathbf{k}''' - \mathbf{k}') d\mathbf{k}'' d\mathbf{k}'''}{(k''^2 - k^2)(k'''^2 - k^2)} \quad (۳۳-۸) \end{aligned}$$

وقتی  $\lambda \rightarrow 0$ ، دامنه‌های بالاتر بورن سهم کمتری در مقطع موثر دارند. برای هرپتانسیل کوتاه برد، سری بورن عموماً همگرا می‌شود به شرطی که هم  $\lambda$  کوچک و هم  $\varepsilon$  به اندازه کافی بزرگ باشد. در مورد پراکندگی الکترون از اتمها، انرژیهای پراکندگی درگیر معمولاً به خوبی در محدوده معیار بورن قرار دارند. اما، برای پراکندگی هسته‌ای انرژیها باید از 100 MeV به بالا باشند. چون در برخوردهای هسته‌ای غالباً انرژیهای پائین‌تر دخالت می‌کنند، معیار بورن نقض می‌شود و روشهای تحلیلی دیگری برای محاسبه مقطع موثرهای پراکندگی هسته‌ای مورد نیازند. یک چنین روشی تحلیل موج جزئی نامیده می‌شود. این روش عموماً مستقل از قدرت پراکندگی است و می‌تواند حتی به پراکنده‌های قوی اعمال شود به شرط آنکه برد پتانسیل کوتاه باشد. همان طور که خواهیم دید این روش برای انرژیهای فرودی پائین مفیدترین است.

## ۷- روش امواج جزئی

این روش نخستین بار توسط رالی در تجزیه و تحلیل او از پراکندگی صوت از موانع ارائه شد. بعداً توسط فاکسن<sup>(۱)</sup> و هولتزمارک<sup>(۲)</sup> به مسائل پراکندگی مکانیک کوانتومی اعمال شد.

\* در انتگرالدهای دامنه‌های (۳۳-۸) تکیگی‌هایی مربوط به نقاطی که در آنها مخرج صفر می‌شود، وجود دارد. بنابراین در محاسبه  $f^{(2)}$  و  $f^{(3)}$  ابهامهایی وارد می‌شود. این اشکال کوچک می‌تواند با جایگذاریهای  $(k^2 - k'^2) \rightarrow (k^2 - k'^2 + i\Delta)$ ،  $(k^2 - k''^2) \rightarrow (k^2 - k''^2 + i\Delta)$  و غیره در مخرجها و قراردادن  $\Delta \rightarrow 0$  بعد از اینکه انتگرال (منحنی الخط) محاسبه شد، رفع گردد.

مقطع موثر برای ذره بدون اسپین در یک پتانسیل نیروی مرکزی  $V(r)$  می تواند به آسانی از یک ویژه تابع انرژی  $\psi_\epsilon$  محاسبه شود به شرط اینکه:

(الف)  $\psi_\epsilon$  در معادله شرودینگر

$$\left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(r) \right\} \psi_\epsilon = \epsilon \psi_\epsilon \quad \left( rV(r) \rightarrow 0 \right. \\ \left. r \rightarrow \infty \right) \quad (۳۴-۸) \text{ (الف)}$$

صدق کند و

(ب)  $\psi_\epsilon$  دارای شکل مجانبی

$$\psi_\epsilon \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad \left( k = \left( \frac{2m\epsilon}{\hbar^2} \right)^{1/2} \right) \quad (۳۴-۸) \text{ (ب)}$$

باشد، چون در مختصات کروی کار خواهیم کرد بهتر است که از اتحاد (رک ۵-۵۹)

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} \equiv \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l P_l(\cos \theta) j_l(kr) \quad (۳۵-۸)$$

در (۳۴-۸) استفاده کنیم. تفکیک (۳۴-۸) در مختصات کروی نتیجه می دهد

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m_l=-l}^l a_{lm_l} Y_{lm_l}(\theta, \phi) R_{kl}(r)$$

که در آن  $R_{kl}$  جواب خوشرفتار معادله شعاعی زیر است

$$\left\{ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + \left[ k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \right\} R_{kl}(r) = 0 \quad \left( k = \left( \frac{2m\epsilon}{\hbar^2} \right)^{1/2} \right) \\ (۳۶-۸)$$

چون شکل مجانبی (۳۶-۸) باید مستقل از زاویه سمتی  $\phi$  باشد کافی است فقط جملاتی را نگاه داریم که در آنها  $m_l = 0$  است. بنابراین باید آن ضرایب  $a_l$  در جواب دقیق را پیدا کنیم که منجر به شکل مجانبی مناسب شود، یعنی

$$\sum_{l=0}^{\infty} a_l P_l(\cos \theta) R_{kl}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l P_l(\cos \theta) j_l(kr) + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (۳۷-۸)$$

جواب معادله شعاعی (۳۶-۸) وقتی  $V=0$  است به طور ساده عبارت است از  $j_l(kr)$ ؛ این جواب دارای شکل مجانبی

$$j_l(kr) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\sin(kr - \frac{1}{2}l\pi)}{kr}$$

است. سپس شکل مجانبی  $R_{kl}(r)$  در (۳۶-۸) را برای حالت عمومی که در آن  $V \neq 0$  است پیدا خواهیم کرد. توجه کنیم که در بینهایت  $V$  به سمت صفر میل می کند به طوری که (۳۶-۸) به سمت معادله ذره آزاد میل می کند. از این نکته چنین استنباط می شود که چون پرتابه همیشه در بینهایت آزاد است،  $R_{kl}$  و  $j_l(kr)$  باید دارای شکلهای مجانبی مشابهی باشند. در واقع، تا وقتی  $V$  سریع تر از  $1/r$  به سمت صفر میل می کند\*، شکل مجانبی جواب شعاعی خواهد بود

$$R_{kl}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\sin(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l)}{kr}$$

$\delta_l$  جابه جایی فاز جزئی  $l$  ام نامیده می شود و میزانی از درجه تفاوت  $R_{kl}(r)$  و  $j_l(kr)$  در بینهایت است. چون پتانسیل پراکندگی مسئول این تفاوت است، انتظار داریم که  $\delta_l$ ، تا اندازه ای، شکل مقطع موثر پراکندگی را تعیین کند. با قراردادن شکلهای مجانبی  $R_{kl}(r)$  و  $j_l(kr)$  در (۳۷-۸)، خواهیم داشت

$$\begin{aligned} & \sum_{l=0}^{\infty} a_l P_l(\cos \theta) \frac{\sin(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l)}{kr} \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l P_l(\cos \theta) \frac{\sin(kr - \frac{1}{2}l\pi)}{kr} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (38-8) \end{aligned}$$

با مرتب کردن جملات داریم

$$\sum_{l=0}^{\infty} \frac{P_l(u)}{kr} \left[ a_l \sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l\right) - (2l+1) i^l \sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi\right) \right] = f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

یا

---

\* قبلاً دیدیم که یک پتانسیل  $1/r$  از شکل مجانبی مطلوب در بینهایت انحراف پیدا می کند.

$$\sum_{l=0}^{\infty} \frac{P_l(u)}{2ik} \left[ e^{-\frac{1}{2}i\pi l} (a_l e^{i\delta_l} - (2l+1)i^l) \frac{e^{ikr}}{r} - e^{\frac{1}{2}i\pi l} (a_l e^{-i\delta_l} - (2l+1)i^l) \frac{e^{-ikr}}{r} \right]$$

$$= f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (۳۹-۸)$$

که در آن  $u = \cos \theta$  . طرف‌های راست و چپ (۳۹-۸) تنها در صورتی می‌توانند برابر باشند که ضریب  $e^{-ikr}/r$  صفر شود، یعنی،

$$a_l = (2l+1)i^l e^{i\delta_l}$$

این رابطه ضرایب را در (۳۷-۸) تعیین می‌نماید. بالاخره، این نتیجه را در (۳۹-۸) می‌بریم و خواهیم داشت

$$\sum_{l=0}^{\infty} \frac{P_l(u)}{2ik} e^{-i\pi/2} (2l+1)i^l (e^{i2\delta_l} - 1) \frac{e^{ikr}}{r} = f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (۴۰-۸)$$

و به دنبال آن نتیجه می‌گیریم

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{P_l(u)}{2ik} e^{-i\pi/2} (2l+1)i^l (e^{i2\delta_l} - 1)$$

یا

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta) \quad (۴۱-۸)$$

این رابطه برای دامنه پراکندگی، گرچه جمع و جور نیست، رابطه دقیقی است. سری فوق یک سری پریشیدگی نیست و مستقل از قدرت پراکننده است. تنها محدودیت در اعتبار آن این است که پتانسیل سریع‌تر از پتانسیل  $1/r$  سقوط کند. برای محاسبه مقطع موثر، نخست معادله شعاعی (۳۶-۸) را برای هر مقداری از  $l$  حل می‌کنیم. بعد از پیدا کردن  $R_{kl}(r)$  شکل مجانبی آنرا بررسی می‌کنیم و  $\delta_l$  را، که هر کدام از آنها بستگی به  $k$  (انرژی) دارد، به دست می‌آوریم. معادله (۴۱-۸) فوراً "دامنه پراکندگی را به دست می‌دهد. بالاخره، مقطع موثر با استفاده از

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2$$

$$= \frac{1}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \sin \delta_l \sin \delta_{l'} P_l(u) P_{l'}(u) \quad (۴۲-۸)$$



به دست می‌آید. توجه کنیم که اگر  $V=0$  باشد، تمام  $\delta_l$  ها صفر می‌شوند و  $\sigma(\theta)=0$ ، همان‌طور که انتظار می‌رود.

مقطع مؤثر کل خواهد بود

$$\sigma_T = \int \sigma d\Omega = 2\pi \int_{-1}^1 \sigma(u) du = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (۴۳-۸)$$

در به دست آوردن (۴۳-۸)، از رابطه تعامد

$$\int_{-1}^1 du P_l(u) P_{l'}(u) = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}$$

استفاده شده است. توجه کنیم که

$$\text{Im} f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l P_l(u)$$

چون برای  $\theta=0$  داریم  $P_l(1)=1$ ، نتیجه می‌گیریم

$$\frac{4\pi}{k} \text{Im} f(0) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l = \sigma_T \quad (۴۴-۸)$$

معادله (۴۴-۸) دقیق است و قضیه نوری نظریه پراکندگی را بیان می‌دارد. در واقع، قسمت موهومی  $f(0)$  متناسب با تعداد ذراتی است که از جهت تابش منحرف می‌شوند. قضیه نوری این عدد را به تعداد کل ذراتی که در باریکه پراکنده شده ظاهر می‌شود ربط می‌دهد و بنابراین این بهیانی است از پایداری احتمال. این قضیه مشابه با رابطه  $\mathcal{R} + \mathcal{T} = 1$  در پراکندگی یک بعدی است.

#### ۸- تقریب جابه‌جایی فاز جزئی

روش امواج جزئی منجر به مقطع موثری به شکل یک مجموع بهیمنایت جمله می‌شود. بنابراین این وقتی که چند جمله اول تقریب درستی را نشان دهد، مفیدترین است. این روش، در واقع، باریکه فرودی را برحسب مقادیر آنها (تکانه زاویه‌ای) به امواج جزئی تجزیه می‌کند. هر موج دارای دامنه پراکندگی مشخصی است که به وسیله جابه‌جایی فاز آن،  $\delta_l$ ، تعیین می‌شود. دامنه کل برابر است با مجموع دامنه‌های امواج جزئی.

امواجی که  $l$  آنها بزرگ است متناظر با ذراتی هستند که پارامتر برخورد آنها بزرگ است. همان گونه که در مورد کلاسیکی ملاحظه کردیم، این ذرات به طور قابل ملاحظه‌ای پراکنده نمی‌شوند. بنابراین سهم مهمی در مقطع موثر ندارند و می‌توانند نادیده گرفته شوند. مقطع موثر تقریبی به دست آمده در صورتی درست است که پتانسیل کوتاه برد باشد. از نظر کلاسیکی، برای یک پتانسیل سخت-کره به شعاع  $R$ ،  $l$  ذراتی که پارامتر برخورد آنها در گستره  $R < b$  است پراکنده نخواهند شد. با ضرب و تقسیم طرف چپ در تکرانه زاویه‌ای، شرط فوق می‌تواند به صورت  $bp/p > R$  بیان شود. با قراردادن

$$bp = L = \hbar(l(l+1))^{1/2} \simeq \hbar l = \text{تکرانه زاویه‌ای}$$

$$\text{و به شرط } p = (2m\varepsilon)^{1/2} = \hbar k$$

$$\frac{\hbar l}{\hbar k} > R \quad \text{یا} \quad l > kR$$

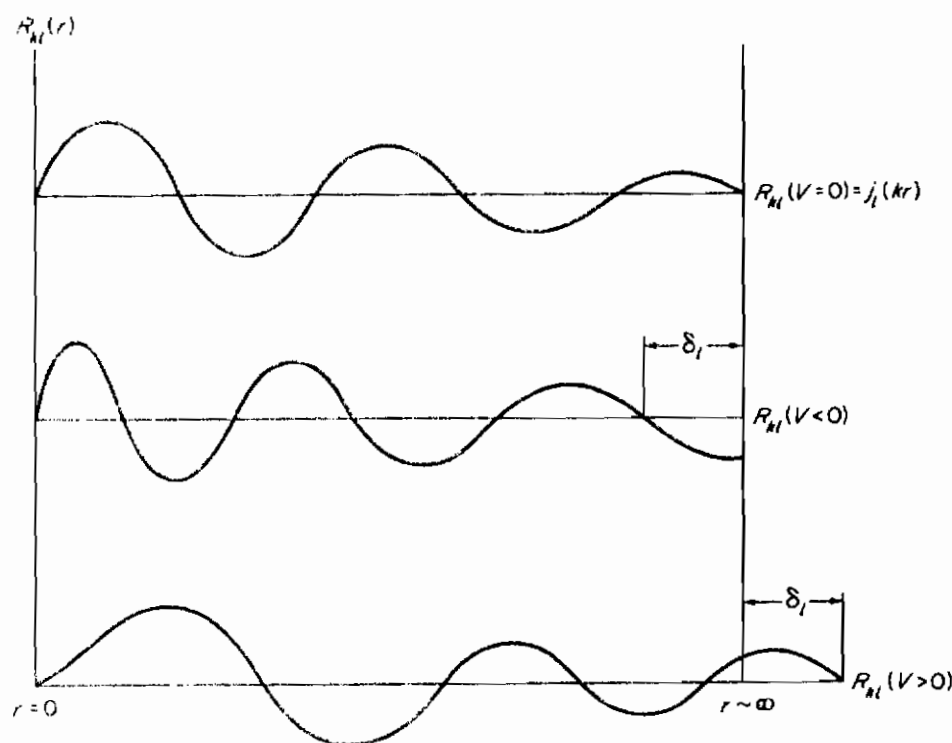
خواهیم رسید. به طور کلی‌تر، اگر  $R$  برد پتانسیل باشد،  $l$  آن امواجی که برای آنها  $l \gg l_{\max} = kR$  باشد از نظر مکانیک کوانتومی به اندازه قابل ملاحظه‌ای پراکنده نمی‌شوند. برای یک مقدار  $k$  (انرژی) و برد معین، مقطع موثر تقریبی (۴۲-۸) می‌تواند به صورت

$$\sigma \simeq \left| \sum_{l=0}^{l_{\max}} \frac{1}{k} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta) \right|^2 \quad (45-8)$$

نوشته شود. برای یک برد مشخص،  $l_{\max}$  با کاهش  $k$  کاهش می‌یابد، در نتیجه، تعداد کمتری از جملات برای به دست آوردن مقطع موثر تقریبی لازم است. به طور معادل، وقتی تعداد ثابتی از جملات در (۴۵-۸) نگاه داشته می‌شوند، دقت مقطع موثر با کاهش  $k$  افزایش می‌یابد. بنابراین، این تقریب، برخلاف تقریب بورن، برای انرژیهای فرودی پائین اعتبار دارد.

جابه‌جائی فاز جزئی  $l$  ام،  $\delta_l$ ، به انرژی فرودی (یا  $k$ ) و به طبیعت پتانسیل پراکندگی بستگی دارد. برای بعضی از پتانسیلها، معمولاً "جاذبه"، موج پراکنده شده به سوی پراکنده کشیده می‌شود، و لذا یک  $\delta_l$  مثبت ایجاد می‌کند. عکس این مطلب عموماً "برای پتانسیلهای دافعه صادق است (شکل ۸-۶)، این مطلب می‌تواند بدین ترتیب درک شود که برای پتانسیلهای جاذبه،  $V < 0$ ، انرژی جنبشی در مجاورت پراکنده زیاد است. پارامتر

$k = (2m(\epsilon - V)/\hbar^2)^{1/2}$  نیز بزرگ است و لذا یک طول موج دوبروی منقبض شده  $\lambda = 2\pi/k$  ایجاد می کند. بنابراین تابع موج به طرف پراکنده کشیده می شود. برای پتانسیلهای دافعه، انرژی جنبشی و پارامتر  $k$  در نزدیکی پراکنده کمترین مقدارشان را دارند، در نتیجه طول موج بیشترین مقدار را دارد و موج از پراکنده دور می شود.



شکل (۸-۶) تاثیر پتانسیلهای نیروی مرکزی جاذبه و دافعه روی شکل مجانبی ویژه تابعهای شعاعی.

اگر فرض کنیم که سهم عمده  $\sigma$  در (۸-۴۵) از امواج  $s$  ( $l=0$ ) حاصل می شود، این مقطع موثر به طور حساسی به  $\delta_0$  بستگی دارد. اگر برای یک انرژی داده شده  $\delta_0$  برابر با  $n\pi$  شود، داریم  $\delta_l = 0$  و (۸-۴۵) یک افت چشمگیری در مقطع موثر پراکندگی پیشگویی می کند. این اثر به طور تجربی در پراکندگی الکترونهای کم انرژی ( $\sim 1$  eV) از اتمهای گاز بی اثر مشاهده شده است. غیاب چشمگیر پراکندگی در این انرژی، اثر رامسور-تونزند<sup>۳</sup> نامیده می شود. این اثر در پراکندگی الکترونهای از اتمهای گاز بی اثر مشاهده می شود که در آن در بعضی انرژیها، الکترونها دچار افت چشمگیری در پراکندگی می شوند. در دیگر انرژیها، جابه جایی فاز می تواند برابر با  $\delta_0 = (n + \frac{1}{2})\pi$  شود، که در این صورت پراکندگی تشدید

می‌شود. در این انرژیها، تشدیدهای  $s$  - موج داریم. تشدیدهای مشابهی می‌تواند برای مقادیر بالاتر  $l$  رخ دهد.

### ۹- پراکندگی $s$ - موج

تقریب موج جزئی را به محاسبه مقطع موثر وابسته به پتانسیل

$$V = V_0 \quad , \quad 0 < r \leq R \quad \text{برای}$$

$$V = 0 \quad , \quad r > R \quad \text{برای}$$

اعمال خواهیم کرد. جابه‌جاییهای فاز با حل معادله شعاعی متناظر

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dr^2} u_{kl}(r) + \left( K^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u_{kl}(r) &= 0 \quad (0 < r \leq R) \\ \frac{d^2}{dr^2} u_{kl}(r) + \left( k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u_{kl}(r) &= 0 \quad (r > R) \end{aligned} \quad (۴۶-۸)$$

به دست می‌آیند که در آنها قرار داده‌ایم

$$R_{kl} = \frac{u_{kl}}{r}, \quad k = \left( \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} \right)^{1/2},$$

$$K = \left( \frac{2m(\varepsilon - V_0)}{\hbar^2} \right)^{1/2} \quad \text{یا} \quad K = [k^2 - (2mV_0/\hbar^2)]^{1/2}$$

جوابهای قابل قبول برای  $R_{kl}$  باید در همه جا متناهی، پیوسته و مشتق‌پذیر باشند. ما توجه خود را به جوابهای  $s$  - موج معطوف می‌کنیم. جواب داخلی ( $r \leq R$ ) برای  $l=0$  در (۴۶-۸) عبارت است از

$$u_{k0} = A \sin Kr + B \cos Kr$$

اما، ویژه تابعهای شعاعی

$$R_{kl} = \frac{u_{kl}(r)}{r}$$

در صورتی و فقط در صورتی می‌توانند در مبداء متناهی بمانند که  $u_{k1}(0) = 0$  باشد. این مطلب ایجاب می‌کند که قرار دهیم  $B = 0$  و بنویسیم

$$u_{k0}(r \leq R) = A \sin Kr \quad (۴۷-۸)$$

جواب خارجی می‌تواند به صورت

$$u_{k0}(r > R) = D \sin(kr + \delta_0) \quad (۴۸-۸)$$

نوشته شود. پیوستگی  $R_{k0}$  و مشتق آن در  $r = R$  ایجاب می‌کند که\*

$$\left. \frac{u'_{k0}(r \leq R)}{u_{k0}(r \leq R)} \right|_{r=R} = \left. \frac{u'_{k0}(r > R)}{u_{k0}(r > R)} \right|_{r=R}$$

که، با استفاده از (۴۷-۸) و (۴۸-۸)، خواهد شد

$$K \cot KR = k \cot(kR + \delta_0)$$

یا

$$\left( \frac{2m(\varepsilon - V_0)}{\hbar^2} \right)^{1/2} \cot \left( \frac{2m(\varepsilon - V_0)}{\hbar^2} \right)^{1/2} R = \left( \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} \right)^{1/2} \cot \left( \left( \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} \right)^{1/2} R + \delta_0 \right) \quad (۴۹-۸)$$

جابه‌جایی فاز  $s$  - موج از حل (۴۹-۸) برای  $\delta_0$  بر حسب  $\varepsilon$ ،  $R$  و  $V_0$ ، به دست می‌آید. با استفاده از (۴۵-۸)، مقطع موثر  $s$  - موج می‌شود

$$\sigma^{(s)} = \frac{1}{k^2} \sin^2 \delta_0$$

تشدیدهای  $s$  - موج وقتی رخ می‌دهند که  $\delta_0 = (n + \frac{1}{2})\pi$  و در نتیجه  $\sin^2 \delta_0$  باشد. انرژی فرودی تشدید  $\varepsilon_n$ ، که در آن بهینه پراکندگی موجهای  $s$  (برای  $R$  و  $V_0$  ثابت)

\* شرط پیوستگی تابع و مشتق آن می‌تواند با این خواسته که مشتق لگاریتمی تابع پیوسته باشد، برقرار گردد. از نظر ریاضی

$$\frac{u_1'}{u_1} = \frac{u_2'}{u_2}$$

با رابطه  $(\ln u_1)' = (\ln u_2)'$  معادل است.

رخ می‌دهد، از جوابهای (۴۹-۸) با قراردادن  $\delta_0 = (n + \frac{1}{2})\pi$  به دست می‌آید. اثری از نوع رامسور در انرژیهای در (۴۹-۸) رخ می‌دهد که برای آنها داشته باشیم  $\delta_0 = n\pi$ . در این مورد  $\sin^2 \delta_0 = 0$  و هیچ نوع پراکندگی  $s$  - موج صورت نمی‌گیرد. مقطع موثر  $s$  - موج دقیقاً "مقطع موثر حقیقی را توصیف می‌کند به شرط اینکه  $kR \ll 1$  یا  $\epsilon \ll \hbar^2/2mR$ ، یعنی، انرژیهای فرودی پائین باشند. از طرف دیگر، وقتی انرژیها بالا هستند، یعنی  $\epsilon \gg V_0$ ، مقطع موثر بورن معمولاً تقریب بهتری را نشان می‌دهد. قابل توجه است که در مورد حدی  $V_0 \rightarrow \infty$  (کره نفوذناپذیر)، تقریب بورن کلاً غیرقابل اعمال است. اما، روش امواج جزئی می‌تواند مستقیماً اعمال شود. جواب داخلی برای  $V_0 = \infty$  خواهد شد

$$u_{k0}(r \leq R) \equiv 0$$

شرط پیوستگی در  $r = R$  برای امواج  $s$  می‌شود

$$u_{k0}(\leq R)|_{r=R} = B \sin(kR + \delta_0) = 0$$

که از آن نتیجه می‌شود  $\delta_0 = -kR$ . مقطع موثر دیفرانسیلی  $s$  - موج برای یک کره نفوذناپذیر می‌شود

$$\sigma^{(s)} = \frac{1}{k^2} \sin^2 \delta_0 = \frac{1}{k^2} \sin^2 (-kR)$$

در حد انرژیهای پائین،  $kR \ll 1$ ، داریم

$$\sigma \simeq \sigma^{(s)}(kR \ll 1) = \frac{1}{k^2} \sin^2(-kR) \simeq \frac{1}{k^2} (-kR)^2 = \frac{1}{k^2} k^2 R^2$$

مقطع موثر کل  $s$  - موج به صورت زیر به دست می‌آید

$$\sigma_T \simeq \sigma_T^{(s)} = 4\pi R^2 \quad (۵۰-۸)$$

توجه کنیم که (۵۰-۸) شامل  $\hbar$  نیست. با این وجود، این نتیجه نمی‌تواند یک نتیجه کلاسیکی باشد زیرا انتظار این است که حد کلاسیکی در انرژیهای بالا باشد\*. به علاوه، مقطع موثر برای کره سخت به طور منطقی فقط  $\pi R^2$  است. ضریب ۴ در (۵۰-۸) از تداخل آثار مکانیک

\* در واقع می‌توان نشان داد که وقتی  $\epsilon \rightarrow \infty$ ، مقطع موثر کوانتومی به سمت  $2\pi R^2$  میل کند که دو برابر نتیجه کلاسیکی است. این اختلاف آشکار به این واقعیت مربوط می‌شود که پتانسیل سخت - کره به طور ناگهانی در  $r = R$  تغییر می‌کند.

کوانتومی سرچشمه می‌گیرد. این واقعیت که  $\hbar$  حضور ندارد، باید به ناپیوستگی غیرفیزیکی پتانسیل پراکندگی در  $r = R$  نسبت داده شود.

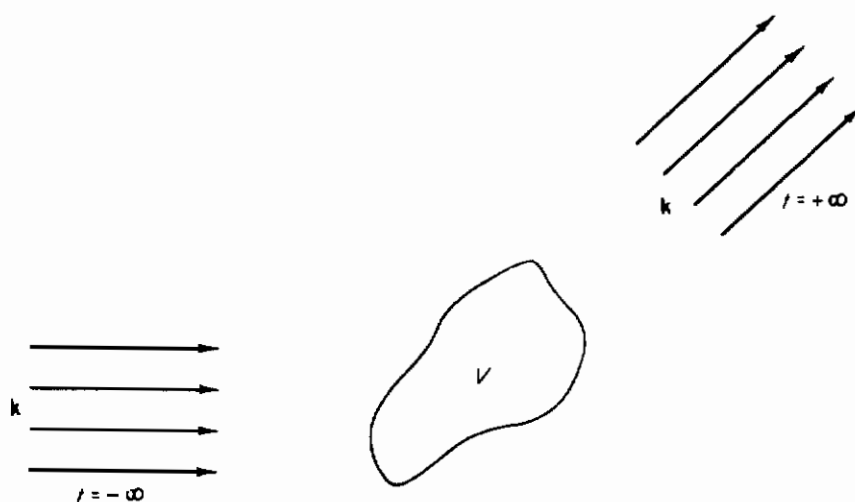
### ۱۰- پراکندگی کوانتومی دینامیکی و گذارها

روشهای پراکندگی بحث شده در بالا برای پراکندگیهای کشان ذرات از پراکنده ثابت کاملاً"عمومی هستند، اما نمی‌توانند به مسائل غیرمکانیک موجی تعمیم داده شوند. یک مسئله از این قبیل، به عنوان مثال، پراکندگی کامپتونی فوتونها از الکترونهای آزاد است، که شامل پراکندگی میدان الکترومغناطیسی کوانتیده است.

سپس صورتبندی‌ای را توسعه می‌دهیم که می‌تواند برای تمام فرایندهای کوانتومی اساسی طبیعی به کار رود. این صورتبندی را به پراکندگی ذرات از پتانسیلهای ثابت، به منظور اثبات هم‌ارزی آن با روشهای مانای بحث شده در فوق، اعمال خواهیم کرد.

روش دینامیکی پراکندگی بر اساس قاعده تلاشی فرمی استوار است و پدیده پراکندگی را به عنوان فرایند گذار از یک حالت اولیه تکانه  $|\mathbf{k}\rangle$  به یک حالت نهایی دیگر  $|\mathbf{k}'\rangle$  در نظر می‌گیرد. گذار به وسیله پریشیدگی پراکندگی  $\lambda V$  (شکل ۸-۷) القاء می‌شود. میزان احتمالی که با آن ذرات از  $|\mathbf{k}\rangle$  به  $|\mathbf{k}'\rangle$  می‌روند، از (۷-۷۲)، عبارت است از

$$R_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \left[ \frac{2\pi}{\hbar} \left| \sum_{j=1}^{\infty} \lambda^j M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{(j)} \right|^2 \rho(\mathbf{k}') \right]_{\epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}'}} \quad (۸-۵۱)$$



شکل (۸-۷) فرایند پراکندگی که به صورت یک گذار از یک حالت اولیه تکانه  $(t = -\infty)$  به یک حالت نهایی آن  $(t = +\infty)$  نشان داده شده است. گذار به وسیله پتانسیل پراکندگی القاء شده است.

جمله  $M_{kk'}^{(j)}$  معرف دامنه‌گذار مرتبه  $j$  ام است. چند دامنه اول، از (۷-۷۲)، با قراردادن  $dn = [\mathcal{V}/(2\pi)^3] dk$ ، به صورت زیر به دست می‌آیند\*

$$\begin{aligned} M_{kk'}^{(1)} &= \langle k' | \hat{V} | k \rangle \\ M_{kk'}^{(2)} &= \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int \frac{\langle k' | \hat{V} | k'' \rangle \langle k'' | \hat{V} | k \rangle dk''}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k''}} \\ M_{kk'}^{(3)} &= \left( \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \right)^2 \int \frac{\langle k' | \hat{V} | k'' \rangle \langle k'' | \hat{V} | k''' \rangle \langle k''' | \hat{V} | k \rangle dk'' dk'''}{(\varepsilon_k - \varepsilon_{k''})(\varepsilon_{k''} - \varepsilon_{k'''})} \quad (۵۲-۸) \end{aligned}$$

برای مسئله پراکندگی مورد نظر، ویژه تابعهای بهنجار شده در جعبه

$$|k\rangle \rightarrow \psi_k = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{ik \cdot r} \quad (۵۳-۸)$$

ویژه حالت‌های ذره آزاد را نشان خواهد داد. انرژیها و شارهای متناظر عبارتند از

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \text{و} \quad J = \frac{1}{\mathcal{V}} \frac{\hbar k}{m} \quad (۵۴-۸)$$

دامنه اول گذار در (۵۲-۸) به شکل زیر است

$$\begin{aligned} M_{kk'}^{(1)} &= \langle k' | \hat{V} | k \rangle = \frac{1}{\mathcal{V}} \int V(r') e^{i(k-k') \cdot r'} dr' \\ &= \frac{1}{\mathcal{V}} V(K = k - k') \quad (۵۵-۸) \end{aligned}$$

چگالی حالت‌های (با نادیده گرفتن اسپین) وابسته به این ویژه تابعها با استفاده از (۵-۱۶) که عبارت است از

$$dn = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} dk = \rho(k) d\varepsilon$$

به دست می‌آید. با بیان این معادله در مختصات قطبی کروی و استفاده از (۵۴-۸)، خواهیم داشت

\* فرض می‌شود که فرایند پراکندگی در یک جعبه بزرگ با حجم  $\mathcal{V}$  اتفاق افتاده است (رک معادله ۵-۱۶).



$$\frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} d\Omega_{\mathbf{k}} k^2 dk = \rho(\mathbf{k}) d\varepsilon = \rho(\mathbf{k}) \frac{\hbar^2 k}{m} dk$$

یا

$$\rho(\mathbf{k}) = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \frac{mk}{\hbar^2} d\Omega_{\mathbf{k}} \quad (۵۶-۸)$$

معادله (۵۶-۸) نمایشگر تعداد حالت‌هایی، بر واحد انرژی، است که بردار  $\mathbf{k}$  ی آنها در زاویه حجمی  $d\Omega_{\mathbf{k}}$  قرار دارد. تعداد کل ذراتی که در واحد زمان به این زاویه حجمی وارد می‌شوند، با استفاده از (۵۱-۸)، عبارتند از

$$R_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = dN_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \left[ \frac{2\pi}{\hbar} \left| \sum_{j=1}^{\infty} \lambda^j M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{(j)} \right|^2 \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \frac{mk'}{\hbar^2} d\Omega_{\mathbf{k}'} \right]_{\mathbf{k}=\mathbf{k}'}$$

یا

$$dN_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \frac{\mathcal{V}mk}{(2\pi)^2 \hbar^3} \left| \sum_{j=1}^{\infty} \lambda^j M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{(j)} \right|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}'}^2 d\Omega_{\mathbf{k}'}$$

با تقسیم طرفین بر شار فرودی  $J_{\text{inc}} = (1/\mathcal{V})(\hbar k/m)$ ، بالاخره مقطع موثر خواهد شد

$$\sigma = \frac{1}{J_{\text{inc}}} \frac{dN_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}}{d\Omega_{\mathbf{k}'}} = \frac{\mathcal{V}^2 m^2}{(2\pi \hbar^2)^2} \left| \sum_{j=1}^{\infty} \lambda^j M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{(j)} \right|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}'}^2 \quad (۵۷-۸)$$

در نگاه اول عجیب به نظر می‌رسد که چرا حجم جعبه به کار برده شده در بهنجارش  $\psi_{\mathbf{k}}$  باید در مقطع موثر وارد شود. اما، هر جمله شامل  $M^{(j)}$  حاوی یک ضریب مناسبی است که هر نوع بستگی ممکن  $\sigma$  به حجم را حذف می‌کند.

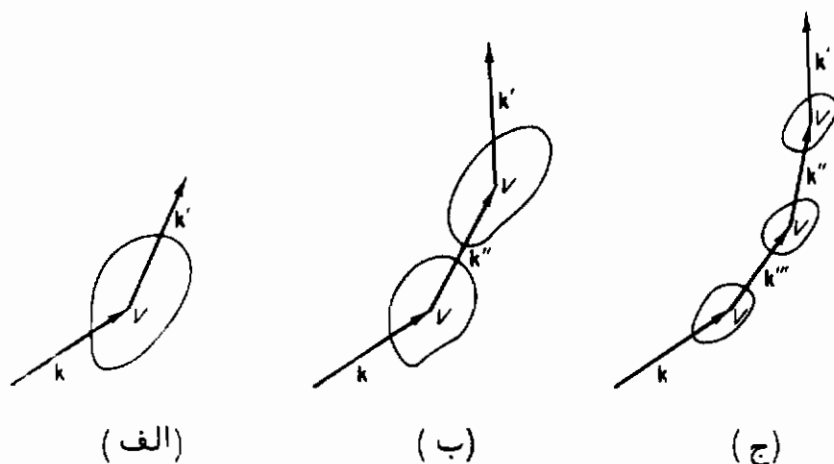
اگر  $\lambda$  کوچک باشد، تنها نیاز به نگهداری دامنه اول

$$M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{(1)} = \frac{1}{\mathcal{V}} V(\mathbf{k})$$

داریم و مقطع موثر مرتبه اول خواهد شد

$$\begin{aligned} \sigma^{(1)} &= \frac{\mathcal{V}^2 m^2}{(2\pi \hbar^2)^2} \left| \frac{\lambda}{\mathcal{V}} V(\mathbf{K}) \right|^2 \\ &= \left( \frac{\lambda m}{2\pi \hbar^2} \right)^2 |V(\mathbf{K})|^2 \end{aligned} \quad (۵۸-۸)$$

نتیجه مرتبه اول با تقریب اول بورن (۸-۲۹) یکسان است. در واقع، می‌توان به راحتی دید که (۸-۱۵) که دامنه‌های بالاتر نیز جمله به جمله با جمله‌های سری بورن هم‌ارز می‌کنند. گفته می‌شود که هر دامنه گذار در (۸-۵۷) یک فرایند را نشان می‌دهد. در مورد پراکندگی از یک پتانسیل ثابت، می‌توان به هر  $M_{kk'}^{(j)}$  در (۸-۵۷) یک نمودار نسبت داد. فرایند مرتبه اول شامل یک پیکان ورودی برای  $k$ ، یک رأس برای پتانسیل  $V$  و یک پیکان خروجی برای  $k'$  (شکل ۸-۸) است. فرایند مرتبه دوم شامل یک پیکان ورودی برای  $k$ ، یک رأس برای  $V$ ، یک پیکان واسطه برای  $k''$ ، یک رأس دیگر برای  $V$  و یک پیکان خروجی برای  $k'$  می‌باشد. این نوع نمودارها توسط فاینمن<sup>۴</sup> معرفی شدند و از آن به بعد به همین نام نامیده می‌شوند. این نمودارها بخصوص در مسائل پیچیده‌تر وابسته به پراکندگی میدانهای کوانتومی که در آن پراکندگی چند ذره‌ای صورت می‌گیرد مفید هستند. به تناظر بین انتگرالهای مربوط به  $M_{kk'}^{(j)}$  در (۸-۵۲) و نمودارهای فاینمن در شکل (۸-۸) توجه کنیم. در فصل ۱۲ فرصت خواهیم یافت که قاعده تلاشی فرمی را در بحث الکترو دینامیک کوانتومی به کار ببریم.



شکل (۸-۸) نمودارهای فاینمن برای پراکندگی از یک پتانسیل ثابت در (الف) مرتبه اول، (ب) مرتبه دوم و (ج) مرتبه سوم.

## ۱۱- پراکندگی ناکشان و جذب

در مسائل پراکندگی که تا اینجا بررسی کرده‌ایم، پتانسیل ایستای هدف ثابت یک نقش غیرفعال بازی می‌کرد. در نتیجه، دو اصل پایستگی زیر در مقطع موثر منعکس شدند. (۱) پایستگی انرژی، یعنی، باریکه‌های فرودی و پراکنده شده دارای انرژیهای برابر

بودند (پراکندگی کشسان).

(۲) پابستگی ذرات، یعنی، به تعداد ذرات منحرف شده از باریکه فرودی در باریکه پراکنده شده ظاهر شدند (قضیه اپتیکی).

در موارد زیادی، هدف نقش فعالی در فرایند پراکندگی بازی می‌کند. به عنوان مثال، در فرایند واقعی پراکندگی راترفورد، هسته‌های پس زده طلا ناقل هم انرژی و هم تکانه هستند. ذرات پراکنده شده  $\gamma$  در اثر برخورد لزوماً مقداری انرژی از دست می‌دهند. انرژی کل (پرتابه + هدف) در این وضعیت پایسته می‌ماند. در پراکندگی الکترونها از اتمها، پرتابه‌ها نمی‌توانند با پراکندگی داخلی هدفها انرژی از دست بدهند. بنابراین پرتابه‌ها ممکن است به طور ناکشسان پراکنده شوند. در فرایندهای پراکندگی دیگر، ممکن است پرتابه به وسیله هدف ربوده یا جذب شود. این پدیده در واکنشهای هسته‌ای کاملاً عادی است. بنابراین هدف قادر است ذرات را حذف کند؛ تعداد ذرات حذف شده از باریکه فرودی نیازی ندارند که در باریکه پراکنده شده ظاهر شوند.

گفته می‌شود که هر مد پراکندگی (کشسان، ناکشسان، جذب) یک "کانال" نمایش می‌دهد و هر کدام مقطع موثری دارد که می‌تواند با استفاده از قاعده پلائی فرمی محاسبه شود. اما در چنین محاسباتی طبیعت دقیق پراکننده باید گنجانیده شده باشد. به طور کلی، تجزیه و تحلیل فرایندهای پراکندگی مستلزم درک مسئله چند جسمی است.

در فصلهای ۹ و ۱۰ مکانیک کوانتومی مسئله چند جسمی را آن گونه که به حالت‌های مقید و پراکندگی مربوط است، بحث خواهیم کرد.

### مسائل

- ۸-۱ (الف) با استفاده از مکانیک کلاسیکی، یک عبارت عمومی برای مسیر هذلولی شکل ذره‌ای که به وسیله پتانسیل  $V = ZZ'e^2/r$  از مبدأ دفع می‌شود به دست آورید.
- (ب) نشان دهید که رابطه بین پارامتر برخورد  $b$  و زاویه پراکندگی  $\theta$  عبارت است از

$$b = \left( \frac{ZZ'e^2}{2\varepsilon} \right) \cot \frac{\theta}{2}$$

- (ج) با استفاده از (۸-۳) نشان دهید که مقطع موثر راترفورد به وسیله

$$\sigma(\theta) = \left( \frac{ZZ'e^2}{4\varepsilon} \right)^2 \sin^{-4} \left( \frac{\theta}{2} \right)$$

داده می‌شود .

۲-۸ (الف) با استفاده از مکانیک کلاسیکی ، رابطه  $b = b(\theta)$  را برای یک پتانسیل کروی غیرقابل نفوذ  $V = \infty$  برای  $r \leq R$  و  $V = 0$  برای جاهای دیگر ، به دست آورید .

( ب ) مقطع موثر دیفرانسیلی را برای این پتانسیل به دست آورید .

( ج ) نتیجه (ب) را انتگرال گیری کنید و مقطع موثر کل را به دست آورید ( توجه کنید که مقطع موثر مستقل از  $\varepsilon$  است ) .

۳-۸ عباراتی برای ضرایب متریک ، لاپلاسی و عنصر حجم در مختصات سهموی به دست آورید .

۴-۸ (الف) مقطع موثر دیفرانسیلی کلاسیکی را برای یک پتانسیل سخت - کره  $V = -V_0$  برای  $r \leq R$  و  $V = 0$  در جاهای دیگر ، محاسبه کنید .

( ب ) مقطع موثر کوانتومی در تقریب بورن کدام است ؟

( ج ) مقطع موثر کوانتومی را با استفاده از تحلیل موج جزئی ، شامل موجهای  $s$  و  $p$  به دست آورید .

۵-۸ (الف) با استفاده از مکانیک کلاسیکی ، نشان دهید که رابطه بین پارامتر برخورد و زاویه پراکندگی برای یک پتانسیل  $V = K/r^2$  عبارت است از

$$b^2 = \frac{K}{\varepsilon} \frac{1}{\theta} \frac{(\pi - \theta)^2}{(2\pi - \theta)}$$

که در آن  $\varepsilon$  انرژی پرتابه‌ها است .

( ب ) مقطع موثر کلاسیکی را برای این پتانسیل محاسبه کنید .

( ج ) مقطع موثر کوانتومی را برای یک پتانسیل  $1/r^2$  در تقریب بورن پیدا کنید .

۶-۸ نشان دهید که تابع گرین

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$$

دارای خاصیت زیر است

$$(\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

۷-۸ (الف) نشان دهید که دامنه دوم بورن با رابطه

$$f^{(2)} = \left( \frac{2m\lambda}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{4\pi} \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{V(\mathbf{k} - \mathbf{k}'') V(\mathbf{k}'' - \mathbf{k}') d\mathbf{k}''}{(k''^2 - k^2)}$$

داده می‌شود.

(ب) عبارت مقطع موثر در تقریب دوم بورن چیست؟

۸-۸ شکل عمومی بستگی زاویه‌ای مقطع موثر را وقتی موج جزئی  $l=2$  در نظر گرفته می‌شود بیان کنید.

۹-۸ (الف) نشان دهید که برای انرژی‌های پائین ( $k \rightarrow 0$ ) جابه‌جایی فاز  $s$  — موج برای یک پتانسیل سخت — کره ( $V = V_0$  برای  $r \leq R$ )، از (۸-۴۹) به صورت

$$\delta_0 \simeq kR \left[ \frac{\tanh[k_0 R]}{k_0 R} - 1 \right] \quad , \quad k_0 = \left( \frac{2mV_0}{\hbar^2} \right)^{1/2}$$

به دست می‌آید.

(ب) نشان دهید که مقطع موثر کل  $s$  — موج عبارت است از

$$\sigma_0 \simeq 4\pi R^2 \left[ \frac{\tanh[k_0 R]}{k_0 R} - 1 \right]^2$$

(ج) این عبارت وقتی  $V_0 \rightarrow \infty$  به چه صورتی در خواهد آمد؟

۸-۱۰ نشان دهید که دوجمله اول در (۸-۵۷) همان نتایج دوجمله اول در (۸-۲۴) (تقریب دوم بورن) را می‌دهد.

### تراجع پیشنهادی

Bohm, D., "Quantum Theory," Chapter 21. Prentice-Hall, Englewood Cliff, New Jersey, 1951.

Landau, L. D., and Lifshitz, E. M., "Quantum Mechanics," 2nd ed., Chapter XVII. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1965.

Marion, J. B., "Classical Dynamics of Particles and Systems," 2nd ed. Academic Press, New York, 1970.

Merzbacher, E., "Quantum Mechanics," 2nd ed., Chapter 21. New York, Wiley, 1970.

Newton, R., "Scattering Theory of Waves and Particles." McGraw-Hill, New York, 1966.

(This advanced text is devoted entirely to scattering phenomena. It is aimed at the more advanced student and considerable mathematical background is required on the part of the student.)

Rodberg, L. S., and Thaler, R. M., "Introduction to the Quantum Theory of Scattering." Academic Press, New York, 1967.

(This text on scattering is somewhat more introductory and less specialized in its discussions of quantum mechanics than is R. Newton's book above.)

قسمت دوم

سیستمهای چند ذره‌ای





# ۹

## ذرات بدون برهم کنش

سیستمهای چندذره‌ای اهمیت و فایده زیادی هم در مکانیک کلاسیکی و هم در مکانیک کوانتومی دارند. حتی هیدروژن، که ساده‌ترین اتمهاست، از دوزره تشکیل شده است، پروتون و الکترون. بیشتر مسائل فیزیک اتمی و هسته‌ای شامل تعداد متوسطی ( $2 \leq N \leq 100$ ) از ذرات می‌باشند. در فیزیک جامدات، مایعات و گازها، وضعیت در حقیقت یک مسئله چند جسمی است ( $N \sim 10^{23}$ ). قبل از فرمولبندی نظریه کوانتومی، به‌طور اختصار بعضی از مفاهیم کلاسیکی سیستمهای چندذره‌ای را مورد بحث قرار خواهیم داد.

### ۱- مکانیک کلاسیکی

یک سیستم مرکب از  $N$  ذره نقطه‌ای از نظر سینماتیکی به وسیله مجموعه‌ای از  $N$  بردار مکانی، که در آن  $\mathbf{r}^{(q)}$  مکان ذره  $q$  ام را مشخص می‌کند ( $q = 1, \dots, N$ ) نمایش داده می‌شود. وقتی که بستگی زمانی هریک از این بردارها (با توجه به شرایط اولیه داده شده) مشخص شده باشد، مسئله مکانیکی حل شده تلقی می‌شود.

مطلب را با ساختن لاگرانژی  $\mathcal{L} = T - V$  برحسب  $N$  مختصات دکارتی و سرعتها،  $x_i^{(q)}$  و  $\dot{x}_i^{(q)}$  ( $i = 1, \dots, 3, q = 1, \dots, N$ ) شروع می‌کنیم که در آن انرژی جنبشی عبارت است از

$$\begin{aligned} T &= \sum_{q=1}^N \frac{1}{2} m_q |\dot{\mathbf{r}}^{(q)}|^2 = \sum_{q=1}^N \sum_{i=1}^3 \frac{1}{2} m_q \dot{x}_i^{(q)2} \\ &= \sum_{q=1}^N \frac{1}{2} m_q (\dot{x}^{(q)2} + \dot{y}^{(q)2} + \dot{z}^{(q)2}) \end{aligned} \quad (1-9)$$

انرژی پتانسیل به صورت زیر تجزیه خواهد شد\*

$$V = \sum_q V_q + \frac{1}{2} \sum_q \sum_{q \neq i} V_{qi}$$

که در آن  $V_q$  انرژی پتانسیل ذره  $q$  ام ناشی از نیروهای خارجی است و  $V_{qi}$  نمایانگر انرژی برهم‌کنش بین ذرات  $q$  ام و  $i$  ام می‌باشد. فرض خواهیم کرد که  $V_{ii}$  مستقل از سرعت است و در قانون سوم نیوتن، یعنی  $V_{ii} = V_{iq}$ ، صدق می‌کند. در موارد زیادی  $V_{qi}$  فقط تابعی از فاصله بین دو ذره است.

با اعمال معادلات لاگرانژ (۲-۲۶) به (۹-۱)، تعداد  $3N$  معادله دیفرانسیل برای

$x_i^{(q)}$  به صورت

$$m_q \ddot{x}_i^{(q)} - \frac{\partial V_q}{\partial x_i^{(q)}} - \frac{\partial}{\partial x_i^{(q)}} \sum_{i \neq q} V_{qi} = 0 \quad (i = 1, 2, 3, \quad q = 1, \dots, N)$$

یا به شکل برداری

$$m_q \ddot{\mathbf{r}}^{(q)} - \nabla^{(q)} V(\mathbf{r}^{(q)}) - \nabla^{(q)} \sum_{i \neq q} V(\mathbf{r}^{(q)} - \mathbf{r}^{(i)}) = 0 \quad (q = 1, \dots, N) \quad (2-9)$$

به دست می‌آید.

معادلات (۲-۹) را می‌توان برای  $\mathbf{r}^{(q)}(t)$ ، با در نظر گرفتن شرایط اولیه  $\mathbf{r}_0^{(q)} = \mathbf{r}^{(q)}(0)$  و  $\dot{\mathbf{r}}_0^{(q)} = \dot{\mathbf{r}}^{(q)}(0)$ ، حل شوند. اشکال در حل (۲-۹)، حتی برای تعداد نسبتاً کمی از ذرات، از این واقعیت ناشی می‌شود که این معادلات جفت شده هستند، یعنی، معادله  $q$  ام شامل  $\mathbf{r}^{(i)}$  است. توجه کنیم که این جفت‌شدگی از انرژی پتانسیل برهم‌کنش سرچشمه می‌گیرد نه از نیروهای خارجی که روی هر ذره به‌طور انفرادی عمل می‌کنند. متأسفانه هیچ روش عمومی وجود ندارد که دستگاه معادلات (۲-۹) را تفکیک و آنرا قابل حل کند. برای برهم‌کنشهای بسیار خاصی، گاهی اوقات می‌توان معادلات حرکت را، با تبدیل به مجموعه

\* جمله برهم‌کنش  $q=i$  حذف شده است زیرا یک ذره نمی‌تواند روی خودش نیرو وارد کند. ضرب  $\frac{1}{2}$  برای جبران دوبار شمردن وارد شده است. بعضی از مولفین از نمادگذاری

$$\frac{1}{2} \sum_q \sum_{q \neq i} V_{qi} = \sum_q \sum_{i < q} V_{qi}$$

که در آن دوباره‌شماری صورت نمی‌گیرد استفاده می‌کنند.

دیگری از مختصات بنیادی، تفکیک نرد. به سیستم مختصات بنیادی، وقتی فقط دو ذره برهم کنش کننده، بدون هیچ نوع نیروی خارجی، داریم، معادلات حرکت می توانند با استفاده از تبدیل به مرکز جرم تفکیک شوند. متأسفانه این روش نمی تواند برای سه ذره تعمیم داده شود. در مورد خاصی که  $N$  ذره توسط نیروهای کشسان با یکدیگر برهم کنش می کنند (یعنی، وقتی انرژی پتانسیل به شکل یک عبارت درجه دوم از مختصات است) تبدیل دیگری (تبدیل به مختصات بهنجار) وجود دارد که مسئله را قابل حل می کند\*. در فصل ۱۵ به این مسئله باز خواهیم گشت. وقتی معادلات حرکت جفت شده هستند، گفته می شود که حرکات ذرات از نظر دینامیکی همبسته اند. در این صورت حرکت هر ذره در سیستمی تمام ذرات دیگر تأثیر می گذارد. در موارد نسبتاً نادری که برهم کنشها صرفاً نظر کردنی هستند یا شاید وجود ندارند، معادلات حرکت، علی الاصول، تفکیک می شوند و مسئله برهم کنش به مسئله ای که شامل  $N$  مسئله یک جسمی است تقلیل می یابد. حرکت یک سیستم "ایده آل" به عنوان مثال، گاز ایده آل، از نظر دینامیکی ناهمبسته است و هر ذره طوری حرکت می کند که نوعی ذرات دیگر وجود ندارند. بنابراین می توانیم نتیجه بگیریم که از نظر کلاسیکی مسئله  $N$  جسمی "ایده آل" یا بدون برهم کنش دیگر مشکل تراز هیچ یک از مسائل یک جسمی اجسام تشکیل دهنده آن نخواهد بود. در عمل، وقتی فاصله متوسط ذرات خیلی بزرگتر از برد پتانسیل برهم کنش باشد، سیستم تقریباً "ایده آل" می شود. به این دلیل است که گازهای آلا روشی با نیروهای بین مولکولی کوتاه برد، وقتی به اندازه کافی رقیق باشند رفتار گاز ایده آل از خود نشان می دهند.

مسئله مکانیک کوانتومی چند جسمی مشتمل بر مسائل ریاضی با همتای کلاسیکی خود دارد. حل مسئله کوانتومی مستلزم حل معادله شرودینگر چند جسمی (جفت شده) است. تفکیک این معادله مشکلاتی شبیه به آنچه که در معادلات لاگرانژ کلاسیکی پیش آمد پیش می آورد. در مورد یک سیستم ایده آل (بدون برهم کنش) تفکیک ساده و سراسر است. با این وجود، یک تفاوت فاحش بین سیستمهای ایده آل کلاسیکی و کوانتومی وجود دارد. این مسئله وقتی رخ می دهد که ذرات از یکدیگر تمیز ناپذیر باشند. در مورد کوانتومی، حرکات ذرات هنوز همبسته اند، یعنی، ذرات روی یکدیگر تأثیر می گذارند هر چند هیچ نیروی بین آنها وجود ندارد. این همبستگی ها، آماری (در مقابل دینامیکی) نامیده می شوند و هیچ مشابهی در گستره کلاسیکی ندارند. این همبستگی ها عموماً "برای بوزون ها در برابر اسپین درست" (جاذبه و — برای

\* به عنوان مثال به کتاب زیر مراجعه کنید.

H. Goldstein, "Classical Mechanics." Addison-wesley, Reading Massachusetts, 1950.

فرمیون‌ها (ذرات با اسپین نیمه‌درست) دافعه‌اند. به‌علت این همبستگی‌ها، گفته می‌شود که اولیها از آماری بوز-اینشتین پیروی می‌کنند در حالی که آخری‌ها از آماری فرمی-دیراک پیروی می‌کنند (رک بخش ۱۱). ذرات کلاسیکی همیشه از آماری ماکسول-بولتزمن پیروی می‌کنند. به‌زودی به‌این مسائل باز خواهیم گشت.

همان‌طور که قبلاً دیده‌ایم، عبور به نظریه کوانتومی مستلزم صورتبندی هامیلتونی است. هامیلتونی در این مورد درست عبارت است از انرژی کل که برحسب  $\mathbf{p}^{(q)}$  و  $\mathbf{r}^{(q)}$  بیان شده باشد، یعنی

$$\mathcal{H} = \sum_{q=1}^N \frac{|\mathbf{p}^{(q)}|^2}{2m_q} + \sum_{q=1}^N V(\mathbf{r}^{(q)}) + \frac{1}{2} \sum_q \sum_{i \neq q}^N V(\mathbf{r}^{(q)} - \mathbf{r}^{(i)}) \quad (9-3)$$

$N$  معادله هامیلتونی حرکت عبارتند از

$$-\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_i^{(q)}} = \dot{p}_i^{(q)}; \quad \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i^{(q)}} = \dot{x}_i^{(q)} \quad (9-4)$$

مشابه با (۲-۷۶)، هر تابع بندادی از متغیرهای  $x_i^{(q)}$  و  $p_i^{(q)}$  در معادله حرکت

$$\frac{dA}{dt} = \{A, \mathcal{H}\} + \frac{\partial A}{\partial t} \quad (9-5)$$

صدق می‌کند. گروه پواسنی دو تابع بندادی عبارت است از

$$\{A, B\} = \sum_{q=1}^N \sum_{i=1}^3 \left( \frac{\partial A}{\partial x_i^{(q)}} \frac{\partial B}{\partial p_i^{(q)}} - \frac{\partial B}{\partial x_i^{(q)}} \frac{\partial A}{\partial p_i^{(q)}} \right) \quad (9-6)$$

روابط زیر برای گروه‌های پواسنی به‌سادگی اثبات می‌شوند

$$\{x_i^{(q)}, x_j^{(i)}\} = \{p_i^{(q)}, p_j^{(i)}\} = 0$$

و

$$\{x_i^{(q)}, p_j^{(i)}\} = \delta_{ij} \delta_{qi} \quad (9-7)$$

در واقع، اگر  $A$  و  $B$  به‌ترتیب توابع بندادی وابسته به ذرات  $q$  ام و  $t$  ام باشند، داریم

$$\{A^{(q)}, B^{(i)}\} = 0 \quad (\text{برای } t \neq q)$$

## ۲- گذار به مکانیک کوانتومی

مجموعه‌ای از  $N$  ذره که مختصات و تکانه‌های بندادی آنها  $\mathbf{r}^{(q)}$  و  $\mathbf{p}^{(q)}$  باشند در نظر بگیریم. سپس تناظرهای

$$\begin{aligned}\mathbf{r}^{(q)} &\rightarrow \hat{\mathbf{r}}^{(q)} \\ \mathbf{p}^{(q)} &\rightarrow \hat{\mathbf{p}}^{(q)} \quad (q = 1, \dots, N)\end{aligned}$$

و برای تابع بندادی،

$$A(\mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{p}^{(1)}, \dots, \mathbf{r}^{(N)}, \mathbf{p}^{(N)}) \rightarrow \hat{A}(\hat{\mathbf{r}}^{(1)}, \hat{\mathbf{p}}^{(1)}, \dots, \hat{\mathbf{r}}^{(N)}, \hat{\mathbf{p}}^{(N)})$$

را برقرار نمائیم. می‌خواهیم که تمام عملگرهایی که از نظر فیزیکی مشاهده پذیراند هرمیتی باشند. با استفاده از روابط کروسه پواسنی (۹-۷)، روابط جابه‌جایی اساسی زیر را به دست می‌آوریم

$$[\hat{x}_i^{(q)}, \hat{x}_j^{(t)}] = [\hat{p}_i^{(q)}, \hat{p}_j^{(t)}] = 0$$

و

$$[\hat{x}_i^{(q)}, \hat{p}_j^{(t)}] = \delta_{ij} \delta_{qt} \hat{1} i\hbar \quad (۹-۸)$$

توجه خود را به حالت‌های مانا، یعنی، ویژه حالت‌های انرژی سیستم چندجسمی معطوف می‌کنیم. این حالت‌ها با کت‌هایی نمایانده می‌شوند که در

$$\mathcal{H}|E_\alpha\rangle = E_\alpha|E_\alpha\rangle \quad (۹-۹)$$

صدق می‌کنند\*. در این رابطه  $\mathcal{H}$  هامیلتونی‌ای است که از (۹-۳) به دست آمده است. تاکید می‌کنیم که کت  $|E_\alpha\rangle$  کل سیستم چندذره‌ای را مشخص می‌کند و نه یکی از ذرات تشکیل دهنده آنرا. همین‌طور،  $E_\alpha$  انرژی کوانتیده کل سیستم را بیان می‌کند. شاخص  $\alpha$  مجموعه‌ای از  $N$  عدد کوانتومی را نشان می‌دهد زیرا به همین تعداد درجات آزادی وجود دارد. وقتی ذرات سیستم دارای یک اسپین ذاتی باشند، هرکدام از آنها یک درجه آزادی داخلی به دست می‌آورند. بنابراین برای سیستم‌های با اسپین ذاتی  $N$  ۴ عدد کوانتومی وجود دارد.

---

\* برای مشخص کردن حالت‌های چند ذره‌ای از حروف یونانی برای شاخص‌های پائین استفاده خواهیم کرد.

## ۳ - نمایش مختصای و مکانیک موجی

در حالی که (۹-۹) رابطه‌ای را نشان می‌دهد که کاملاً مستقل از پایه است، مناسب است که مشابه مکانیک موجی آن، یعنی، شکل آن در نمایش مختصای، را به دست آوریم. چون عملگرهای  $\hat{F}^{(q)}$  دویبه دو جابه‌جاپذیراند و ناتبه‌گن فرض می‌شوند، باید یک ویژه‌کت مشترک وجود داشته باشد که دارای ویژگی زیر باشد

$$\hat{F}^{(q)} |r^{(1)} \dots r^{(q)} \dots r^{(N)}\rangle = r^{(q)} |r^{(1)} \dots r^{(q)} \dots r^{(N)}\rangle \quad (q = 1, \dots, N) \quad (9-10)$$

این کت معرف حالتی است که در آن ذره اول دقیقاً در  $r^{(1)}$ ، ذره دوم در  $r^{(2)}$ ، و ... قرار دارد. می‌توان این کت را به صورت یک حاصل ضرب مستقیم

$$\begin{aligned} |r^{(1)} \dots r^{(q)} \dots r^{(N)}\rangle &= |r^{(1)}\rangle \otimes \dots \otimes |r^{(q)}\rangle \otimes \dots \otimes |r^{(N)}\rangle \\ &= |r^{(1)}\rangle \dots |r^{(q)}\rangle \dots |r^{(N)}\rangle \end{aligned}$$

همان‌طور که در مورد اسپین ذاتی در فصل ۶ انجام دادیم، نمایش داد. عملگر  $\hat{F}^{(q)}$  فقط روی کت  $|r^{(q)}\rangle$  عمل می‌کند و برکتهای دیگر تأثیر نمی‌گذارد. چون این کتها قسمتی از یک طیف پیوسته را تشکیل می‌دهند، دارای خاصیت آشکار راست‌هنجاری

$$\langle r^{(1)'} \dots r^{(N)'} | r^{(1)} \dots r^{(N)}\rangle = \delta(r^{(1)'} - r^{(1)}) \dots \delta(r^{(N)'} - r^{(N)})$$

می‌باشند. به‌علاوه، این کتها یک پایه کامل تشکیل می‌دهند و هر کت حالت چند جسمی می‌تواند به صورت

$$|\beta\rangle = \int_N \dots \int_1 dr^{(1)} \dots dr^{(N)} \Psi_\beta(r^{(1)} \dots r^{(N)}) |r^{(1)} \dots r^{(N)}\rangle \quad (9-11)$$

بیان شود. "ضریب"

$$\Psi_\beta(r^{(1)} \dots r^{(N)}) = \langle r^{(1)} \dots r^{(N)} | \beta \rangle \quad (9-12)$$

تابع حالت چندجسمی نامیده می‌شود. طبق اصول موضیع مکانیک کوانتومی، کمیت

$$d\mathcal{P}_\beta = |\Psi_\beta|^2 dr_1 \dots dr_N \quad (9-13)$$

احتمال وجود ذره اول در یک حجم  $dr_1$  حول  $r_1$ ، ذره دوم در  $dr_2$  حول  $r_2$ ، و غیره، را نشان می‌دهد. اگر حالت مقید باشد، باید داشته باشیم

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \Psi_{\beta}(\mathbf{r}^{(1)}, \dots, \mathbf{r}^{(N)})$$

بنابراین می‌توانیم به حالت پایدار رسید. را با استفاده از

$$\langle \beta | \beta \rangle = 1$$

یا

$$\int_{\Delta} \dots \int_{\Delta} |\Psi_{\beta}|^2 d\mathbf{r}^{(1)} \dots d\mathbf{r}^{(N)} = 1$$

بهنجارکنیم. برای حالت‌های پیوسته، انتخاب طرحواره بهنجارش بستگی به مسئله خاص مورد نظر دارد. برای یک گاز ایده‌آل نامقید، معمولاً "بهنجارش جعبه‌ای انجام می‌گیرد (رک بخش ۱۰).

از تعمیم استدلالی که در فصل ۴ برای سیستم‌های یک ذره‌ای ارائه شد، بر می‌آید که عملگرهای چندذره‌ای در مکانیک موجی با جایگذاریهای

$$\hat{\mathbf{r}}^{(q)} \rightarrow \mathbf{r}^{(q)} \quad \text{و} \quad \hat{\mathbf{p}}^{(q)} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla^{(q)} \quad (۹-۱۴)$$

به دست می‌آیند. عملگر گرادیان فقط روی مختصات  $\mathbf{r}^{(q)}$  عمل می‌کند، در حالی که بقیه مختصات را به عنوان ثابت در نظر می‌گیرد. معادله ویژه مقداری انرژی چندذره‌ای شرودینگر (۹-۹) می‌تواند در مکانیک موجی به صورت

$$\mathcal{H} \Psi_{\alpha} = E_{\alpha} \Psi_{\alpha} \quad (۹-۱۵ \text{ الف})$$

نوشته شود که در آن

$$\mathcal{H} = \sum_{q=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m_q} \nabla^{(q)2} + \sum_{q=1}^N V(\mathbf{r}^{(q)}) + \frac{1}{2} \sum_{q \neq q'}^N \sum_{q'} V(\mathbf{r}^{(q)} - \mathbf{r}^{(q')}) \quad (۹-۱۵ \text{ ب})$$

معادله (۹-۱۵) یک معادله دیفرانسیل با مشتقات جزئی برای ویژه تابعهای انرژی چندذره‌ای  $\Psi_{\alpha}(\mathbf{r}^{(1)} \dots \mathbf{r}^{(N)})$  و ویژه مقدارهای  $E_{\alpha}$  است. عموماً نمی‌توان (۹-۱۵) را به معادلات یک جسمی تفکیک کرد. اشکال در حل این معادله از جملات درهم‌کنش دوجسمی ناشی می‌شود. خواهیم دید که وقتی این جملات غایب باشند (۹-۱۵) به‌طور خیلی ساده به  $N$  معادله ویژه مقداری انرژی شرودینگر یک ذره‌ای تفکیک می‌شود.

وقتی طیف و ویژه حالتها تعیین شدند، مقادیر قابل انتظار عملگرهای چندذره‌ای می‌توانند به طریق معمولی محاسبه شوند، یعنی،

$$\begin{aligned}
 \langle A \rangle_\alpha &= \langle E_\alpha | \hat{A}(\hat{\mathbf{r}}^{(1)}, \hat{\mathbf{p}}^{(1)}, \dots, \hat{\mathbf{r}}^{(N)}, \hat{\mathbf{p}}^{(N)}) | E_\alpha \rangle \\
 &= \int \Psi_\alpha^*(\mathbf{r}^{(1)} \dots \mathbf{r}^{(N)}) \hat{A}\left(\mathbf{r}^{(1)}, \frac{\hbar}{i} \nabla^{(1)} \dots \mathbf{r}^{(N)}, \frac{\hbar}{i} \nabla^{(N)}\right) \\
 &\quad \times \Psi_\alpha(\mathbf{r}^{(1)} \dots \mathbf{r}^{(N)}) d\mathbf{r}^{(1)} \dots d\mathbf{r}^{(N)} \quad (9-16)
 \end{aligned}$$

مقادیر قابل انتظار  $\langle A \rangle_\alpha$  و همین‌طور ویژه مقدارهای انرژی  $E_\alpha$  به‌کل سیستم اشاره دارند نه به ذرات تشکیل دهنده آن.

#### ۴ - عملگر جایگشت

گرچه حل دقیق (۹-۱۵) معمولاً غیرممکن است، با این وجود ممکن است خواص گوناگونی از ویژه‌حالتها را با اعمال اصول تقارن نتیجه گرفت. عملگرهای چندجسمی عموماً شامل شاخصهایی وابسته به هر کدام از ذرات هستند. بنابراین بررسی رفتار فیزیکی سیستم در اثر جایگشت این شاخصها جالب خواهد بود. عملگر هرمیتی جایگشت\*  $\hat{P}^{(qt)}$  را با خاصیت

$$\begin{aligned}
 \hat{P}^{(qt)} \hat{A}(1, 2, \dots, q, \dots, t, \dots, N) &= \hat{A}(1, 2, \dots, t, \dots, q, \dots, N) \hat{P}^{(qt)} \\
 (t, q &= 1, \dots, N; \quad t \neq q) \quad (9-17)
 \end{aligned}$$

که در آن  $\hat{A}$  یک عملگر دلخواه چندجسمی است، وارد می‌کنیم. بردن عملگر جایگشت از طرف چپ به طرف راست  $\hat{A}$  به عوض شدن شاخصهای  $q$  و  $t$  منجر می‌شود.

چون دو عمل متوالی عملگر جایگشت باید هر عملگر را ناوردا باقی بگذارد، انتظار داریم که  $\hat{1} = [\hat{P}^{(qt)}]^2$ ، در نتیجه ویژه مقدارهای  $\hat{P}^{(qt)}$  عبارتند از  $\pm 1$ . از این نظر، عملگر جایگشت شبیه عملگر پاریته است. اصطلاحاً گفته می‌شود که ویژه تابعهای  $\hat{P}^{(qt)}$  دارای تقارن معینی (به‌جای پاریته معین) هستند. به‌آنهايي که متناظر با ویژه مقدار  $+1$  هستند می‌گوئیم که از نظر جایگشت متقارن اند و دارای خاصیت زیر هستند

$$\begin{aligned}
 \Psi^S(1, \dots, q, \dots, t, \dots, N) &= \Psi^S(1, \dots, t, \dots, q, \dots, N) \\
 (t, q &= 1, \dots, N) \quad (9-18 \text{ الف})
 \end{aligned}$$

ویژه تابعهای وابسته به ویژه مقدار  $-1$  — پاد متقارن اند و دارای خاصیت زیر می‌باشند

---

۱ این عملگر گاهی عملگر تعویض نامیده می‌شود.



$$\Psi^A(1, \dots, q, \dots, t, \dots, N) = - \Psi^A(1, \dots, t, \dots, q, \dots, N) \quad (9-18 \text{ ب})$$

توجه کنیم که در هر حالت با تقارن معین، چگالی احتمال  $|\Psi|^2$  همیشه نسبت به تعویض شاخصها ناورداست. به طور معادل، در چنین حالتی، ذرات کاملاً "تمیزناپذیرند". اگر عملگری نسبت به جایگشتها متقارن باشد، داریم

$$\begin{aligned} \hat{P}^{(qt)} \hat{A}(1, \dots, q, \dots, t, \dots, N) &= \hat{A}(1, \dots, t, \dots, q, \dots, N) \hat{P}^{(qt)} \\ &= \hat{A}(1, \dots, q, \dots, t, \dots, N) \hat{P}^{(qt)} \\ &\quad (q, t = 1, \dots, N) \end{aligned}$$

یا

$$[\hat{A}, \hat{P}^{(qt)}] = 0 \quad (9-19)$$

بنابراین هر عملگر متقارن (نسبت به جایگشت) همیشه با عملگر جایگشت جابه‌جاپذیر است. اما توجه کنیم که عملگرهای جایگشت عموماً "بین خودشان جابه‌جاپذیر نیستند". به عنوان مثال تابع سه‌ذره‌ای

$$\Psi(x_1, x_2, x_3) = \frac{x_1 x_2}{x_3}$$

را در نظر بگیریم. توجه کنیم که دو عمل جایگشت

$$\hat{P}_{12} \hat{P}_{23} \Psi = \frac{x_2 x_3}{x_1}, \quad \hat{P}_{23} \hat{P}_{12} \Psi = \frac{x_3 x_1}{x_2}$$

معادل نیستند، بنابراین  $\hat{P}_{23}$  و  $\hat{P}_{12}$  عموماً "جابه‌جاپذیر نیستند". خوشبختانه شواهد نشان می‌دهد که طبیعت چیزها را طوری مرتب کرده است که برای ذرات تمیزناپذیر، تنها حالتی که از نظر فیزیکی تحقق‌پذیراند به وسیله تابع حالتی که نسبت به جایگشت دارای تقارن معینی هستند نمایش داده می‌شوند. می‌توان نشان داد که برای هر عملگر متقارن ساختن مجموعه‌ای از ویژه‌تابع‌های با تقارن معین و از نظر فیزیکی کامل، به منظور بسط یک تابع حالت فیزیکی دلخواه وابسته به مجموعه ذراتی که از نظر مکانیک کوانتومی تمیزناپذیراند امکان‌پذیر است. تاکید می‌کنیم که این تقارن (یا پاد تقارن) همیشه نسبت به تعویض هم اسپین و هم مختصات فضایی هر زوج از ذرات در نظر گرفته می‌شود. بنابراین قوانین طبیعت اعتبار قضیه ۶ (از فصل ۳) را محفوظ نگاه می‌دارد. در نتیجه می‌توان فرض کرد که

برای هر هامیلتونی متقارن وابسته به ذرات تمیزناپذیر مجموعه کاملی از ویژه تابعهای انرژی با تقارن معین وجود دارد. از طرف دیگر، اگر عملگر متقارن نباشد، هیچکدام از ویژه حالت‌های آن نمی‌توانند تقارن معینی داشته باشند (قضیه ۴).

اگر هامیلتونی یک سیستم نسبت به جایگشت متقارن نباشد، ذرات مسلماً "متفاوت و تمیزپذیرند". از بحث فوق، ویژه حالت‌های انرژی نمی‌توانند دارای تقارن معینی باشند. از طرف دیگر، اگر ذرات تمیزناپذیر باشند هامیلتونی و تمام عملگرهای مشاهده‌پذیر وابسته باید نسبت به جایگشت متقارن باشند، و براساس موافقت با طبیعت لازم است که ویژه حالت‌های انرژی (و همین‌طور تمام تابع حالت‌های دیگر) نسبت به جایگشت دارای تقارن معینی باشند (یعنی، یا متقارن باشند یا پاد متقارن). آزمایش‌ها نشان داده‌اند که حالت بخصوص تقارن به اسپین ذاتی ذرات تمیزناپذیر مربوط است. تناظر به وسیله اصول موضوع زیر برقرار می‌شود. اصل موضوع (الف) ذرات با اسپین صحیح بوزون نامیده می‌شوند. تمام تابع حالت‌های سیستمهای بوزونهای تمیزناپذیر کاملاً "متقارن اند و دارای خاصیت

$$\Psi^S(1, 2, \dots, t, \dots, q, \dots, N) = + \Psi^S(1, 2, \dots, q, \dots, t, \dots, N)$$

(۲۰-۹ الف) (بوزونها)

می‌باشند.

اصل موضوع (ب) ذرات با اسپین نیمه صحیح فرمیون نامیده می‌شوند. تمام تابع حالت‌های فرمیونهای تمیزناپذیر کاملاً "پاد متقارن اند و دارای خاصیت

$$\Psi^A(1, 2, \dots, t, \dots, q, \dots, N) = - \Psi^A(1, 2, \dots, q, \dots, t, \dots, N)$$

(۲۰-۹ ب) (فرمیونها)

می‌باشند.

شرایط تقارن برای بوزونها و فرمیونهای تمیزناپذیر منجر به آثاری می‌شوند که حتی در رفتار ترمودینامیکی ماکروسکوپیکی‌شان مشهود است. برای فرمیونها، توجه کنیم که وقتی قرار می‌دهیم  $r^{(q)} = r^{(t)} = R$ ، (۲۰-۹ ب) خواهد شد

$$\Psi^A(1, 2, R, \dots, R, \dots, N) = - \Psi^A(1, 2, R, \dots, R, \dots, N)$$

اما، چون فقط تابعی که متحد با صفر است می‌تواند برابر با منفی خود باشد، نتیجه می‌شود که

$$\Psi^A(1, 2, \dots, R, R, \dots, N) = 0$$

بدین ترتیب برای فرمیون‌ها به اصل زیر خواهیم رسید :

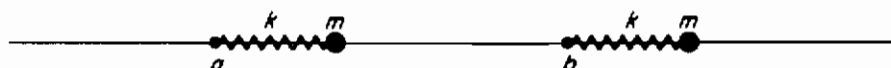
اصل طرد پاولی (شکل عمومی) : احتمال یافتن دو فرمیون تمیزناپذیر در یک نقطه از فضا صفر است\*.

اصل پاولی می‌رساند که اگر یک فرمیون در نقطه بخصوصی قرار داشته باشد، تمام فرمیون‌های دیگر با همان حالت اسپینی را از آن نقطه طرد می‌کند. این دفع آماري صرفاً "مکانیک کوانتومی است و کاملاً" مستقل از نیروهای دینامیکی بین دو ذره است. این دفع از طبیعت تمیزناپذیری دو ذره نشأت می‌گیرد.

بوزون‌های در یک حالت اسپینی اثر کاملاً متضادی روی یکدیگر دارند. برهم‌کنش‌های آماري آنها منجر به جاذبه‌هایی می‌شود که خوشه‌ای شدن ذرات را تقویت می‌کند. این اثر را در بخش ۷ نشان خواهیم داد.

باید خاطرنشان کرد که تمام ذرات یکسان تمیزناپذیر نیستند. به عنوان مثال، دو جرم مشابه بدون برهم‌کنش را در نظر بگیریم که توسط فنرهای به نقاط  $a$  و  $b$  در روی محور  $x$  ها (شکل ۹-۱) مقید شده‌اند. هامیلتونی یک بعدی برای این سیستم عبارت است از

$$\mathcal{H} = \frac{\hat{p}^{(1)2}}{2m} + \frac{\hat{p}^{(2)2}}{2m} + \frac{1}{2} k[(x^{(1)} - a)^2 + (x^{(2)} - b)^2]$$



شکل (۹-۱) دو سیستم مشابه ولی تمیزپذیر

با اینکه ذرات خودشان یکسانند، واقعیت بسته بودن آنها به نقاط مختلف در فضا ناوردائی  $\mathcal{H}$  نسبت به جایگشت (۲  $\leftrightarrow$  ۱) را از بین می‌برد. این ذرات نمی‌توانند به عنوان ذرات تمیزناپذیر در نظر گرفته شوند.

تاکید می‌کنیم که برای اینکه دو ذره تمیزناپذیر باشند لازم است که تمام عملگرهای متناظر با مشاهده‌پذیرهایی که از نظر فیزیکی قابل اندازه‌گیری هستند نسبت به جایگشت متقارن باشند. به عنوان مثال، یک اتم پوزیترونیم بسیار شبیه به اتم هیدروژن است با این تفاوت که پروتون به وسیله پوزیترون، که جرم آن مساوی با جرم الکترون ولی بار آن مخالف بار

---

\* این اثر طرد به فرمیون‌های با مختصات اسپینی یکسان، یعنی مقادیر  $m$ ، یکسان، اعمال می‌شود.

الکترون است، جایگزین شده است. هامیلتونی الکتروستاتیکی برای یک اتم پوزیترونیم منفرد عبارت است از

$$\mathcal{H} = \frac{\hat{p}^{(1)2}}{2m} + \frac{\hat{p}^{(2)2}}{2m} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{r}^{(2)}|}$$

که در آن ۱ و ۲ به ترتیب اشاره به پوزیترون و الکترون دارند. با اینکه این هامیلتونی نسبت به جایگشت متقارن است، دو ذره حقیقتاً تمیزناپذیر نیستند. این مطلب می‌تواند با اعمال یک میدان الکتریکی یکنواخت، که در آن اتم یک انرژی اضافی  $V = -eE \cdot (\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{r}^{(2)})$  با  $e = 4.8 \times 10^{-10} \text{ esu}$  کسب می‌کند، مشاهده شود. هامیلتونی اتم پوزیترونیم در یک میدان الکتریکی دیگر نسبت به جایگشت متقارن نیست، بنابراین ذرات تمیزناپذیر نیستند و حالت‌های با تقارن معین وجود ندارد.

حل معادله شرودینگر برای یک سیستم از ذرات برهم‌کنش‌کننده خیلی مشکل است. اما برای سیستم‌های "ایده‌آل" که در آن‌ها برهم‌کنش‌های دوجسمی نادیده گرفته می‌شوند، همیشه ممکن است (۹-۱۵) را به  $N$  معادله یک ذره‌ای تجزیه‌گرد. بنابراین مسئله چندجسمی ایده‌آل، علی‌الاصول قابل حل است. سیستم‌های ایده‌آل بخصوص وقتی که تقریب نزدیکی از سیستم‌های حقیقی باشند مفیدند. معمولاً، وقتی یک گاز حقیقی به حد کافی رقیق باشد، فاصله بین ذرات زیاد است. برهم‌کنش‌ها قابل صرف‌نظر کردن است و گاز می‌تواند به عنوان یک گاز ایده‌آل در نظر گرفته شود. لیکن، اثرات کوانتومی تمیزناپذیری هنوز می‌توانند برقرار باشند.

## ۵- سیستم‌های ایده‌آل تمیزپذیر

سیستمی از  $N$  ذره تمیزپذیر بدون برهم‌کنش را که هر کدام از آن‌ها دارای جرم متفاوت  $m^{(q)}$  بوده و تحت تاثیر پتانسیل خارجی متفاوت  $V^{(q)} = V^{(q)}(\mathbf{r}^{(q)})$  قرار دارد در نظر بگیریم. معادله شرودینگر برای این سیستم عبارت است از

$$\begin{aligned} \mathcal{H}\Psi_\alpha &= \left\{ \sum_{q=1}^N \frac{-\hbar^2}{2m^{(q)}} \nabla^{(q)2} + V^{(q)}(\mathbf{r}^{(q)}) \right\} \Psi_\alpha(\mathbf{r}^{(1)}, \dots, \mathbf{r}^{(N)}) \\ &= E_\alpha \Psi_\alpha(\mathbf{r}^{(1)}, \dots, \mathbf{r}^{(N)}) \end{aligned} \quad (9-21)$$

با در نظر گرفتن جوابی به شکل

$$\Psi_\alpha = \psi_1^{(1)}(\mathbf{r}^{(1)}) \cdots \psi_j^{(N)}(\mathbf{r}^{(N)}) \quad (9-22)$$

معادله بالا به  $N$  معادله یک ذره‌ای به شکل

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m^{(q)}} \nabla^{(q)2} + V^{(q)} \right\} \psi_i^{(q)}(\mathbf{r}_i^{(q)}) = \varepsilon_i^{(q)} \psi_i^{(q)}(\mathbf{r}_i^{(q)}) \quad (q = 1, \dots, N) \quad (23-9)$$

با

$$E_\alpha = \sum_{q=1}^N \varepsilon_i^{(q)}$$

تفکیک می‌شود. به بیان دیگر وقتی برهم‌کنشها نادیده گرفته می‌شوند، معادله شرودینگر (۹-۲۱) تفکیک می‌شود و هر ذره مجموعه حالت‌های تک‌ذره‌ای  $\psi_i^{(q)}$  و انرژیهای  $\varepsilon_i^{(q)}$  خاص خود را که در یک معادله تک‌ذره‌ای صدق می‌کنند دارد. این حالت‌های تک‌ذره‌ای گاهی اوقات "مدار" نامیده می‌شوند. مدارها در اتمها و مولکولها را در فصل ۵ (بحث خواهیم کرد. چون عموماً "به هر ذره معادله شرودینگر متفاوتی حکم فرماست (یعنی  $m^{(q)} \neq m^{(r)}$  و  $V^{(q)} \neq V^{(r)}$ )، طبیعت طیفها و مدارها از ذره‌ای به ذره دیگر تغییر می‌کند. شاخصهای فوقانی در  $\psi_i^{(q)}$  و  $\varepsilon_i^{(q)}$  مبین این نکته‌اند. چون نماد مداری  $i$  اشاره به سه (وقتی اسپین وجود داشته باشد چهار) عدد کوانتومی دارد نماد حالتی کلی  $\alpha$  مخفف  $N$  ۳ (یا  $N$  ۴) عدد کوانتومی است. حالت کل وقتی معلوم است که مدارهای اشغال شده به وسیله هر ذره داده شده باشند. تابع حالت کل حاصل ضرب ساده‌ای از این توابع مداری است، در حالی که انرژی کل درست مجموع انرژیهای مداری متناظر است.

به عنوان یک مثال، دو ذره بدون اسپین تمیزپذیر به جرمهای  $m_1$  و  $m_2$  واقع در یک چاه پتانسیل یک بعدی بینهایت به عرض  $a$  در نظر بگیریم. معادله شرودینگر عبارت است از

$$\left[ \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2}{dx^{(1)2}} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{d^2}{dx^{(2)2}} \right\} + \{V^{(1)} + V^{(2)}\} \right] \Psi_\alpha(x^{(1)}, x^{(2)}) = E_\alpha \Psi_\alpha(x^{(1)}, x^{(2)}), \quad (24-9)$$

که در آن

$$\begin{aligned} V^{(1)} = V^{(2)} = 0 & \quad , \quad 0 \leq x \leq a \\ V^{(1)} = V^{(2)} = \infty & \quad \text{جا های دیگر} \end{aligned}$$

با استفاده از

$$\Psi_\alpha = \psi_n^{(1)}(x^{(1)}) \psi_{n'}^{(2)}(x^{(2)})$$

این معادله به

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2}{dx^{(1)2}} + V^{(1)} \right\} \psi_n^{(1)}(x^{(1)}) = \varepsilon_n^{(1)} \psi_n^{(1)}(x^{(1)})$$

و

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{d^2}{dx^{(2)2}} + V^{(2)} \right\} \psi_{n'}^{(2)}(x^{(2)}) = \varepsilon_{n'}^{(2)} \psi_{n'}^{(2)}(x^{(2)})$$

تفکیک می‌شود. جوابها، که قبلاً" نیز آنها را دیده‌ایم، عبارتند از

$$\psi_n(x^{(1)}) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin \frac{n\pi}{a} x^{(1)}, \quad \varepsilon_n^{(1)} = \frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\pi^2}{a^2} n^2$$

و

$$\psi_{n'}(x^{(2)}) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin \frac{n'\pi}{a} x^{(2)}, \quad \varepsilon_{n'}^{(2)} = \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\pi^2}{a^2} n'^2$$

( $n, n' = 1, 2, \dots$ )

ویژه حالت‌های انرژی کل و ویژه مقدارها به صورت

$$\Psi_\alpha = \Psi_{n,n'}(x^{(1)}, x^{(2)}) = \frac{2}{a} \sin \frac{n\pi}{a} x^{(1)} \sin \frac{n'\pi}{a} x^{(2)} \quad (۹-۲۵ الف)$$

و

$$E_\alpha = E_{n,n'} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2a^2} \left( \frac{n^2}{m_1} + \frac{n'^2}{m_2} \right) \quad (۹-۲۵ ب)$$

در می‌آیند.

آنچه که باید مشخص شود اعداد کوانتومی حالت‌های  $n$  و  $n'$  است که به وسیله ذرات  $m_1$  و  $m_2$  اشغال شده‌اند. این تجویز یک آرایش نامیده می‌شود. به عنوان مثال، آرایش حالت پایه عبارت است از  $n = 1, n' = 1$  به طوری که

$$\Psi_\alpha = \Psi_{1,1} = \frac{2}{a} \sin \frac{\pi}{a} x^{(1)} \sin \frac{\pi}{a} x^{(2)}$$

و

$$E_{\alpha} = E_{1,1} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2a^2} \left( \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right)$$

این مثال می تواند به راحتی به  $N$  ذره بدون برهم کنش تعمیم داده شود. در اینجا آرایش به وسیله مجموعه ای از اعداد کوانتومی  $n, n', n'', \dots$ ، و غیره، که حالت های مداری اشغال شده به وسیله هر ذره را نشان می دهند مشخص می شود. تاکید می کنیم که یک آرایش تنها وقتی معنی دارد که معادله شرودینگر چند ذره ای اصلی تفکیک پذیر باشد. این وقتی رخ می دهد که سیستم ایده آل باشد. برای سیستم های حقیقی، آرایش های مدارهای مستقل کاملاً" تعریف شده نیستند، اما در روش های وردشی و سایر روش های تقریبی به صورت مفیدی به کار می آیند.

#### ۶- سیستم های ایده آل تمیزناپذیر

وقتی سیستمی از ذرات بدون برهم کنش تمیزناپذیر تشکیل شده است (یعنی  $m_q = m$  و  $V^{(q)} = V$ ) تمام معادلات شرودینگر تک ذره ای یکسان اند و به شکل

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^{(q)2} + V(\mathbf{r}^{(q)}) \right\} \psi_i(\mathbf{r}^{(q)}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}^{(q)}) \quad (9-26)$$

می باشند. چون مدارها و ویژه مقدارهای آنها برای تمام ذرات یکسانند، شاخص فوقانی در  $\psi_i$  و  $\varepsilon_i$  حذف شده است. تابع حالت های کل مشابه با (۹-۲۲) خواهند شد

$$\Psi_{\alpha} = \psi_i(\mathbf{r}^{(1)}) \cdots \psi_j(\mathbf{r}^{(N)}) \quad (9-27 \text{ الف})$$

با

$$E_{\alpha} = \sum_i \varepsilon_i \quad (9-27 \text{ ب})$$

ضرب و جمع روی تمام مدارهای اشغال شده منظور شده است. متأسفانه ضرب ساده در (۹-۲۷) شرط تمیزناپذیری را نقض می کند زیرا  $\Psi_{\alpha}$  نسبت به جایگشت دارای تقارن معینی نیست. اما، می توان همیشه یک تابع که به طور مناسب متقارن شده باشد از (۹-۲۷) ساخت. توجه کنیم که نمادهای مختصه ای در (۹-۲۷) می توانند به تعداد  $N!$  جابه جاشوند. با جمع این حاصل ضرب های جابه جاشده و تقسیم بر  $(N!)^{1/2}$  برای بهنجارش، یک  $\Psi_{\alpha}^s$  با همان انرژی به دست می آوریم که

نسبت به جایگشتها متقارن است .

این عمل را با عملگر متقارن ساز  $\mathcal{S}$  که دقیقاً همان اثر مذکور در بالا را دارد نمایش می‌دهیم ، یعنی ،

$$\Psi_{\alpha}^s = \frac{1}{(N!)^{1/2}} \mathcal{S} \psi_i(\mathbf{r}^{(1)}) \cdots \psi_j(\mathbf{r}^{(N)}) \quad (۹-۲۸)$$

وقتی  $\mathcal{S}$  روی یک حاصل ضرب ساده ، مثل (۲۹-۷ الف) عمل می‌کند ، حاصل جمعی از  $N!$  حاصل ضرب جابه‌جاشده ایجاد می‌کند که خود به خود یک تابع حالت متقارن است . به همین طریق ، می‌توان یک تابع پاد متقارن با استفاده از عملگر پاد متقارن ساز  $\mathcal{A}$  ساخت که دارای خاصیت زیر باشد

$$\Psi_{\alpha}^A = \frac{1}{(N!)^{1/2}} \mathcal{A} \psi_i(\mathbf{r}^{(1)}) \cdots \psi_j(\mathbf{r}^{(N)}) \quad (۹-۲۹)$$

این عمل تقریباً شبیه به عملی است که در (۹-۲۸) انجام شد با این تفاوت که جمله‌هایی که با تعداد فردی جایگشت از حاصل ضرب اولیه حاصل شده‌اند ، به جای اضافه شدن ، تفریق می‌شوند . اثر خالص عبارت است از ایجاد ویژه تابعی که نسبت به جایگشتها پاد متقارن است . روش متقارن سازی را با استفاده از دو ذره واقع در چاه بینهایت بحث شده در بخش ۵ نشان خواهیم داد . اما ، این بار فرض خواهیم کرد که ذرات تمیزناپذیر اند (یعنی ،  $m_1 = m_2$ ) و از اسپین نیز صرف نظر خواهیم کرد .

تابع حالت کل دیگر حاصل ضرب ساده‌ای مثل (۹-۲۵) نیست . متقارن سازی مناسبی نتیجه می‌دهد \*

$$\Psi_{\alpha} = \Psi_{nn'} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \frac{2}{a} \sin \frac{n\pi}{a} x^{(1)} \sin \frac{n'\pi}{a} x^{(2)} \pm \frac{2}{a} \sin \frac{n\pi}{a} x^{(2)} \sin \frac{n'\pi}{a} x^{(1)} \right\} \quad (۹-۳۰ الف)$$

با

$$E_{nn'} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2} (n^2 + n'^2) \quad (۹-۳۰ ب)$$

---

\* برای اختصار نمادهای اسپینی را حذف می‌کنیم و فرض می‌کنیم هر دو ذره در یک حالت اسپینی باشند .



علامت بالائی برای بوزونهاست در حالی که علامت پائینی برای فرمیونهاست. توجه کنیم که در حالی که آرایش به وسیله دو عدد کوانتومی  $n$  و  $n'$  داده می‌شود، هیچکدام از آنها وابسته به یکی از ذرات نیست. چون این ذرات تمیزناپذیراند، فقط می‌گوئیم که حالت‌های مداری  $n$  و  $n'$  را اشغال می‌کنند. دیگر نمی‌توان گفت که کدام یک در کدام حالت است. نمایش دیگری برای یک حالت پاد متقارن با ساختن دترمینان اسلاتراز مدارهای اشغال شده به دست می‌آید، یعنی،

$$\Psi_a^A = \frac{1}{(N!)^{1/2}} \begin{vmatrix} \psi_i(r^{(1)}) & \dots & \psi_j(r^{(1)}) \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_i(r^{(N)}) & \dots & \psi_j(r^{(N)}) \end{vmatrix} \quad (9-31)$$

همان‌طور که با بسط دترمینان می‌توان تحقیق کرد، معادله (۹-۳۱) با (۹-۲۹) یکسان است. دترمینان اسلاتر روش مناسبی برای نمایش حالت فرمیونهای تمیزناپذیر ایده‌آل (به عنوان مثال، الکترونهای رسانشی در یک فلز) است.

اگر دو ذره در یک نقطه از فضا باشند، در این صورت دو سطر از (۹-۳۱) یکسان‌اند و تابع حالت کل صفر خواهد شد. این نکته شکل عمومی اصل پاولی را ثابت می‌کند. اما، هم‌چنین توجه کنیم که اگر دو فرمیون یک مدار را اشغال کنند، دو ستون برابر می‌شوند و دترمینان باز هم صفر می‌شود. این مطلب ما را به شکل خاص اصل پاولی هدایت می‌کند. اصل طرد پاولی (برای فرمیونها): در هر آرایشی، هیچ دو فرمیون تمیزناپذیری نمی‌توانند هردو در یک حالت تک‌ذره‌ای باشند. به‌طور معادل، به‌هیچ دو فرمیونی نمی‌توان یک مجموعه اعداد کوانتومی یکسان نسبت داد.

#### ۷- همبستگیهای آماری در سیستمهای ایده‌آل بوزو فرمی

خاطر نشان شد که حتی در سیستمهای کوانتومی ایده‌آل، بوزونها و فرمیونهای تمیزناپذیر می‌توانند، به‌ترتیب، یکدیگر را جذب و دفع کنند. ما این مطلب را برای دودره آزاد، بدون برهم‌کنش، تمیزناپذیر، در یک بعد، نشان خواهیم داد. چون حالت‌های تک‌ذره‌ای، بدون در نظر گرفتن اسپین، به شکل  $e^{ikx}$  هستند، حالت کل سیستم که به‌طور مناسب متقارن شده است\* (به جز ضریب بهنجارش) عبارت است از

---

\* باز هم فرض می‌کنیم دودره در یک حالت اسپینی قرار دارند و از نمادهای اسپینی صرف‌نظر کرده‌ایم.

$$\Psi_{\alpha} = \Psi_{kk'}(x_1, x_2) = e^{ikx_1}e^{ik'x_2} \pm e^{ikx_2}e^{ik'x_1} \quad (۳۲-۹)$$

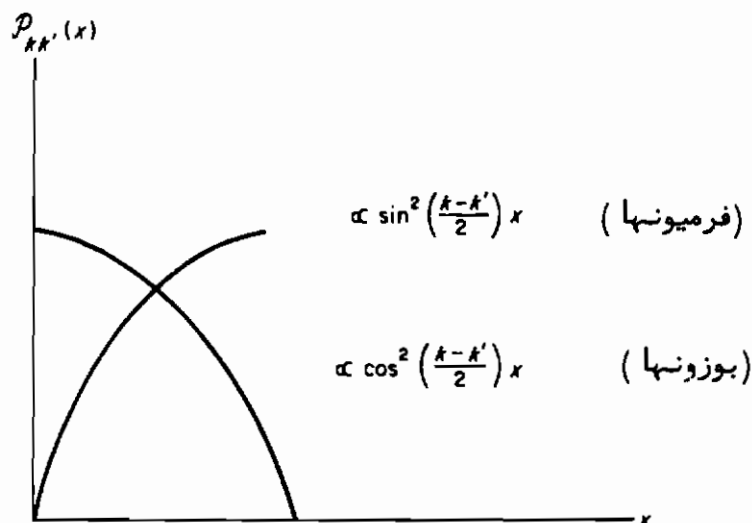
با وارد کردن متغیرهای  $x = x_2 - x_1$  و  $X = \frac{1}{2}(x_2 + x_1)$ ، تابع حالت (۳۲-۹) می‌شود

$$\Psi_{kk'}(x, X) = e^{i(k+k')X} [e^{i(k-k')x/2} \pm e^{-i(k-k')x/2}] \quad (۳۳-۹)$$

متغیرهای  $x$  و  $X$  به ترتیب معرف فاصله نسبی و مرکز جرم دو ذره می‌باشند. با مربع کردن (۳۳-۹) (ضرب آن در مزدوج مختلط خود)، نتیجه می‌شود که چگالی احتمال یافتن سیستم با فاصله بین ذره‌ای  $x$  عبارت است از (شکل ۹-۲)

$$\mathcal{P}_{kk'}(x) \propto \cos^2 \left( \frac{k-k'}{2} \right) x \quad (\text{بوزونها})$$

$$\propto \sin^2 \left( \frac{k-k'}{2} \right) x \quad (\text{فرمیونها}) \quad (۳۴-۹)$$



شکل (۹-۲) نمودار توابعی که نشان‌دهنده احتمال یافتن دو ذره آزادتمیز-ناپذیر با جدائی  $x$  در یک بعد، می‌باشند.

چگالی احتمال در جدائی صفر برای بوزونها بیشینه و برای فرمیونها صفر است (اصل پاولی). به معنی آماری، بوزونها تمایل دارند که در نزدیکی یکدیگر قرار بگیرند در حالی که

فرمیونها طوری حرکت می‌کنند که گوئی فرمیونهای دیگر را طرد می‌کنند\*.  
در عمل، هیچ سیستم ذراتی در حقیقت ایده آل نیست. یک سؤال مهم که باید پاسخ داده شود این است که آیا برهم‌کنشها در یک سیستم حقیقی آنقدر کوچک هستند که اجازه دهند یک سیستم ایده آل به عنوان یک تقریب مرتبه صفر به کار رود یا خیر. ما یک مسئله نمونه‌ای دو الکترونی را در حد ایده آل با فرض اینکه برهم‌کنش کولنی قابل صرف نظر کردن باشد بررسی خواهیم کرد.

### ۸- اتم هلیوم "ایده آل"

اتم هلیوم تشکیل شده است از دو الکترون که به وسیله یک نیروی کولنی به یک هسته با بار  $Ze$  ( $Z=2$ ) مقید شده‌اند. هامیلتونی الکتروستاتیکی عبارت است از

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^{(1)2} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^{(2)2} - \frac{Ze^2}{r^{(1)}} - \frac{Ze^2}{r^{(2)}} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}|} \quad (9-35)$$

اگر از جمله برهم‌کنش صرف نظر کنیم، معادله شرودینگر به دو معادله هیدروژن مانند تفکیک می‌شود که هر کدام از آنها به شکل

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{r} \right\} \psi_{nlm_l m_s} = \varepsilon_{nl} \psi_{nlm_l m_s} \quad (9-36)$$

است که در آن

$$\psi_{nlm_l m_s} = R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \phi) |m_s\rangle \quad (9-37)$$

و\*\*

\* همبستگیهای آماری مخصوصاً در  $(k-k')x \ll 1$  یا  $x \ll 1/(k-k')$  اهمیت پیدا می‌کنند. با توجه به اینکه طول موج دو بروی وابسته به تکانه نسبیه ذرات برابر  $\lambda = 2\pi/(k-k')$  است مشاهده می‌کنیم که شرط فوق می‌تواند به صورت  $x \ll \lambda$  نوشته شود. هم چنین توجه کنیم که برای فرمیونها، تابع احتمال، وقتی دو ذره در یک حالت تکانه قرار دارند (یعنی  $k=k'$ ) متحد با صفر می‌شود.

\*\* چون ویژه تابعهای کولنی یک تبهگنی تصادفی ایجاد می‌کنند، انرژیها مستقل از  $l$  می‌باشند. اما، برای عمومیت بیشتر، انرژی را چنان در نظر خواهیم گرفت که گوئی وابستگی به  $l$  وجود داشته است. در واقع برای اتمهای حقیقی، همانطوری که در فصل ۱۰ خواهیم دید، وضعیت این چنین است.

$$\varepsilon_{nl} = -\frac{Z^2(13.6)}{n^2} = -\frac{54}{n^2} \text{ eV}$$

توابع موج هیدروژن مانند با جایگذاری  $a \rightarrow a/Z$  در (۵-۷۴) به دست می‌آیند. چون الکترون‌ها فرمیون هستند، حالت کل اتم هلیوم ایده‌آل می‌تواند به وسیله دترمینان اسلاتر

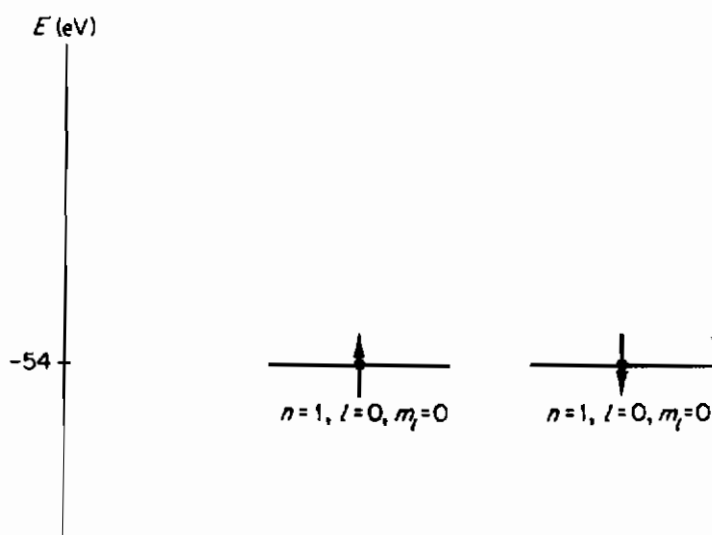
$$\Psi_a = \Psi_{n l m_l m_s}^{n' l' m_l' m_s'} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_{n l m_l m_s}(1) & \psi_{n' l' m_l' m_s'}(1) \\ \psi_{n l m_l m_s}(2) & \psi_{n' l' m_l' m_s'}(2) \end{vmatrix} \quad (۹-۳۸ \text{ الف})$$

نمایش داده شود. انرژی متناظر عبارت است از

$$E_a = E_{n l n' l'} = \varepsilon_{nl} + \varepsilon_{n'l'} = -54 \left( \frac{1}{n^2} + \frac{1}{n'^2} \right) \quad (۹-۳۸ \text{ ب})$$

توجه کنیم که در حالی که برای حالت آرایش هلیوم ایده‌آل هشت عدد کوانتومی مورد نیاز است، انرژی متناظر تنها بستگی به دو تا از این اعداد دارد. بنابراین آرایش‌ها می‌توانند بسیار تبهگن باشند.

برای انرژی حالت پایه داریم  $n = n' = 1$ . چون در این مورد اعداد کوانتومی  $m_l, l', l$  باید همه صفر باشند، از اصل پاولی نتیجه می‌شود که اعداد کوانتومی اسپینی باید متفاوت باشند، یعنی  $m_s = \frac{1}{2}$ ،  $m_s' = -\frac{1}{2}$  (شکل ۹-۳). حالت پایه هلیوم ایده‌آل ناتبهگن و یکتاست و می‌تواند به صورت زیر نوشته شود



شکل (۹-۳) آرایش الکترون‌های هلیوم در حالت پایه. انرژی حالت پایه،

با صرف نظر کردن از برهم‌کنش بین الکترون‌ها، عبارت است از  $E = -54 + (-54) = -108 \text{ eV}$

$$\begin{aligned}\Psi_{100-\frac{1}{2}}^{100-\frac{1}{2}} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_{100}(1) \psi_{100}(2) \begin{vmatrix} |\frac{1}{2}\rangle^{(1)} & |-\frac{1}{2}\rangle^{(1)} \\ |\frac{1}{2}\rangle^{(2)} & |-\frac{1}{2}\rangle^{(2)} \end{vmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_{100}(1) \psi_{100}(2) [|\frac{1}{2}\rangle^{(1)} |-\frac{1}{2}\rangle^{(2)} - |-\frac{1}{2}\rangle^{(1)} |\frac{1}{2}\rangle^{(2)}] \\ &\quad (۹-۳۹ الف)\end{aligned}$$

با

$$E_{nn'} = E_{11} = -54 \left[ \frac{1}{1^2} + \frac{1}{1^2} \right] = -108 \text{ eV} \quad (\text{حالت پایه})$$

(۹-۳۹ ب)

حالت یکبار یونیزه هلیوم متناظر است با اینکه یک الکترون در حالت  $n=1$  و الکترون دیگر در حالت آزاد  $n'=\infty$  قرار داشته باشد. انرژی این حالت عبارت است از

$$E_{nn'} = E_{1\infty} = -54 \left[ \frac{1}{1^2} + \frac{1}{\infty^2} \right] = -54 \text{ eV}$$

بنابراین اولین انرژی یونش (یعنی، انرژی لازم برای اینکه اتم را یکبار یونیزه کند) هلیوم ایده‌آل عبارت است از

$$(E_{1\infty} - E_{11}) = -54 - (-108) = 54 \text{ eV}$$

به‌طور تجربی معلوم شده است که تنها  $24 \text{ eV} \sim$  لازم است تا هلیوم را یکبار یونیزه کند. این اختلاف به‌این حقیقت مربوط می‌شود که دافعه الکترون-الکترون، که به‌فراهند یونش کمک می‌کند، نادیده گرفته شده است. به‌طور وضوح مرتبه بزرگی این اختلاف این راکه ویژه حالت‌های اتم هلیوم ایده‌آل بتوانند شباهتی با ویژه حالت‌های اتم هلیوم حقیقی داشته‌باشند مشکوک می‌سازد. با این همه، همان‌طور که در فصل ۱۵ نشان خواهیم داد، این حالت‌های ایده‌آل می‌توانند با اعمال روش و ردشی و دیگر روش‌های تقریبی اصلاح شوند.

## ۹- حالت‌های برانگیخته در هلیوم

دترمینان اسلاتر در (۹-۳۹) معرف حالتی است که در آن الکترون‌ها مدارهای  $n'l'm_l m_s$  و  $n'l'm_l' m_s'$  را اشغال می‌کنند. برای نمایش این دترمینان از کت

$$|nn' ll' m_l m_l' m_s m_s'\rangle$$

استفاده می‌کنیم. چون اعداد کوانتومی مغناطیسی  $m_l$ ،  $m_l'$ ،  $m_s$  و  $m_s'$  در عبارت انرژی ظاهر نمی‌شوند، انرژی آرایش حداکثر به وسیله مقادیر  $n-l$  تعیین می‌شود. یک آرایش  $n-l$  را با طرحواره زیر نشان می‌دهیم.

$(1s^2)$	$l = 0$ ، $n = 1$	هر دو الکترون در تراز
$(1s^1, 2s^1)$	$l = 0$ ، $n = 1$	یک الکترون در تراز
	$l' = 0$ ، $n' = 2$	و دیگری در تراز
$(1s^1, 2p^1)$	$l = 0$ ، $n = 1$	یک الکترون در تراز
	$l' = 1$ ، $n' = 2$	و دیگری در تراز

آرایش حالت پایه هلیوم یک آرایش  $(1s^2)$  است و، همان‌طور که دیدیم، ناتبهگن است و برای آن  $E_{11} = -108 \text{ eV}$ . آرایش اولین حالت برانگیخته  $(1s^1, 2s^1)$  دارای انرژی

$$E_{12} = -54 \left( \frac{1}{1^2} + \frac{1}{2^2} \right) = -68 \text{ eV}$$

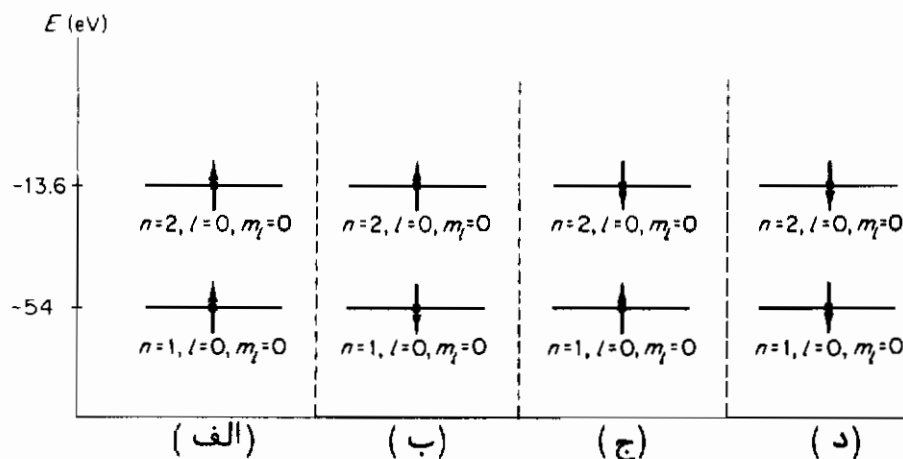
است و دومرتبه تبهگن است. زیر آرایشهای مغناطیسی

$$|1, 2, 0, 0, m_l m_l' m_s m_s'\rangle$$

عبارتند از (شکل ۹-۴)

$$\begin{aligned} \Psi_a &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_{100\frac{1}{2}}(1) & \psi_{200\frac{1}{2}}(1) \\ \psi_{100\frac{1}{2}}(2) & \psi_{200\frac{1}{2}}(2) \end{vmatrix} \\ \Psi_b &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_{100-\frac{1}{2}}(1) & \psi_{200\frac{1}{2}}(1) \\ \psi_{100-\frac{1}{2}}(2) & \psi_{200\frac{1}{2}}(2) \end{vmatrix} \\ \Psi_c &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_{100\frac{1}{2}}(1) & \psi_{200-\frac{1}{2}}(1) \\ \psi_{100\frac{1}{2}}(2) & \psi_{200-\frac{1}{2}}(2) \end{vmatrix} \\ \Psi_d &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_{100-\frac{1}{2}}(1) & \psi_{200-\frac{1}{2}}(1) \\ \psi_{100-\frac{1}{2}}(2) & \psi_{200-\frac{1}{2}}(2) \end{vmatrix} \end{aligned} \quad (9-40)$$

در واقع، تبهگنی یک تراز برابر است با تعداد راههایی که اعداد مغناطیسی می‌توانند، با توجه به محدودیت‌های ناشی از اصل طرد، برای یک آرایش ثابت  $n-l$  مرتب شوند. خواننده باید خود را متقاعد کند که آرایش  $(1s^1, 2p^1)$  در هلیوم دوازده بار تبهگن است.



شکل (۹-۴) چهار آرایش حالت برانگیخته تبهن اول الکترونهای هلیوم. هر کدام از این حالتها دارای انرژی  $E \simeq -68 \text{ eV}$  است.

یک نتیجه تبهنی وابسته به آرایش  $n-l$  عدم یکتایی ویژه حالت‌های انرژی است. انتظار داریم که هر ترکیب خطی به شکل

$$|nn'll'\rangle = \sum_{\substack{m_l, m_s \\ m_l', m_s'}} C_{nlm_l m_s}^{n'l'm_l' m_s'} |nn'll'm_l m_l' m_s m_s'\rangle \quad (۹-۴۱)$$

معرف یک ویژه حالت جدید انرژی اتم هلیوم ایده‌آل با

$$E_{\alpha} = E_{nl} = \varepsilon_{nl} + \varepsilon_{n'l'} \quad (۹-۴۲)$$

باشد. چون علاقه‌مندیم آن حالت‌های اتمی ایده‌آل را ایجاد کنیم که به‌بهترین وجهی به حالت‌های اتم هلیوم حقیقی نزدیک باشند، باید حالت‌هایی در (۹-۴۱) بسازیم که ماتریس پریشیدگی را، که در این مورد برهم‌کنش الکتروستاتیکی الکترون، یعنی

$$\lambda \mathcal{V} = \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}|} \quad (۹-۴۳)$$

است، قطری کند. دترمینانهای اسلاتر در (۹-۴۵) خودشان در این شرط صدق نمی‌کنند. چون یک روش سراسر قطری کردن بسیار پیچیده است، مسئله را با استفاده از استدلال‌های فیزیکی ساده می‌کنیم.

بهتر است که نخست عملگرهای چند جسمی زیر را وارد کنیم

$$\hat{L}^{(T)} = \hat{L}^{(1)} + \hat{L}^{(2)} \quad (\text{عملگر تکانه زاویه‌ای کل})$$

$$\hat{S}^{(T)} = \hat{S}^{(1)} + \hat{S}^{(2)} \quad (\text{عملگر اسپین کل})$$

مولفه‌های این عملگرها طبیعتاً در روابط

$$[\hat{L}_i^{(T)}, \hat{L}_j^{(T)}] = i\hbar \hat{L}_k^{(T)}$$

$$(ijk = xyz \text{ در ترتیب دوره‌ای } (۴۴-۹))$$

$$[\hat{S}_i^{(T)}, \hat{S}_j^{(T)}] = i\hbar \hat{S}_k^{(T)}$$

صدق می‌کنند. این عملگرها، همان‌طور که به راحتی می‌توان تحقیق کرد، با هامیلتونی‌هلیوم ایده‌آل، یعنی، با هامیلتونی‌ای که در آن جمله برهم‌کنش مساوی صفر فرض می‌شود، جابه‌جاپذیراند. در نتیجه، می‌توان فرض کرد که مجموعه‌ای از ویژه‌حالتها با خواص زیر وجود دارد

$$\mathcal{H}_0 |E_\alpha LSM_L M_S\rangle = E_\alpha |E_\alpha LSM_L M_S\rangle \quad (E_\alpha = \varepsilon_{n,l} + \varepsilon_{n',l'})$$

$$\hat{L}^{(T)2} |E_\alpha LSM_L M_S\rangle = L(L+1)\hbar^2 |E_\alpha LSM_L M_S\rangle$$

$$\hat{S}^{(T)2} |E_\alpha LSM_L M_S\rangle = S(S+1)\hbar^2 |E_\alpha LSM_L M_S\rangle \quad (۴۵-۹)$$

$$\hat{L}_Z^{(T)} |E_\alpha LSM_L M_S\rangle = M_L \hbar |E_\alpha LSM_L M_S\rangle \quad (|M_L| \leq L)$$

$$\hat{S}_Z^{(T)} |E_\alpha LSM_L M_S\rangle = M_S \hbar |E_\alpha LSM_L M_S\rangle \quad (|M_S| \leq S)$$

که مقادیر  $L$  و  $S$  باید تعیین شوند. آنچه که می‌توانیم بگوئیم، براساس (۴۴-۹)، این است که این مقادیر یا صحیح‌اند یا نیمه‌صحیح.

آنچه که در باره عملگرهای  $\hat{L}^{(T)}$  و  $\hat{S}^{(T)}$  غیرعادی است این است که با هامیلتونی کل (۳۵-۹) نیز جابه‌جاپذیراند. به‌طور معادل، این مشاهده‌پذیرها، حتی در حضور دافعه الکتروستاتیکی بین الکترون‌ها، پایسته‌اند. بنابراین حالت‌های اتمی اتم هلیوم حقیقی ویژه حالت‌های همزمان  $\hat{L}^{(T)}$  و  $\hat{S}^{(T)}$  هستند و به‌نظر موجه می‌آید که حالت‌های مذکور در فوق، (۴۵-۹)، تقریب‌های مرتبه صفر مناسبی باشند. یک محاسبه مستقیم، ولی نه آنقدر ساده، نشان می‌دهد که حالت‌های (۴۵-۹) حقیقتاً "جمله پریشیدگی الکتروستاتیکی را قطری می‌کنند. آنچه که می‌ماند پیدا کردن ضرایبی است که دترمینانهای اسلاتر را به حالت‌های اتمی مربوط کنند، یعنی،

$$|E_\alpha LSM_L M_S\rangle = \sum_{m_l, m_s} \sum_{m_l', m_s'} C_{nlm_l m_s, n'l'm_l' m_s'} |nn'll'm_l m_l' m_s m_s'\rangle \quad (۴۶-۹)$$



این ضرایب کلبش - گوردان خیلی پیچیده تر از آن هستند که بتوان آنها را در اینجا محاسبه کرد، اما محاسبات مزبور می‌توانند با استفاده از روشهای نظریه گروه تا حدی ساده شوند. ما صرفاً به ذکر این نکته قناعت می‌کنیم که این ضرایب در جدولها وجود دارند\*.

ساختن ویژه حالت‌های اتمی  $\hat{L}^{(T)}$  و  $\hat{S}^{(T)}$  به طریق (۶-۴۹) به نام ترکیب  $L-S$  یا ترکیب راسل<sup>۱</sup> - ساوندرز<sup>۲</sup> موسوم است. می‌توان مقادیر مجاز  $L$  و  $S$  برای آرایش داده شده  $n-l$  را با استفاده از مدل برداری که در فصل ۶ آمد نتیجه‌گیری کرد. این مدل پیشگوئی می‌کند که مقادیر مجاز  $L$  و  $S$  با فواصل عدد صحیح تغییر می‌کنند و محدود به روابط

$$|l - l'| \leq L \leq l + l' \quad \text{و} \quad |s - s'| \leq S \leq s + s' \quad (۹-۴۷)$$

هستند. چون برای الکترون‌ها داریم  $s = s' = \frac{1}{2}$ ، عدد کوانتومی اسپین کل برای حالت‌های اتمی هلیوم یا  $S = 0$  است یا  $S = 1$ . در یک آرایش  $(1s^1, 2p^1)$ ، یعنی  $l = 0$  و  $l' = 1$ ، مقادیر مجاز  $L$  عبارتند از  $L = 0$  یا  $L = 1$ . یک هشدار در اینجا لازم است. یادآوری کنیم که جمع (۹-۴۶) تنها روی آن آرایشهایی انجام می‌شود که با اصل طرد پاولی سازگاراند. اما، مدل برداری حالت‌هایی ایجاد می‌کند که بعضی از آنها تنها می‌توانند از آرایشهایی که این اصل را نقض می‌کنند ساخته شوند. در نتیجه مدل مزبور در واقع یک حد بالایی برای مقادیر مجاز  $L$  و  $S$  به دست می‌دهد. بعضی از این مقادیر باید به وسیله اصل طرد پاولی رد شوند. اصل طرد بخصوص وقتی که آرایشهایی را که در آنها الکترون‌ها دارای اعداد کوانتومی اصلی  $(n)$  و مداری  $(l)$  یکسان باشند ترکیب می‌کنیم، موثر است. در این مورد، گفته می‌شود که الکترون‌ها هم‌ارزند. بنابراین باید دقت شود که در پیوند الکترون‌های هم‌ارز بعضی از حالتها که توسط مدل برداری پیش‌بینی می‌شوند، حذف شوند.

آرایش حالت پایه هلیوم عبارت است از  $(1s^2)$ . در این حالت، با الکترون‌های هم‌ارز سروکار داریم زیرا  $n = n' = 1$  و  $l = l' = 0$ . چون اصل طرد پاولی تنها یک زیر آرایش مغناطیسی (یعنی  $m_1 = 0, m_1' = 0, m_s = \frac{1}{2}, m_s' = -\frac{1}{2}$ ) را مجاز می‌داند، ایسن تراز ناتبهن و یکتا است. هر طبق مدل برداری (۹-۴۷)، حالت‌های اتمی با  $L = 0$ ،  $S = 0$  و  $S = 1$  امکان‌پذیر هستند. اما حالت اخیر دارای سه زیر حالت مغناطیسی

1- Russel

2- Saunders

\* به عنوان مثال به کتاب زیر رجوع کنید

A. Messiah, "Quantum Mechanics," Volume II, P. 1054. Wiley, New York, 1962,.

$(M_s = \pm 1, M_s = 0)$  است که تبه‌گن/ند و بنابراین نمی‌توانند معرف حالت پایه باشند. لذا می‌توانیم حالت پایه هلیوم را به صورت زیر مشخص کنیم (رک ۹-۳۹)

$$\begin{aligned} |(1s^2)\rangle &= |ELSM_L M_S\rangle = |-108, 0, 0, 0, 0\rangle \\ &= [1/\sqrt{2}]\psi_{100}(1)\psi_{100}(2) \\ &\quad \times \{|\frac{1}{2}\rangle^{(1)}|-\frac{1}{2}\rangle^{(2)} - |\frac{1}{2}\rangle^{(2)}|-\frac{1}{2}\rangle^{(1)}\} \quad (۴۸-۹) \end{aligned}$$

به بیان دیگر، چون حالت پایه هلیوم ناتبه‌گن است، دترمینان اسلاتر در طرف راست (۴۸-۹) نیز یک ویژه حالت  $\hat{S}_Z^{(T)2}$ ،  $\hat{L}_Z^{(T)}$ ،  $\hat{L}^{(T)2}$  و  $\hat{S}^{(T)}$  با ویژه مقدارهای  $L = S = M_L = M_S = 0$  است. چهار دترمینان برانگیخته اسلاتر در (۴۰-۹) که متناظر با آرایش  $(1s^1, 2s^1)$  هستند، می‌توانند طبق مدل برداری، به صورت  $S = 0$ ،  $L = 0$  یا  $S = 1$ ،  $L = 0$  ترکیب شوند. چون اولی ناتبه‌گن و دومی سه‌بار تبه‌گن است، تبه‌گنی کل تراز، همان‌طور که انتظار می‌رفت، چهارگانه است. در این مورد هر دو حالت ایجاد شده به وسیله مدل برداری با اصل پاولی سازگارند. این نتیجه قابل انتظار بود زیرا الکترون‌ها در آرایش  $(1s^1, 2p^1)$  غیر هم‌ارزاند (یعنی  $m \neq m'$ ).

بدون اثبات بیان می‌کنیم که ضرایب کلبش-گوردان در (۴۱-۹) برای آرایش  $(1s^1, 2s^1)$  حالت‌های اتمی زیر را می‌دهند،

$$\begin{aligned} &|E, L, S, M_L, M_S\rangle \\ S=0 &\left\{ \begin{aligned} |-68, 0, 0, 0, 0\rangle &\rightarrow \frac{\{\psi_{100}(1)\psi_{200}(2) + \psi_{100}(2)\psi_{200}(1)\}}{\sqrt{2}} \\ &\quad \times \frac{\{|\frac{1}{2}\rangle^{(1)}|-\frac{1}{2}\rangle^{(2)} - |\frac{1}{2}\rangle^{(2)}|-\frac{1}{2}\rangle^{(1)}\}}{\sqrt{2}} \end{aligned} \right. \\ S=1 &\left\{ \begin{aligned} |-68, 0, 1, 0, 1\rangle &\rightarrow \frac{\{\psi_{100}(1)\psi_{200}(2) - \psi_{100}(2)\psi_{200}(1)\}}{\sqrt{2}} |\frac{1}{2}\rangle^{(1)}|\frac{1}{2}\rangle^{(2)} \\ |-68, 0, 1, 0, 0\rangle &\rightarrow \frac{\{\psi_{100}(1)\psi_{200}(2) - \psi_{100}(2)\psi_{200}(1)\}}{\sqrt{2}} \\ &\quad \times \frac{\{|\frac{1}{2}\rangle^{(1)}|-\frac{1}{2}\rangle^{(2)} + |\frac{1}{2}\rangle^{(2)}|-\frac{1}{2}\rangle^{(1)}\}}{\sqrt{2}} \\ |-68, 0, 1, 0, -1\rangle &\rightarrow \frac{\{\psi_{100}(1)\psi_{200}(2) - \psi_{100}(2)\psi_{200}(1)\}}{\sqrt{2}} |-\frac{1}{2}\rangle^{(1)}|-\frac{1}{2}\rangle^{(2)} \end{aligned} \right. \quad (۴۹-۹) \end{aligned}$$

این چهار حالت برانگیخته دارای خواص زیراند .

( الف ) با وجودی که خودشان دترمینان اسلاتر نیستند ، اما ترکیباتی خطی از چهار دترمینان داده شده در (۹-۴) می‌باشند .

( ب ) ویژه تابعهای  $\hat{S}_2^{(T)}$ ،  $\hat{L}_2^{(T)}$ ،  $\hat{S}^{(T)2}$ ،  $\hat{L}^{(T)2}$  هستند . در اولین حالت داریم  $L = S = M_L = M_S = 0$  ؛ چون تبهگنی مغناطیسی  $(2S + 1)$  برابر یک است ، این حالت یک حالت یگانه است . سه حالت آخر متعلق به مقدار  $S = 1$  است و  $M_S$  آنها به ترتیب برابرند با  $0$ ،  $+1$  و  $-1$  . بنابراین حالت  $S = 1$  یک حالت سه‌گانه را بیان می‌کند . تبهگنی اسپینی ،  $2S + 1$  ، چندگانگی حالت نامیده می‌شود .

( ج ) همه آنها دارای انرژی

$$E_{12} = -54 \left( \frac{1}{1^2} + \frac{1}{2^2} \right) = -68 \text{ eV}$$

هستند .

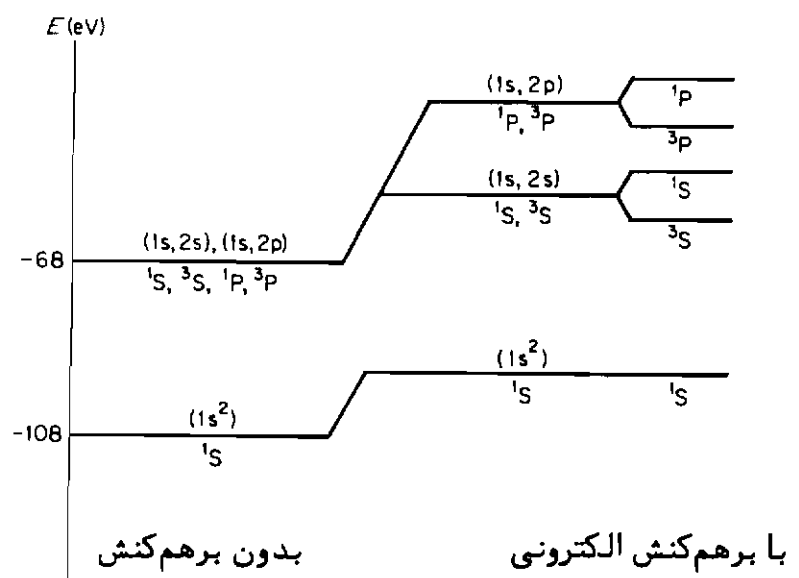
( د ) همه آنها از یک قسمت فضائی متقارن و یک قسمت اسپینی پاد متقارن یا برعکس تشکیل شده‌اند ، در نتیجه ، هرکدام از آنها کلا " پاد متقارن است ، همان‌طور که برای فرمیونها لازم است .

( ه ) مهم‌تر از همه ، جمله برهم‌کنش الکتروستاتیکی در (۹-۳۵) را قطری می‌کنند و بنابراین یک تقریب مرتبه صفر مناسبی برای ویژه حالت‌های انرژی اتم هلیوم حقیقی تشکیل می‌دهند .

مقادیر  $L$  و  $S$  یک حالت اتمی از نظر طیف نمائی با به‌کاربردن یک حرف بزرگ برای نمایش مقدار  $L$  و یک شاخص بالا برای نمایش چندگانگی  $2S + 1$  نشان داده می‌شوند . به‌عنوان مثال ، حالت  $1S$  دارای  $L = S = 0$  است ، در حالی که  $3P$  دارای  $L = 1$  و  $S = 1$  می‌باشد .

آرایش  $(1s^1, 2p^1)$  در هلیوم دوازده‌بار تبهگن است . طبق مدل برداری ، می‌توانیم آرایش مغناطیسی را با حالت‌های اتمی با  $L = 1$ ،  $S = 0$  ( $1P$ ) و  $L = 1$ ،  $S = 1$  ( $3P$ ) ترکیب کنیم . چون حالت اخیر نه‌بار و حالت قبلی سه‌بار تبهگن است تبهگنی کل دوازده‌گانه است . مجدداً ، چون الکترون‌ها غیر هم‌ارزاند ، هیچکدام از حالت‌های اتمی مذکور در فوق رد نمی‌شوند . به‌علت تبهگنی تصادفی ، آرایشهای  $(1s^1, 2s^1)$  و  $(1s^1, 2p^1)$  هر دو دارای یک انرژی هستند ، در نتیجه حالت‌های  $1S$ ،  $3S$ ،  $1P$  و  $3P$  همه دارای انرژی  $68 \text{ eV}$  می‌باشند . وقتی نظریه پریشیدگی مرتبه اول به برهم‌کنش الکتروستاتیکی اعمال شود (فصل ۱۰) ، انرژیهای این

حالت‌ها برحسب مقادیر  $L$  و  $S$  مربوطه‌شان جابه‌جا می‌شوند (شکل ۹-۵). در فصل ۱۰ نشان خواهیم داد که اصل طرد پاولی به‌صورت یک قاعده (قاعده هاند<sup>۳</sup>) باعث می‌شود که، برای یک آرایش معین، حالت‌های با چندگانگی بالاتر انرژی کمتری داشته باشند. در نتیجه، در آرایش  $(1s^1, 2s^1)$ ، حالت  $^3S$  انرژی کمتری از حالت  $^1S$  دارد. هم‌چنین در آرایش  $(1s^1, 2p^1)$ ، حالت  $^3P$  پائین‌تر از حالت  $^1P$  قرار می‌گیرد (شکل ۹-۵).



شکل (۹-۵) جابه‌جایی انرژی حالت‌های اتمی ایده‌آل در هلیوم وقتی که برهم‌کنش الکترونی در نظر گرفته می‌شود.

هرچند بحث فوق مربوط به اتم هلیوم است، روش مذکور می‌تواند به اتم  $Z$  الکترونی تعمیم داده شود. اگر پریشیدگی غالب برهم‌کنش الکتروستاتیکی باشد، باید دترمینانهای اسلاتر را به‌ویژه حالت‌های  $\hat{L}^{(T)} = \sum_{i=1}^Z \hat{L}^{(i)}$  و  $\hat{S}^{(T)} = \sum_{i=1}^Z \hat{S}^{(i)}$  پیوند دهیم. مدل برداری برای حالت‌های جفت‌شده  $L-S$  منجر به محدودیت‌های زیر در مقادیر  $L$  و  $S$  می‌شود.

$$|1 + 1' + 1'' \dots|_{\min} \leq L \leq (1 + 1' + 1'' + \dots) \quad (9-50)$$

$$|s + s' + s'' + \dots|_{\min} \leq S \leq (s + s' + s'' + \dots) \quad (s = s' = s'' = \dots = \frac{1}{2})$$

معنی جمله  $| \dots |_{\min}$  این است که بردارها طوری جمع می‌شوند که اندازه برآیند کمینه باشد. در نگاه اول چنین به‌نظر می‌رسد که وقتی عدد اتمی  $Z$  افزایش می‌یابد، تعداد حالت‌های

اتمی ممکن برای یک آرایش معین به‌طور هماهنگ افزایش می‌یابد. در واقع، به‌خاطر اصل طرد پاولی، بسیاری از حالت‌های جفت‌شده که توسط مدل برداری پیش‌بینی می‌شوند غایبند. در واقع، اتم‌ها در حالت پایه معمولاً تعداد زیادی الکترون هم‌ارز دارند. می‌توان نشان داد که در یک آرایش داده شده تعداد زیرآرایش‌های مغناطیسی که با اصل طرد پاولی سازگارند با فرمول

$$\text{تبهگنی} = \frac{g!}{k!(g-k)!}$$

داده می‌شود که در آن  $g$  تعداد حالت‌ها در خارجی‌ترین زیرلایه پر نشده، یعنی  $2(2l+1)$  و  $k$  تعداد الکترون‌ها در این زیرلایه است. بنابراین، به‌عنوان مثال، اگر اتمی در حالت پایه یک لایه خارجی کاملاً پر شده داشته باشد، یعنی  $g=k$ ، در این صورت آرایش ناتبهگن است و فقط می‌تواند به یک حالت  $^1S$ ، همان‌طور که در مورد هلیوم بود، قرار گیرد. بنابراین تعداد حالت‌های اتمی (جمله‌های طیفی) برای یک آرایش حالت پایه معین، به‌وسیله خارجی‌ترین زیرلایه تعیین می‌شود. در جدول (۹-۱) جمله‌های طیفی ممکن را برای الکترون‌های هم‌ارز  $s$  و  $p$  در یک زیرلایه خارجی نشان داده‌ایم. توجه کنیم که بعضی جملات ایجاد شده به‌وسیله مدل برداری، به‌خاطر اصل طرد پاولی، غایب هستند. هم‌چنین توجه کنیم که تبهگنی وابسته به زیرآرایش‌های مغناطیسی برای یک آرایش  $n-l$  داده شده برابر است با تبهگنی کل حالت‌های اتمی که از طرحواره جفت‌شدگی  $L-S$  ایجاد شده‌اند. تبهگنی یک آرایش  $n-l$  در اتم‌هایی که زیرلایه خارجی آنها نیمه‌پر است بیشترین مقدار را دارد. در این مورد، فرایند جفت‌شدگی پیچیده‌ترین است.

جدول (۹-۱)

حالت‌های مجاز در طرحواره جفت‌شدگی  $L-S$  برای الکترون‌های هم‌ارز در یک زیرلایه پر نشده خارجی

تبهگنی زیرآرایش‌های مغناطیسی	آرایش $n-l$	حالت‌های اتمی (جملات طیفی)	تبهگنی حالت‌های اتمی
$\frac{g!}{k!(g-k)!}$			$\sum (2S+1)(2L+1)$
2	$(\dots ns^1)$	$^2S$	2
1	$(\dots ns^2)$	$^1S$	1
6	$(\dots np^1)$	$^2P$	6
15	$(\dots np^2)$	$^1S, ^1D, ^3P$	15
20	$(\dots np^3)$	$^2P, ^2D, ^4S$	20
15	$(\dots np^4)$	$^1S, ^1D, ^3P$	15
6	$(\dots np^5)$	$^2P$	6
1	$(\dots np^6)$	$^1S$	1

هم‌چنین ممکن است با ترکیب حالت‌های  $|ELSM_L M_S\rangle$  به‌ویژه حالت‌های  $|ELSJM_J\rangle$  رسید.  $J_z^{(T)} = \hat{L}_z^{(T)} + \hat{S}_z^{(T)}$  و  $J^{(T)2} = |\hat{L}^{(T)} + \hat{S}^{(T)}|^2$  نمایش می‌دهیم. مدل برداری  $J$  را طبق  $|L - S| \leq J \leq L + S$ ، با  $|M_J| \leq J$ ، محدود می‌کند. هردو مجموعه حالت‌های راسل - ساوندرز هستند و هردو پریشیدگی الکتروستاتیکی را قطری می‌کنند. ضرایب کلبش - گوردان برای این جفت‌شدگی از نظر شکل با ضرایبی که در مورد الکترون هیدروژنی به‌کاررفت یکسانند. اگر پریشیدگی ثانوی از آثار اسپین - مداری (میدان‌های خارجی قوی وجود ندارند) ناشی شده باشد مجموعه انتخابی  $|ELSJM_J\rangle$  است. برای نمایش این مطلب از نظر طیف نمایی، یک شاخص پائینی برای نمایاندن مقدار  $J$  اضافه می‌کنیم، به‌عنوان مثال،  $|ELSJM_J\rangle = |E, 2, 1, 3, M_J\rangle$ ، به‌صورت  $^3D_3$  نوشته می‌شود. برای اتم‌های با عدد اتمی خیلی بالا نتیجه می‌شود که پریشیدگی‌های غالب از آثار اسپین - مداری ناشی می‌شوند. در این صورت، حالت‌های اتمی راسل - ساوندرز  $(L-S)$  پریشیدگی را قطری نمی‌کنند. برای اتم‌های با  $Z$  بزرگ یک طرحواره جفت‌شدگی لازم است که به آن جفت‌شدگی  $j-j$  می‌گویند. بحث جفت‌شدگی  $j-z$  می‌تواند در هر کتاب درسی متعارفی در باره نظریه اتمی یافت شود\*.

### ۱۰- گاز ایدمال کوانتومی

در نظریه جامدات، مایعات و گازها تعداد ذرات سیستم معمولاً از مرتبه  $10^{23}$  هستند. چون ذرات در جامدات و مایعات عموماً به‌طور شدید برهم‌کنش می‌کنند، این سیستم‌ها نمی‌توانند به‌عنوان سیستم‌های ایده‌آل در نظر گرفته شوند. در مورد گازهای رقیق فاصله بین ذرات معمولاً آنقدر زیاد است که می‌توان آنها را ایده‌آل در نظر گرفت. با این وجود، در بعضی موارد، طبیعت تمیزناپذیری ذرات گاز نقش مهمی در رفتار ماکروسکوپیکی آن بازی می‌کند. به‌عنوان مثال،  $^4\text{He}$  (یک‌بوزون) در درجات حرارت پائین رفتاری کاملاً متفاوت از  $^3\text{He}$  (یک فرمیون) دارد. چون این دو اتم ایزوتوپ یکدیگرند، دارای خواص شیمیایی یکسانی می‌باشند. اختلاف در اسپین‌های هسته‌ای آنها منشاء رفتار ترمودینامیکی

\* به‌عنوان مثال به‌کتاب زیر مراجعه کنید

E.U. Condon and G.H. Shortley, "The Theory of Atomic Spectra", Chapter X. Cambridge Univ. Press, London and New York, 1963.

کاملاً متفاوت آنهاست .

هامیلتونی مجموعه‌ای از ذرات تمیزناپذیر ایده آل در یک جعبه بزرگی به حجم  $\mathcal{V}$  عبارت است از

$$\mathcal{H} = \sum_{q=1}^N \frac{p^{(q)2}}{2m} + \mathcal{V}^{(q)} \quad , \quad \begin{array}{l} \mathcal{V}^{(q)} = 0 \quad \text{در داخل} \\ \mathcal{V}^{(q)} = \infty \quad \text{در جای دیگر} \end{array} \quad (9-51)$$

حالت‌های تک‌ذره‌ای (بهنجار شده جعبه‌ای) و انرژی‌های آنها عبارتند از

$$\psi_{\mathbf{k}, m_s} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} |m_s\rangle \quad \text{و} \quad \varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (9-52)$$

که مقادیر مجاز بردار کوانتومی  $\mathbf{k}$  به وسیله

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{\mathcal{V}^{1/3}} (n_x \mathbf{i} + n_y \mathbf{j} + n_z \mathbf{k}), \quad n_x, n_y, n_z = \text{اعداد درست}$$

داده می‌شوند . حالت‌های کل برای بوزونها حاصل ضرب‌های متقارن شده‌ای به شکل

$$|\alpha\rangle = |\text{کلی}\rangle \rightarrow \frac{1}{(N!)^{1/2}} \mathcal{P} \psi_{\mathbf{k}, m_s}(1) \psi_{\mathbf{k}', m_{s'}}(2) \cdots \psi_{\mathbf{k}^{(N)}, m_s^{(N)}}(N) \quad (9-53)$$

هستند . حالت‌های فرمیون‌ها می‌توانند بر حسب دترمینان‌های اسلاتر  $N \times N$  به صورت

$$|\alpha\rangle = |\text{کلی}\rangle \rightarrow \frac{1}{(N!)^{1/2}} \begin{vmatrix} \psi_{\mathbf{k}, m_s}(1) & \cdots & \psi_{\mathbf{k}^{(N)}, m_s^{(N)}}(1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{\mathbf{k}, m_s}(N) & \cdots & \psi_{\mathbf{k}^{(N)}, m_s^{(N)}}(N) \end{vmatrix} \quad (9-54)$$

نوشته شوند . برای کوتاه کردن نمادگذاری‌ها در مسئله چندجسمی ، توجه کنیم که وقتی اعداد اشغال حالت‌های تک ذره‌ای ،  $n_{\mathbf{k}, m_s}$  ، داده شده باشند می‌توانیم تابع حالت با تقارن مناسب را بسازیم . قرار می‌دهیم

$$|\alpha\rangle = |\{n_{\mathbf{k}, m_s}\}\rangle$$

که در آن عدد کوانتومی  $\alpha = \{n_{\mathbf{k}, m_s}\}$  معرف دنباله‌ای از اعداد درست است که تعداد ذرات در حالت تک ذره‌ای  $\psi_{\mathbf{k}, m_s}$  را نشان می‌دهند . برای فرمیون‌ها ، این محدودیت دیگر را داریم که  $n_{\mathbf{k}, m_s}$  باید یا یک باشد یا صفر (اصل طرد پاولی) . انرژی کل گاز عبارت است از

$$E_{\alpha} = \sum_{\mathbf{k}, m_s} n_{\mathbf{k}, m_s} \varepsilon_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}, m_s} n_{\mathbf{k}, m_s} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (9-55)$$

البته، اعداد اشغال باید در رابطه

$$N = \sum_{\mathbf{k}, m_s} n_{\mathbf{k}, m_s} \quad (9-56)$$

صدق کنند. در حالت پایه یک گاز بوزونی ایده‌آل، هر ذره در حالت پائین‌ترین انرژی قرار دارد. از طرف دیگر، یک گاز فرمی ایده‌آل، نظیر الکترون‌ها در یک فلز، دارای یک ذره در هر کدام از  $N$  حالت پائین‌ترین انرژی است. پراورزی‌ترین تراز اشغال شده در حالت پایه تراز فرمی نامیده می‌شود.

### ۱۱- نمایش $N$ ، عملگر چگالی، آمار کوانتومی

یک آرایش داده شده  $\{n_{\mathbf{k}, m_s}\}$  از یک سیستم چند ذره‌ای می‌تواند به وسیله انرژی سیستم  $E_\alpha = \sum_{\mathbf{k}, m_s} n_{\mathbf{k}, m_s} \epsilon_{\mathbf{k}}$  و تعداد کل ذرات آن،  $N = \sum_{\mathbf{k}, m_s} n_{\mathbf{k}, m_s}$ ، نمایش داده شود. از نمادگذاری زیر (برای سیستم‌های ایده‌آل) استفاده خواهیم کرد

$$|E_\alpha, N\rangle = |\alpha\rangle = |\{n_{\mathbf{k}, m_s}\}\rangle \quad (9-57)$$

کت  $|E_\alpha, N\rangle$  معرف یک حالت با انرژی  $E_\alpha$  و تعداد  $N$  ذره است. این تراز شدیداً تهیگن است زیرا عموماً می‌توان در حالی که انرژی و تعداد کل ذرات ثابت می‌مانند اعداد اشغال را جابه‌جا کرد. توجه کنیم که وقتی ذرات برهم‌کنش می‌کنند آرایش طرف راست بی‌معنی می‌شود. انرژی و تعداد کل ذرات در طرف چپ (۹-۵۷) باز هم کاملاً معین هستند ولی دیگر به وسیله (۹-۵۵) و (۹-۵۶) داده نمی‌شوند.

برای کاربردهای بسیاری کافی است که  $N$  را به عنوان یک پارامتر ثابت در نظر بگیریم. اما در مواردی که  $N$  بهایسته نباشد، باید به آن به عنوان یک عدد کوانتومی نگاه کنیم و گذارهای بین حالت‌های با  $N$  متفاوت را در نظر بگیریم. به عنوان مثال، در فرایندهای با انرژی بالا که ذرات به وجود می‌آیند یا از بین می‌روند،  $N$  ثابت نیست. یک دلیل روشن‌تر برای اینکه  $N$  به عنوان یک متغیر (نمایش  $N$ ) در نظر گرفته شود این است که به آسانی در نظریه مکانیک آماری کوانتومی مورد استفاده قرار می‌گیرد. حالت‌های  $|E_\alpha, N_\alpha\rangle$  اکنون به عنوان ویژه حالت‌های  $\hat{H}$  و  $\hat{N}$  در نظر گرفته می‌شوند، یعنی،

$$\begin{aligned} \hat{H}|E_\alpha, N_\alpha\rangle &= E_\alpha |E_\alpha, N_\alpha\rangle \\ \hat{N}|E_\alpha, N_\alpha\rangle &= N_\alpha |E_\alpha, N_\alpha\rangle \end{aligned} \quad (N_\alpha = 0, 1, 2, \dots) \quad (9-58)$$



اگر سیستم چند جسمی در یکی از ویژه‌حالت‌های خود ،  $|E_\alpha, N_\alpha\rangle$  ، باشد مقدار قابل انتظار یک عملگر چندجسمی (مثلاً ، عملگر انرژی جنبشی)

$$\hat{A} = \hat{A}(\hat{p}^{(1)}\hat{p}^{(1)}, \dots, \hat{p}^{(N_\alpha)}\hat{p}^{(N_\alpha)})$$

می‌تواند به صورت

$$\langle \hat{A} \rangle_\alpha = \langle E_\alpha, N_\alpha | \hat{A} | E_\alpha, N_\alpha \rangle \quad (۵۹-۹)$$

محاسبه شود. وقتی مشخص باشد که سیستم در یکی از ویژه‌حالت‌های خود قرار دارد، می‌گوئیم که سیستم در یک حالت "خالص" است.

در عمل، غالباً "با یک حالت" مخلوط" سروکار داریم و تنها یک شناخت آماری از سیستم داریم. اطلاعات آماری دارای طبیعت ترمودینامیکی است و به وسیله یک تابع توزین  $W_\alpha$  که وزن ترمودینامیکی نسبی یافتن سیستم در حالت  $|E_\alpha, N_\alpha\rangle$  را می‌دهد، نمایش داده می‌شود. متوسط ترمودینامیکی با استفاده از

$$\bar{A}_{\text{therm}} = \sum_\alpha W_\alpha \langle E_\alpha, N_\alpha | \hat{A} | E_\alpha, N_\alpha \rangle \quad (۶۰-۹)$$

به دست می‌آید. به یک معنا، ما متوسط حرارتی توزین شده، مقادیر قابل انتظار کوانتومی را محاسبه می‌کنیم. طرحواره‌ای از این نوع متوسط مجموعه‌ای نامیده می‌شود و، از ملاحظات احتمالاتی، انتظار داریم که توابع توزین مجموعه‌ای بهنجار شده باشند، یعنی

$$\sum_\alpha W_\alpha = 1$$

محتماً "مهمترین تابع توزین مجموعه‌ای (چگالی) متعلق به مجموعه بند/دی بزرگ است که به وسیله

$$W_\alpha = \frac{e^{(\mu N_\alpha - E_\alpha)/k_B T}}{\sum_\alpha e^{(\mu N_\alpha - E_\alpha)/k_B T}} \quad (k_B = \text{ثابت بولتزمن}) \quad (۶۱-۹)$$

تعریف می‌شود. مخرج طوری انتخاب شده است که چگالی مجموعه‌ای بهنجار شده باشد. پارامترهای  $\mu$  (پتانسیل شیمیایی) و  $T$  (دمای کلون) حالت ترمودینامیکی سیستم را مشخص می‌کنند. وقتی پتانسیل شیمیایی و دمای سیستم معلوم باشند، متوسط ترمودینامیکی هر عملگر چندجسمی می‌تواند با استفاده از

$$\bar{A}(\mu, T) = \frac{\sum_{\alpha} e^{(\mu N_{\alpha} - E_{\alpha})/k_B T} \langle E_{\alpha}, N_{\alpha} | \hat{A} | E_{\alpha}, N_{\alpha} \rangle}{\sum_{\alpha} e^{(\mu N_{\alpha} - E_{\alpha})/k_B T}} \quad (۹-۶۲)$$

محاسبه شود. متوسط فوق می‌تواند در یک شکل فشرده‌تری به صورت

$$\bar{A}(\mu, T) = \frac{\text{Tr} \hat{\rho} \hat{A}}{\text{Tr} \hat{\rho}} \quad (۹-۶۳)$$

بیان شود که در آن عملگر چگالی مجموعه بندادی بزرگ عبارت است از

$$\hat{\rho} = e^{(\mu \hat{N} - \hat{\mathcal{H}})/k_B T}$$

چون رد عبارت از حاصل جمع عناصر قطری (در هر پایه) است، نتیجه می‌گیریم

$$\begin{aligned} \text{Tr} \hat{\rho} \hat{A} &= \sum_{\alpha} \langle E_{\alpha}, N_{\alpha} | e^{(\mu \hat{N} - \hat{\mathcal{H}})/k_B T} \hat{A} | E_{\alpha}, N_{\alpha} \rangle \\ &= \sum_{\alpha} e^{(\mu N_{\alpha} - E_{\alpha})/k_B T} \langle E_{\alpha}, N_{\alpha} | \hat{A} | E_{\alpha}, N_{\alpha} \rangle \end{aligned}$$

و

$$\text{Tr} \hat{\rho} = \sum_{\alpha} \langle E_{\alpha}, N_{\alpha} | e^{(\mu \hat{N} - \hat{\mathcal{H}})/k_B T} | E_{\alpha}, N_{\alpha} \rangle = \sum_{\alpha} e^{(\mu N_{\alpha} - E_{\alpha})/k_B T}$$

معادلات (۹-۶۳) و (۹-۶۲) در واقع یکسان‌اند. البته، برای محاسبه متوسط حرارتی در (۹-۶۲) باید نخست مسئله چندجسمی را حل کنیم و هرکدام از مقادیر قابل انتظار  $\langle E_{\alpha}, N_{\alpha} | \hat{A} | E_{\alpha}, N_{\alpha} \rangle$  را پیدا کنیم.

بدون اثبات ذکر می‌کنیم که برای سیستمهای بدون برهم‌کنش ایده‌آل متوسط روی حالت‌های  $|E_{\alpha}, N_{\alpha}\rangle$ ، چند جسمی به متوسط روی حالت‌های تک‌ذره‌ای به شکل

$$\bar{A}(\mu, T) = \sum_{\mathbf{k}, m_s} \bar{n}_{\mathbf{k}, m_s}(\mu, T) \langle \mathbf{k}, m_s | \hat{A} | \mathbf{k}, m_s \rangle \quad (۹-۶۴)$$

تقلیل پیدا می‌کند. در اینجا،  $\langle A \rangle_{\mathbf{k}, m_s}$  عبارت است از مقدار قابل انتظار یک عملگر یک‌جسمی در یک حالت تک‌ذره‌ای و  $\bar{n}_{\mathbf{k}, m_s}(\mu, T)$  در اصل یک متوسط حرارتی اعداد اشغال است. این اعداد اشغال متوسط به وسیله روابط\* (مسئله ۹-۸)

\* برای ذرات تمیزپذیر،  $\bar{n}$  به وسیله توزیع کوانتومی بولتزمن

$$\bar{n}_{\mathbf{k}, m_s} = e^{\mu/k_B T} e^{-\epsilon_{\mathbf{k}}/k_B T}$$

داده می‌شود. برای بدست آوردن آن، به عنوان مثال، به کتاب

$$\bar{n}_{\mathbf{k}, m_s} = \frac{1}{e^{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)/k_B T} - 1} \quad (\text{توزیع بوز - اینشتین برای بوزونهای تمیزناپذیر})$$

(۹-۶۵ الف)

$$\bar{n}_{\mathbf{k}, m_s} = \frac{1}{e^{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)/k_B T} + 1} \quad (\text{توزیع فرمی - دیراک برای فرمیونهای تمیزناپذیر})$$

(۹-۶۵ ب)

داده می‌شوند .

انرژی و تعداد ترمودینامیکی ذرات به ترتیب عبارتند از

$$\bar{E}(\mu, T) = \sum_{\mathbf{k}, m_s} \bar{n}_{\mathbf{k}, m_s} \langle \mathbf{k}, m_s | \mathcal{H} | \mathbf{k}, m_s \rangle = \sum_{\mathbf{k}, m_s} \bar{n}_{\mathbf{k}, m_s} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (۹-۶۶)$$

و

$$\bar{N}(\mu, T) = \sum_{\mathbf{k}, m_s} \bar{n}_{\mathbf{k}, m_s} \quad (۹-۶۷)$$

در عمل ، ذرات در یک جعبه بزرگ قرار دارند و  $\mathbf{k}$  شبه پیوسته می‌شود . حاصل جمع می‌تواند ، با استفاده از (۵-۱۶) ، به وسیله یک انتگرال جایگزین شود ، که می‌دهد

$$\sum_{\mathbf{k}, m_s} \rightarrow \Gamma_s \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \mathcal{V} = \Gamma_s \int \frac{d\mathbf{p}}{h^3} \mathcal{V} \quad \left( \mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar} \right) \quad (۹-۶۸)$$

ضریب تبهگنی اسپینی  $\Gamma_s = 2s + 1$  برای الکترون ( $s = \frac{1}{2}$ ) برابر است با ۲ . متوسطهای حرارتی مشاهده پذیرهای مستقل از اسپین به شکل  $\bar{A}(\mathbf{p})$  شکل زیر را به خود می‌گیرند

$$\bar{A}(\mu, T) = \Gamma_s \frac{\mathcal{V}}{h^3} \int \bar{n}(\mathbf{p}) A(\mathbf{p}) d\mathbf{p}$$

J. Kestin and J.R. Dorfman, "A Course in Statistical Thermodynamics" PP. 343-349, Academic Press, New York, 1971.

یا به کتاب

C. Kittel, "Elementary Statistical Physics" P. 86, Wiley, New York, 1958.

مراجعه کنید .

که در آن

$$\bar{n}(\mathbf{p}) = \frac{1}{e^{(p^2/2m - \mu)/k_B T} \pm 1}$$

به‌عنوان مثال، انرژی و تعداد ترمودینامیکی ذرات در (۹-۶۶) و (۹-۶۷) می‌شوند

$$E(\mu, T) = \Gamma_s \frac{\mathcal{V}}{h^3} \int \bar{n}(\mathbf{p}) \frac{p^2}{2m} d\mathbf{p} \quad (\text{تمام فضای } \mathbf{p}) \quad (۹-۶۹ \text{ الف})$$

و

$$N(\mu, T) = \Gamma_s \frac{\mathcal{V}}{h^3} \int \bar{n}(\mathbf{p}) d\mathbf{p} \quad (\text{تمام فضای } \mathbf{p}) \quad (۹-۶۹ \text{ ب})$$

باید مخصوصاً در موقع جایگزین کردن حاصل جمع به‌وسیله انتگرال برای بوزونهای در دمای پائین دقت کنیم. نزدیک صفر مطلق، اغلب ذرات بوزون سعی دارند که حالت‌های تک ذره‌ای در مجاورت  $k=0$  را اشغال نمایند. این حالت‌ها حتی برای حجمهای بزرگ شبه پیوسته نمی‌شوند و بنابراین نمی‌توان به‌جای حاصل جمع از یک انتگرال استفاده کرد. در واقع، در زیر یک دمای بحرانی  $T_0$ ، ذرات سریعاً حالت پایه  $k=0$  را اشغال می‌کنند. این پدیده به تراکم اینشتینی معروف است (شکل ۹-۶). چون برای فرمیونها اصل طردپاولی مانع این "تجمع" در مجاورت  $k=0$  می‌شود، این تراکم در مورد الکترون‌ها دیده نمی‌شود. از (۹-۶۹) آشکار است که متوسط‌های حرارتی بستگی به حجم گاز دارند و باید به‌صورت

$$\bar{E} = \bar{E}(\mu, T, \mathcal{V}) \quad \text{و} \quad \bar{N} = \bar{N}(\mu, T, \mathcal{V})$$

نوشته شوند. هم‌چنین از (۹-۶) روشن است که در  $T=0$  توزیع فرمی دیراک در هر حالت زیر تراز فرمی\* یک الکترون دارد و در حالت‌های با انرژی بالاتر از  $\epsilon_F$  هیچ الکترونی ندارد. بنابراین تراز فرمی به‌وسیله تعداد فرمیونها در سیستم، یا به‌طور معادل به‌وسیله چگالی ذرات معین می‌شود. برای ربط دادن  $\epsilon_F$  به چگالی، (۹-۶۹ ب) را به‌صورت

$$\frac{\bar{N}}{\mathcal{V}} = \rho = \frac{\Gamma_s}{h^3} \int \bar{n}(\mathbf{p}) d\mathbf{p} \quad (\Gamma_s = 2) \quad (۹-۷۰)$$

می‌نویسیم که (در  $T=0$ )

---

\* انرژی فرمی با پتانسیل شیمیایی در  $T=0$  برابر است، یعنی،  $\epsilon_F = \mu|_{T=0}$ .

$$\begin{aligned} \bar{n}(\mathbf{p}) &= 1, & |\mathbf{p}| \leq p_F \\ \bar{n}(\mathbf{p}) &= 0, & |\mathbf{p}| > p_F \end{aligned} \quad \left( \frac{p_F^2}{2m} = \varepsilon_F \right)$$

با تبدیل انتگرال به مختصات کروی ، (۷۰-۹) خواهد شد

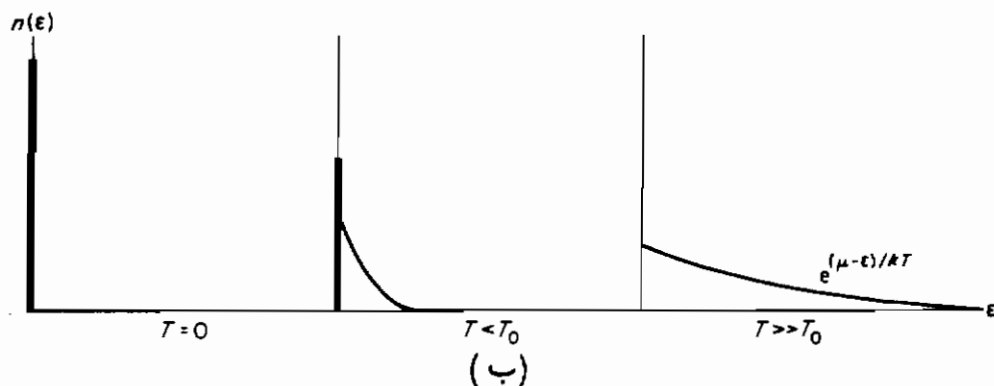
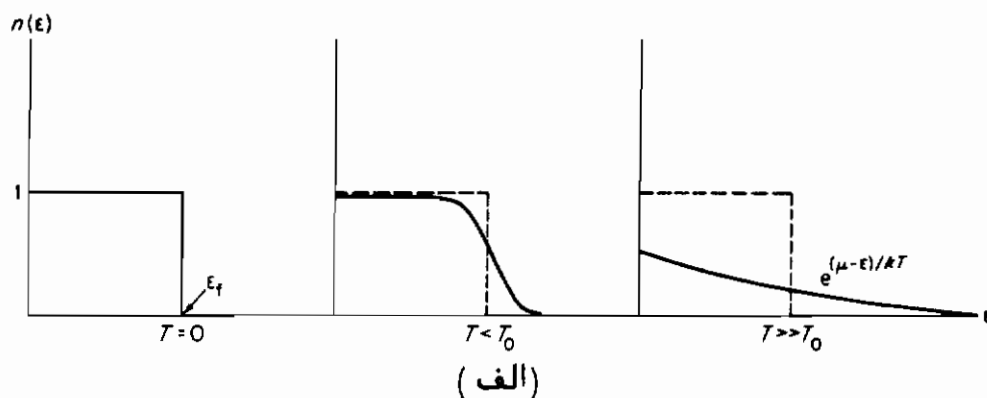
$$\rho = \frac{2}{h^3} \int_0^{p_F} 4\pi p^2 dp = \frac{8\pi}{3h^3} p_F^3$$

تگانه فرمی عبارت است از

$$p_F = \left( \frac{3h^3}{8\pi} \rho \right)^{1/3} \quad (۷۱-۹ \text{ الف})$$

با استفاده از  $p_F = (2m\varepsilon_F)^{1/2}$  ، انرژی فرمی می‌شود

$$\varepsilon_F = 3^{2/3} \pi^{4/3} \frac{\hbar^2}{2m} \rho^{2/3} \quad (۷۱-۹ \text{ ب})$$



شکل (۹-۶) توزیع (الف) فرمی - دیراک و (ب) بوز-اینشتین برای دماهای گوناگون .  $T_0$  عبارت است از دمای تبهگنی داده شده در معادله (۷۳-۹) .

به‌طور خلاصه، مشاهده می‌کنیم که تفاوت اصلی بین مسائل چند جسمی ایده‌آل کلاسیکی و کوانتومی از آثار همبستگی آماری سرچشمه می‌گیرد. این آثار در تابع توزیع آماری یک ذره‌ای

$$\bar{n}_k = \frac{1}{e^{(\epsilon_k - \mu)/k_B T} \pm 1} \quad (9-72)$$

منعکس شده‌اند. جمله  $\pm 1$  در (۷۲-۹)، که از این همبستگیها ناشی می‌شود و در آمار ذرات تمیزپذیر وجود ندارد، روی رفتار ترمودینامیکی فرمیونها و بوزونها تاثیر می‌گذارد. وقتی فاصله متوسط بین ذرات تمیزپذیر در مقایسه با متوسط طول موجهای دو بروی آنها بزرگ می‌شود، انتظار داریم که این ذرات تا اندازه‌ای تمیزپذیری فضایی کسب کنند. اگر فرض کنیم که انرژی متوسط یک ذره در یک گاز  $\bar{\epsilon} \sim \pi k_B T$  باشد، داریم

$$\lambda = \frac{h}{\bar{p}} = \frac{h}{(2m\bar{\epsilon})^{1/2}} \simeq \frac{h}{(2\pi m k_B T)^{1/2}}$$

فاصله بین ذره‌ای به‌طور تقریب با  $d = 1/\rho^{1/3}$  داده می‌شود. در نتیجه، انتظار داریم وقتی که

$$\lambda \ll d, \quad \frac{h}{(2\pi m k_B T)^{1/2}} \ll \frac{1}{\rho^{1/3}}$$

یا

$$T_0 \ll T, \quad \left( T_0 = \frac{\rho^{2/3} h^2}{2\pi m k_B} \right) \quad (9-73)$$

باشد ذرات تقریباً "تمیزپذیر بشوند. به‌طور معادل، توزیعهای فرمی-دیراک و بوز-اینشتین باید، وقتی دما خیلی بالاتر از دمای تبه‌گنی  $T_0$  است، به توزیع بولتزمن  $e^{(\mu - \epsilon_k)/k_B T}$  تقلیل یابند. در واقع، همان‌طور که از شکل (۹-۶) دیده می‌شود، نیز همین‌طور است. از طرف دیگر، در زیر این دما آثار کوانتومی غلبه می‌کنند. برای فرمیونها، سیستم تقریباً "در حالت پایه است. برای بوزونها، شروع تراکم اینشتینی را مشاهده می‌کنیم.

برای سیستمهای رقیق، چگالی پائین است و  $T_0$  در (۷۳-۹) خیلی نزدیک به صفر مطلق است. از طرف دیگر، گاز الکترون آزاد در یک فلز دارای  $10^{23} \sim$  ذره بر  $\text{cm}^3$  است. دمای تبه‌گنی متناظر  $T_0 \sim 10,000^\circ \text{K}$  است به‌طوری‌که حتی در دمای اطاق بیشتر الکترونهای یک فلز اصولاً "پائین‌ترین حالت‌های مجاز، به‌وسیله اصل طرد پاولی، را اشغال می‌کنند. بحث ما تا اینجا اصولاً "روی سیستمهای ایده‌آل متمرکز شده بود. وقتی برهم‌کنشها

منظور شوند، یک جواب دقیق، به جز در موارد نادر، غیرممکن است. قدرت و برد نسبی برهم کنشهایی که از نظر فیزیکی جالب اند غالباً امکان یک بررسی مستقیم پریشیدگی را رد می کنند. در فصل ۱۰، بعضی از روشهایی را که در بررسی سیستمهای ذرات حقیقی مفید تشخیص داده شده اند، گسترش خواهیم داد.

### مسائل

۱-۹ (الف) مجموعه ای از  $N$  ذره، که جرم هر کدام  $m_i$  است و تحت تاثیر پتانسیل خارجی  $V_i(\mathbf{r})$  قرار دارد، در نظر بگیرید. برهم کنش بین ذرات می تواند به صورت  $V_{ij} = V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$  نوشته شود. هامیلتونی سیستم و معادلات هامیلتونی حرکت را برای ذره  $i$  ام بنویسید.

(ب) هامیلتونی مکانیک کوانتومی را در مکانیک موجی بنویسید و نشان دهید که وقتی برهم کنشها نادیده گرفته شوند، معادله شرودینگر به معادلات تک ذره ای تفکیک می شود.

۲-۹ دو ذره ( $m_1$  و  $m_2$ ) بدون برهم کنش در یک پتانسیل نوسانگر یک بعدی  $V = \frac{1}{2}Kx^2$  و در یک حالت اسپینی در نظر بگیرید.

(الف) یک عبارت عمومی برای انرژیهای کوانتیده سیستم پیدا کنید.

(ب) اگر ذرات تمیزپذیر باشند، یعنی  $m_1 \neq m_2$ ، ویژه تابعهای متناظر  $\psi_{n,n'}(x_1, x_2)$  را پیدا کنید.

(ج) قسمت (ب) را برای موردی که در آن ذرات فرمیونهای تمیزناپذیر باشند ( $m_1 = m_2$ ) تکرار کنید. برای بوزونها نیز تکرار کنید.

(د) با استفاده از قسمت (ج) احتمال یافتن ذرات با فاصله معین  $x = x_2 - x_1$  را وقتی که سیستم در حالت  $n = 0$ ،  $n' = 1$  باشد پیدا کنید. این عمل را هم برای بوزونها و هم برای فرمیونها انجام دهید.

۳-۹ (الف) با استفاده از (۹-۱۷) نشان دهید که اثر عملگر جایگشت  $\hat{P}^{(qt)}$  روی یک ویژه کت مکانی عبارت است از

$$\hat{P}^{(qt)} |\mathbf{r}^{(1)} \dots \mathbf{r}^{(q)}, \mathbf{r}^{(t)} \dots \mathbf{r}^{(N)}\rangle = |\mathbf{r}^{(1)} \dots \mathbf{r}^{(t)}, \mathbf{r}^{(q)} \dots \mathbf{r}^{(N)}\rangle$$

(ب) با استفاده از قسمت (الف) نشان دهید که اگر  $|\alpha^S\rangle$  و  $|\alpha^A\rangle$  ویژه حالتیهای

$\hat{P}(qt)$  با ویژگی

$$\hat{P}(qt) |\alpha^S\rangle = |\alpha^S\rangle, \quad \hat{P}(qt) |\alpha^A\rangle = -|\alpha^A\rangle$$

باشند ویژه تابعهای متناظر دارای ویژگی زیر هستند .

$$\Psi_\alpha^S(1, 2, \dots, q, t, \dots, N) = \Psi_\alpha^S(1, 2, \dots, t, q, \dots, N)$$

$$\Psi_\alpha^A(1, 2, \dots, q, t, \dots, N) = -\Psi_\alpha^A(1, 2, \dots, t, q, \dots, N)$$

(راهنمایی: از روشهای ارائه شده در فصل ۴ برای پاریته استفاده کنید)

۴-۹ (الف) تبهگنی وابسته به یک آرایش (1s, 3d) در هلیوم را پیدا کنید و حالت‌های

جفت شده  $L-S$  را بنویسید. آیا در این آرایش الکترون‌ها هم‌ارزاند؟

(ب) تحقیق کنید که تبهگنی جمله‌های طیفی با تبهگنی آرایش برابر است .

۵-۹ (الف) تبهگنی وابسته به یک آرایش  $(1s^2, 2s^2, 2p^3)$  ، (یعنی، حالت پایه اتم ازت)

را پیدا کنید .

(ب) حالت‌های اتمی ممکن  $L-S$  را برای این آرایش پیدا کنید . (راهنمایی: از جدول

۱-۹ استفاده کنید)

(ج) جمله طیفی متناظر با حالت پایه می‌تواند با استفاده از قواعد (هاند) زیر

به دست آیند:

(۱) برای یک آرایش معین، جمله با بزرگترین چندگانگی (بالا ترین مقدار  $S$ )

از نظر انرژی پایین‌ترین است .

(۲) برای این چندگانگی جمله با بزرگترین مقدار  $L$  از نظر انرژی پایین‌ترین است .

از جملات به دست آمده در (ب) جمله طیفی حالت پایه را برای اتم ازت پیدا کنید.

۶-۹ یک الکترون منفرد که در یک چاه کروی بینهایت به شعاع  $R$ ، یعنی  $V=0$  برای  $r \leq R$  و

$V = \infty$  برای جاهای دیگر، قرار دارد در نظر بگیرید .

(الف) عبارتهایی برای ویژه تابعها و انرژیهای حالت پایه و اولین حالت برانگیخته

در مختصات کروی پیدا کنید .

(ب) سپس فرض کنید که دو الکترون در این چاه محبوس‌اند . با صرف نظر کردن از

برهم‌کنشهای کولنی، دترمینانهای اسلاتر (شامل اسپین) و ویژه مقدارهای انرژی متناظر

با حالت پایه و اولین حالت برانگیخته سیستم را پیدا کنید .

(ج) با در نظر گرفتن برهم‌کنش کولنی به عنوان پیرشیدگی غالب، حالت پایه و اولین

حالت برانگیخته جفت شده  $L-S$  را پیدا کنید و عبارتهای مربوط به جابجایی مرتبه اول



در انرژی این حالتها را بنویسید. (راهنمایی: روش انجام شده در اتم هلیوم را دنبال کنید)

۷-۹ در یکی از آرایشهای یک سیستم سه ذره ای، یک الکترون در هر کدام از حالت های مداری زیر وجود دارد

$$\psi_1 = N_1 \exp - m_1^2 r_1^2; \quad \psi_2 = N_2 \sin m_2 r_2; \quad \psi_3 = N_3 \exp - m_3 r_3$$

که در آنها  $m_i$  جرم ذرات و  $N_i$  ثابت بهنجارش است.

(الف) اگر سه ذره تمیز پذیر باشند (یعنی،  $m_1 \neq m_2 \neq m_3$ )، تابع حالت کل سیستم را بسازید.

(ب) اگر ذرات تمیز ناپذیر باشند (یعنی  $m_1 = m_2 = m_3$ )، تابع حالت های با تقارن زوج و فرد را بسازید.

۸-۹ (الف) معادله (۹-۶) می تواند به تعداد ترمودینامیکی ذرات  $\bar{N}$ ، با قرار دادن  $\hat{A} = \bar{N}$  اعمال شود. نشان دهید که  $\bar{N}$  می تواند به صورت

$$\bar{N} = k_B T \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \sum_{\alpha} \exp \left[ \frac{(\mu N_{\alpha} - E_{\alpha})}{k_B T} \right]$$

نوشته شود. (راهنمایی:  $\langle \hat{N} | E_{\alpha}, N_{\alpha} \rangle = N_{\alpha} | E_{\alpha}, N_{\alpha} \rangle$ )

(ب) برای سیستم های ایده آل داریم  $N_{\alpha} = \sum_i n_i$  و  $E_{\alpha} = \sum_i n_i \varepsilon_i$  که در آن  $n_i$  و  $\varepsilon_i$  به ترتیب اعداد اشغال و انرژی های حالت های تک ذره ای هستند. نشان دهید که نتیجه فوق به شکل

$$\bar{N} = k_B T \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \sum_{\{n_i\}} \prod_i \exp \left[ \frac{n_i (\mu - \varepsilon_i)}{k_B T} \right]$$

در می آید که در آن جمع بندی روی تمام آرایشهای ممکن صورت می گیرد.

(ج) با عوض کردن جای جمع و ضرب نشان دهید که نتیجه فوق شکل

$$\bar{N} = \sum_i \bar{n}_i$$

را به خود می گیرد که در آن

$$\bar{n}_i = \frac{1}{\exp[(\varepsilon_i - \mu)/k_B T] \pm 1}$$

علامت فوقانی اشاره به فرمیونها دارد. (راهنمایی: برای فرمیونها محدودیت  $n_i = 0, 1$  را داریم)

۹-۹ یک ستاره نوترونی ستاره‌ای است که از نظر نوترونی دارای چگالی  $10^{14} \text{ gm/cm}^3$  است. دمای تبهگنی را برای چنین ستاره‌ای پیدا کنید. اعتقاد براین است که دمای ستارگان نوترونی خیلی پایین‌تر از دمای تبهگنی است. در باره توزیع نوترونی چه می‌توانید بگوئید؟

### مراجع پیشنهادی

- Borowitz, S., "Fundamentals of Quantum Mechanics." Benjamin, New York, 1967.
- Condon, E. U., and Shortley, G. H., "The Theory of Atomic Spectra," Chapter VI. Cambridge Univ. Press, London and New York, 1963.
- Heitler, W., "Elementary Wave Mechanics," Chapter V. Oxford Univ. Press, London and New York, 1956.
- Kestin, J., and Dorfman, J. R., "A Course in Statistical Thermodynamics," Chapter 8. Academic Press, New York, 1971.
- Kittel, C., "Elementary Statistical Physics," pp. 86-102. Wiley, New York, 1958.
- Merzbacher, E., "Quantum Mechanics," 2nd ed., Chapter 18. Wiley, New York, 1970.
- Pauling, L., and Wilson, E. B., "Introduction to Quantum Mechanics," Chapter VIII. McGraw-Hill, New York, 1935.
- Sommerfeld, A., "Thermodynamics and Statistical Mechanics," Section 37. Academic Press, New York, 1964.

# ۱۰

## سیستمهای چند ذره‌ای برهم کنش کننده

وقتی در یک سیستم چند ذره‌ای برهم کنشها نادیده گرفته شوند، ذرات هویت سینماتیکی خود را محفوظ نگاه می‌دارند و، به جز برای آثار تبادلی وابسته به تمیزناپذیری، ناهمبسته باقی می‌مانند. در سیستمهای واقعی، که برهم کنشها نقش مهمی بازی می‌کنند، معادله شرودینگر چند ذره‌ای دیگر تفکیک پذیر نیست. در نتیجه، مسئله چند جسمی به  $N$  مسئله یک جسمی تقلیل پیدا نمی‌کند و تصور ذرات تک از نظر مکانیک کوانتومی معنی خود را از دست می‌دهد.

گاهی اوقات ممکن است یک تبدیل بنیادی به یک مجموعه جدیدی از مختصات و تکانه‌ها طوری انجام داد که هامیلتونی جدید دیگر صریحا "برهم کنشهای دو جسمی را در بر نداشته باشد". وقتی برهم کنشها را به این طریق "دور" می‌کنیم، به مفهوم شبه ذراتی هدایت می‌شویم که به هر کدام از آنها یکی از متغیرهای بنیادی جدید وابسته است. شبه ذرات یک سیستم ایده‌آل تشکیل می‌دهند و می‌توانند با استفاده از روش ارائه شده در فصل پیش مورد بررسی قرار گیرند. البته مفهوم فیزیکی این شبه ذرات نیاز به تعبیر خاصی دارد، اما با استفاده از تبدیل وارون همیشه می‌توانیم خواص آنها را به خواص ذرات اصلی ربط دهیم. به عنوان مثال نشان خواهیم داد که تبدیل به مختصات بهنجار، وقتی به مجموعه‌ای از جرمهای نقطه‌ای که توسط فنرهای به هم وابسته شده اند اعمال شود، یک هامیلتونی جدید ایجاد می‌کند که معرف یک گاز ایده‌آل از شبه ذرات به نام فونون\* است. می‌توان نشان داد که هر فونون

---

\* به طور دقیقتر، عبارت شبه ذره به موردی اطلاق می‌شود که در آن ارتباطی با ذره اصلی وجود داشته باشد. فونونها، در واقع، متناظر با وضعیتی هستند که در آن یک گروه از

(کوانتای ارتعاش کشسانی) یک بوزون است. به علاوه، این فونونها می‌توانند ایجاد شوند یا از بین بروند.

این طرز بررسی مسئله چند جسمی موکول به پیدا کردن تبدیل بندادی مناسب است. در غیر این صورت، روشهای تقریبی، نظیر نظریه پیرشیدگی، روشهای و ردشی، و غیره، باید به کار گرفته شوند.

به عنوان یک نقطه شروع، مسئله دوزره را بررسی خواهیم کرد و تبدیلی ارائه خواهیم کرد که همیشه آنرا قابل حل کند.

### ۱- مسئله دوجسمی منزوی

اتم هیدروژن (پروتون به اضافه الکترون) مثال مهمی از یک مسئله دوجسمی منزوی (بدون نیروی خارجی) است. در این مورد ذرات از طریق نیروهای کولنی برهم‌کنش می‌کنند. در بحث قبلی مان از هیدروژن (فصل ۵) فرض کردیم که هسته ساکن می‌ماند. وقتی حرکت هسته در نظر گرفته شود، معادله شرودینگر به شکل

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^{(1)2} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^{(2)2} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}|} \right\} \Psi_a(\mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}) = E_a \Psi_a(\mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}) \quad (1-10)$$

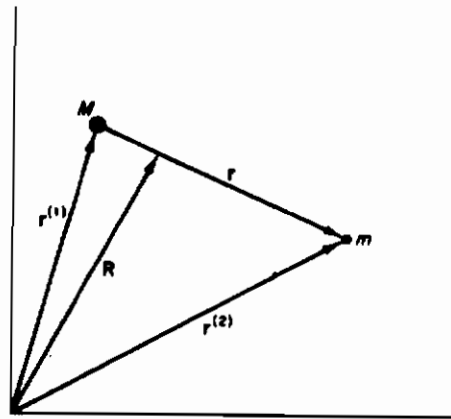
در می‌آید که در آن  $M$  جرم پروتون،  $m$  جرم الکترون،  $\mathbf{r}^{(1)}$  مختصه پروتون و  $\mathbf{r}^{(2)}$  مختصه الکترون است.

چون این ذرات تمیزپذیراند ( $M \neq m$ )، انتظار داریم که  $\Psi_a(\mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)})$  تحت عمل تعویض  $1 \leftrightarrow 2$  نه متقارن باشد نه پاد متقارن. معادله (1-10)، به صورتی که هسته تفکیک‌پذیر به یک قسمت الکترونی و یک قسمت پروتونی نیست. برای اینکه به شکل قابل تفکیکی برسیم تبدیل به مرکز جرم (c.m.) را به صورت (شکل 1-10)

$$\begin{aligned} \mathbf{R} &= \frac{M\mathbf{r}^{(1)} + m\mathbf{r}^{(2)}}{M + m} & (\text{بردار مرکز جرم}) \\ \mathbf{r} &= \mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)} & (\text{بردار نسبی}) \end{aligned}$$

ذرات برانگیخته شده‌اند و لذا "برانگیختگی جمعی" نامیده می‌شود. با این وجود، عبارت شبه ذره را با معنی رقیق‌تری برای فونونها به کار خواهیم برد.

وارد می‌کنیم .



شکل (۱-۱۰) بردار مرکز جرم  $R$  و بردار نسبی  $r$  برای یک سیستم دوجسمی .

با استفاده از این تبدیل ، (۱-۱۰) بعد از قدری ساده‌سازی خواهد شد

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2(M+m)} \nabla^{(R)2} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^{(r)2} - \frac{e^2}{r} \right\} \Psi_\alpha(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E_\alpha \Psi_\alpha(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \quad (2-10)$$

که در آن

$$\mu = \frac{mM}{M+m} = \frac{m}{1+m/M} \quad (\text{جرم کاهش یافته سیستم})$$

کمیت  $|\Psi_\alpha(\mathbf{R}, \mathbf{r})|^2$  نمایانگر چگالی احتمال یافتن اتم هیدروژن در وضعیتی است که مرکز جرم آن در نقطه  $R$  در فضا و فاصله الکترون - پروتون  $r$  باشد . چون این مسئله دوزره‌ای‌شش درجه آزادی (بدون در نظر گرفتن اسپین) دارد ، انتظار داریم که نماد  $\alpha$  معرف یک مجموعه شش عدد کوانتومی باشد .

با به‌کاربردن یک جواب آزمایشی به شکل  $\Psi_\alpha = \xi_{\mathbf{k}}(\mathbf{R}) \psi_i(\mathbf{r})$  ، نتیجه می‌گیریم که (۲-۱۰) به صورت زیر تفکیک می‌شود

$$-\frac{\hbar^2}{2(M+m)} \nabla^{(R)2} \xi_{\mathbf{k}}(\mathbf{R}) = \varepsilon_{\mathbf{k}}^{(c.m.)} \xi_{\mathbf{k}}(\mathbf{R}) \quad (3-10)$$

و

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^{(r)2} - \frac{e^2}{r} \right\} \psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i^{(int)} \psi_i(\mathbf{r}) \quad (4-10)$$

با

$$E_{\alpha} = \varepsilon_{\mathbf{k}}^{(c.m.)} + \varepsilon_i^{(int)}$$

که در آن  $\varepsilon_i^{(int)}$  معرف انرژی داخلی اتم است. این تفکیک تنها در صورتی عملی است که سیستم منزوی باشد، یعنی، نیروهای خارجی حضور نداشته باشند. معادله مرکز جرمی (۳-۱۵) با معادله یک ذره آزاد هم ارز است و نشان دهنده یک انتقال خالص است. طیف پیوسته است و داریم

$$\xi_{\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}, \quad \varepsilon_{\mathbf{k}}^{(c.m.)} = \frac{\hbar^2 k^2}{2(M+m)}$$

چون قسمت انتقالی روی رفتار داخلی تاثیر نمی کند، در موقع محاسبه ترازهای کوانتیسده هیدروژنی می توان از آن صرف نظر کرد. معادله دوم (۴-۱۵) حاکم بر رفتار کوانتوسی حرکت نسبی ذرات است و طبیعت طیف داخلی اتم را تعیین می کند. به جز برای جایگذاری

$$m \rightarrow \mu = \frac{m}{1 + m/M}$$

معادله (۴-۱۵) با معادله (۱-۵) در فصل ۵ یکسان است. در نتیجه، انتظار داریم که ویژه جوابها به شکل

$$\psi_l = \psi_{nlm_l} = R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \phi)$$

۵

$$\varepsilon_l^{(int)} = \varepsilon_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2 n^2}$$

باشند. گذارهای بین این ترازها منجر به یک طیف گسیلی می شود که اصولاً با طیفی که با ساکن بودن پروتون به دست می آید مشابه است، تنها تفاوت در این است که ثابت ریدبرگ، به جای  $m$ ، شامل  $\mu$  است. تصحیحات مربوط به جرم کاهش یافته در هیدروژن، با اینکه فقط از مرتبه  $m/M \sim \frac{1}{2} \times 10^{-3}$  هستند، توسط طیف نماهای با قدرت تفکیک زیاد مشاهده شده اند. در واقع، می توان طیفهای گسیلی هیدروژن و دوتریوم (که در هسته آن یک پروتون و یک نوترون وجود دارد) را از یکدیگر تمیز داد، تفاوت طیفها از تفاوت نسبت  $m/M$  ها نتیجه می شود.

متأسفانه هیچکس هنوز تبدیلی پیدا نکرده است که بتواند به مسئله عمومی سه جسمی

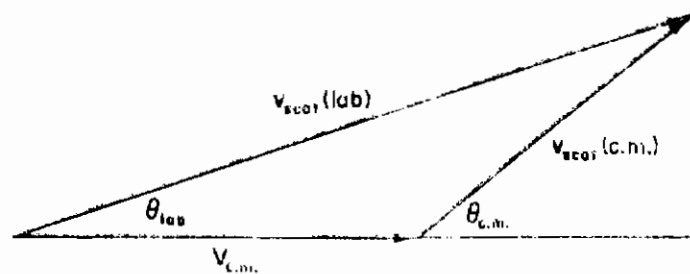
اعمال شود. بنابراین، به عنوان مثال، برای اتم هلیوم (هسته به اضافه دو الکترون)، جواب دقیقی وجود ندارد.

## ۲- پراکندگی از یک هدف متحرک

تحلیل فرایند پراکندگی که در فصل ۸ ارائه شد محدود به مسائلی بود که هدف در حین برخورد ساکن می ماند. در واقع وقتی جرم هدف نسبت به جرم پرتابه خیلی بزرگ باشد عقب نشینی هدف کوچک است. از طرف دیگر، اگر جرمهای هدف و پرتابه در یک حدود باشند، حرکت هدف مهم است و یک مسئله پراکندگی دوجسمی داریم.

مسئله پراکندگی دوجسمی می تواند با استفاده از تبدیل به مرکز جرم حل شود. اگر فرایند پراکندگی از یک دستگاه محوره های مختصات که با مرکز جرم حرکت می کند (دستگاه مرکز جرمی) مشاهده شود، زاویه پراکندگی مشاهده شده درست همانند موردی است که جرم هدف،  $M$ ، ثابت باشد و جرم پرتابه  $m$  به وسیله جرم کاهش یافته  $\mu = [m/(1 + m/M)]$  جایگزین شود. زاویه پراکندگی  $\theta_{c.m.}$  و مقطع موثر  $\sigma_{c.m.}$  در دستگاه مختصات  $c.m.$ ، می توانند با استفاده از روشهای ارائه شده در فصل ۸، با گذاردن  $\mu$  به جای  $m$ ، محاسبه شوند.

از بخت بد نظریه پردازها، داده های تجربی پراکندگی نسبت به دستگاه مختصاتی تهیه شده اند که در آزمایشگاه ساکن است. مقطع موثر آزمایشگاهی  $\sigma_{lab}$  از این جهت با  $\sigma_{c.m.}$  تفاوت دارد که زاویه های پراکندگی در دو دستگاه مختصات با یکدیگر متفاوتند\* (شکل ۱۰-۲).



شکل (۱۰-۲) استفاده از رابطه  $v_{scat}(lab) = v_{scat}(c.m.) + V_{c.m.}$  برای نشان دادن

رابطه بین  $\theta_{c.m.}$  و  $\theta_{lab}$ .

\* در دهه اخیر تجربیات "باریکه های برخورد کننده" ای که در آن جرمهای مساوی با سرعتهای برابر و متقابل به یکدیگر برخورد می کنند توسعه یافته است. در اینجا، دستگاههای مرکز جرمی و آزمایشگاهی بر یکدیگر منطبق می شوند.

تعداد ذرات پراکنده شده در داخل یک زاویه حجمی معین باید ، بدون توجه به دستگاه مختصات به‌کاربرده شده ، یکی باشد . برای مسائل پراکندگی با نیروی مرکزی ، این عدد عبارت است از

$$dN = I_0 \sigma_{c.m.} d\Omega_{c.m.} = I_0 \sigma_{lab} d\Omega_{lab}$$

که از آن نتیجه می‌شود

$$\sigma_{lab} = \sigma_{c.m.} \frac{d\Omega_{c.m.}}{d\Omega_{lab}} = \frac{\sin \theta_{c.m.}}{\sin \theta_{lab}} \frac{d\theta_{c.m.}}{d\theta_{lab}} \sigma_{c.m.} \quad (۱۰-۵)$$

که در آن  $\sigma_{c.m.} = |f(\theta_{c.m.})|^2$

وقتی رابطه بین  $\theta_{lab}$  و  $\theta_{c.m.}$  معلوم شد ، مقطع موثر در مرکز جرم (که از طریق نظری به‌دست می‌آید) می‌تواند به مقطع موثر آزمایشگاهی (که به‌طور تجربی به‌دست می‌آید) تبدیل شود . رابطه هندسی بین این زوایا در شکل (۱۰-۲) ، که از آن رابطه

$$\tan \theta_{lab} = \frac{v_{scat}(c.m.) \sin \theta_{c.m.}}{v_{scat}(c.m.) \cos \theta_{c.m.} + V_{c.m.}} \quad (۱۰-۶)$$

حاصل می‌شود ، نشان داده شده است . اگر هدف در آغاز ساکن باشد سرعتهای اولیه پرتابه از دید دستگاههای مختصات مرکز جرمی و آزمایشگاهی به‌وسیله

$$v_0(c.m.) = \frac{\mu}{m} v_0(lab)$$

به یکدیگر مربوط می‌شوند . به‌علاوه ، چون انرژی در دستگاه مختصات مرکز جرمی پایسته است ، داریم

$$v_0(c.m.) = \frac{\mu}{m} v_0(lab) = v_{scat}(c.m.) \quad (۱۰-۷)$$

سرعت مرکز جرم می‌تواند به‌وسیله

$$(M + m)V_{c.m.} = mv_0(lab) \quad \text{یا} \quad V_{c.m.} = \frac{\mu}{M} v_0(lab) \quad (۱۰-۸)$$

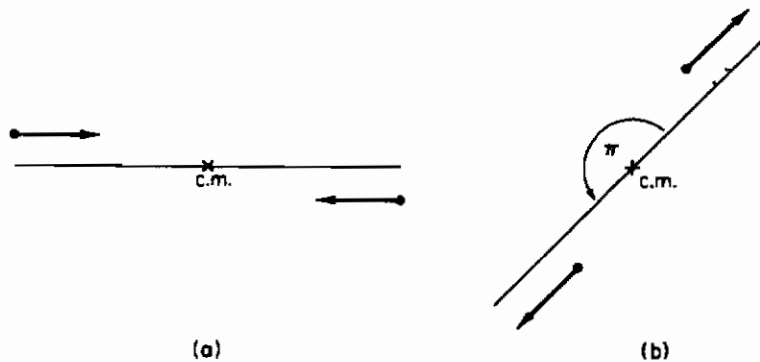


بیان شود. با به کار بردن (۷-۱۰) و (۸-۱۰) در (۶-۱۰)، بالاخره خواهیم داشت

$$\tan \theta_{\text{lab}} = \frac{\sin \theta_{\text{c.m.}}}{\cos \theta_{\text{c.m.}} + (m/M)}$$

که رابطه مورد نظر بین زاویه‌ها است (مسئله ۳-۱۰ الف). توجه کنیم که وقتی  $m/M \rightarrow 0$  دو زاویه، و در نتیجه دو مقطع موثر، همان‌طور که انتظار می‌رفت، یکسان می‌شوند. در بالا فرض کردیم که ذرات تمیزپذیراند (یعنی،  $M \neq m$ ). اما، اگر دوزره تمیزناپذیر باشند،  $\sigma_{\text{c.m.}}$  باید تقارن تبدیلی مناسب را منعکس نماید. اگر جرم‌ها یکسان باشند، وقتی از دستگاه مختصات  $T_{\text{c.m.}}$  آنها را مشاهده کنیم، به نظر می‌رسد که با سرعت‌های مساوی و مختلف جهت به یکدیگر نزدیک می‌شوند. برای اینکه تکانه پایسته باشد، باید با سرعت‌های مساوی و متقابل پراکنده شوند (شکل ۳-۱۰). در نتیجه، هدف‌ها تحت زاویه  $180^\circ$  نسبت به پرتابه‌ها عقب‌نشینی می‌کنند\* دامنه‌های پراکندگی برای هدف و پرتابه به وسیله

$$f_{\text{target}}(\pi - \theta_{\text{c.m.}}) = f_{\text{projectile}}(\theta_{\text{c.m.}})$$



شکل (۳-۱۰) سینماتیک (الف) قبل و (ب) بعد از برخورد دو جسم در دستگاه مقایسه مرکز جرمی

به یکدیگر مربوط می‌شوند. اما، اگر هدف و پرتابه بوزون‌های بدون اسپین تمیزناپذیر باشند، مقطع موثر کل باید متقارن شده و به شکل زیر باشد\*\*

\* برای پراکندگی دوجسمی، پایستگی تکانه همواره ایجاب می‌کند که ذرات پراکنده شده، در دستگاه مختصات  $c.m.$  تحت زاویه  $180^\circ$  نسبت به یکدیگر حرکت کنند، حتی وقتی  $m \neq M$  باشد.

\*\* در این رابطه باید جرم کاهش یافته  $\mu = \frac{1}{2}m$  به کار رود.

$$\begin{aligned}\sigma_{c.m.} &= |f_{tot}(\theta_{c.m.})|^2 = |f(\theta_{c.m.}) + f(\pi - \theta_{c.m.})|^2 \\ &= |f(\theta_{c.m.})|^2 + |f(\pi - \theta_{c.m.})|^2 + 2 \operatorname{Re} f(\theta_{c.m.})f(\pi - \theta_{c.m.})\end{aligned}\quad (9-10)$$

دوجمله اول در طرف راست با استدلالات کلاسیکی مورد انتظار هستند. چون ذرات یکسان اند، مقطع موثر کلاسیکی کل از نو طوری تعریف می شود که عقب نشینی هدفها را در برداشته باشد. اما جمله سوم صرفاً "مکانیک کوانتومی است و ناشی از آثار تبادلی است". اگر ذرات  $\alpha$  را بوزونهای بدون اسپین فرض کنیم، مقطع موثر مرکز جرمی برای پراکندگی  $\alpha$ - $\alpha$  می تواند مستقیماً محاسبه شود. با استفاده از نتایج راترفورد (۸-۱۴)، که عبارت است از

$$f(\theta) = -\frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)} \frac{\gamma \exp(-i\gamma \ln \sin^2 \theta/2)}{k \sin^2 \theta/2}$$

(۹-۱۰) پس از قدری محاسبات جبری طولانی می شود

$$\begin{aligned}\sigma_{c.m.} &= \left(\frac{Z^2 e^2}{4\epsilon}\right)^2 \left(\frac{1}{\sin^4 \theta/2} + \frac{1}{\cos^4 \theta/2} + \frac{2 \cos \gamma (\ln \tan^2 \theta/2)}{\sin^2 \theta/2 \cos^2 \theta/2}\right) \\ &\quad (10-10) \text{ (در پراکندگی } \alpha\text{-}\alpha \text{ داریم } Z=2\text{)}\end{aligned}$$

که در آن  $\gamma = Z^2 e^2 \mu / \hbar (2\mu\epsilon)^{1/2}$ . دوجمله اول در طرف راست شامل  $\hbar$  نیستند و از طریق کلاسیکی نیز به دست می آیند. جمله سوم جمله تبادلی است\* (پراکندگی مات<sup>۱</sup>) و ماهیت آن کاملاً "مکانیک کوانتومی است".

برای فرمیونهای با اسپین نیمه درست (به عنوان مثال، پراکندگی الکترون - الکترون)، پراکندگی ممکن است یا در حالت یگانه ( $S=0$ ) یا در حالت سه گانه ( $S=1$ ) رخ دهد. این حالتها به ترتیب دارای قسمتهای فضائی متقارن و پاد متقارن می باشند (رک ۹-۴۹). اگر باریکه نا قطبیده باشد، با توزین هر حالت ( $S=0$  یا  $S=1$ ) به وسیله چندگانگی آن، یک مقطع موثر متوسط ایجاد می کنیم، یعنی،

\* وقتی  $\hbar \rightarrow 0$  ( $\gamma \rightarrow \infty$ ) صورت با تغییر  $\theta$  سریعاً<sup>۱</sup> نوسان می کند و غیر قابل اندازه گیری می شود. جمله تبادلی قابل اغماض می شود و نتیجه کلاسیکی به دست می آید.

$$\begin{aligned}\bar{\sigma}_{c.m.} &= \frac{1}{4}|f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 + \frac{3}{4}|f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 - \operatorname{Re} f(\theta)f(\pi - \theta) \quad \left(\frac{1}{4} \text{ فرمیونهای با اسپین } \frac{1}{2}\right) \\ &\quad (11-10)\end{aligned}$$

هم (۹-۱۰) و هم (۱۱-۱۰) هردو می‌توانند، سرانجام، با استفاده از (۵-۱۰)، به دستگاه مختصات آزمایشگاهی تبدیل شوند.

### ۳- اتم هلیوم - بررسی به روش پریشیدگی

در فصل ۹ به این نتیجه رسیدیم که حالت‌های مرتبه صفر مناسب برای اتم هلیوم ایده‌آل باید به شکل  $|E_a LSM_L M_S\rangle$  باشند. با استفاده از روش‌های پریشیدگی فصل ۷، تصحیحات مرتبه اول انرژی به وسیله

$$\begin{aligned}E_{aLS} &= E_a + \langle E_a LSM_L M_S | \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}|} | E_a LSM_L M_S \rangle \\ &= -54 \left( \frac{1}{n^2} + \frac{1}{n'^2} \right) + \int d\mathbf{r}^{(1)} d\mathbf{r}^{(2)} \Psi_{E_a LSM_L M_S}^*(\mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}) \left[ \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}|} \right] \\ &\quad \times \Psi_{E_a LSM_L M_S}(\mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}) \quad (12-10)\end{aligned}$$

داده می‌شوند. چون پریشیدگی فقط متغیرهای فضایی را درگیر می‌کند، قسمت اسپینی بهنجار شده  $\Psi_{E_a L L S M_L M_S}$  در انتگرال برابر با یک است و در محاسبات زیر می‌تواند نادیده گرفته شود.

تصحیح انرژی در حالت پایه  $1S (n = n' = 1)$  هلیوم، با استفاده از (۹-۴۸)، می‌دهد

$$\begin{aligned}E_{a00} &= -108 + \int d\mathbf{r}^{(1)} d\mathbf{r}^{(2)} \psi_{100}^*(\mathbf{r}^{(1)}) \psi_{100}^*(\mathbf{r}^{(2)}) \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}|} \\ &\quad \times \psi_{100}(\mathbf{r}^{(1)}) \psi_{100}(\mathbf{r}^{(2)})\end{aligned}$$

توابع مداری توابع هیدروژن مانند هستند، یعنی،

$$\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{Z}{a} \right)^{3/2} e^{-Zr/a} \quad (Z = 2)$$

و می‌توان نشان داد که انتگرال فوق برابر است با  $\Delta E \sim 34 \text{ eV}$ . انرژی حالت پایه که تا تقریب مرتبه اول تصحیح شده است (شکل ۱۰-۴) عبارت است از

$$E_{a00} = -108 + 34 = -74 \text{ eV} \quad (\text{حالت پایه})$$

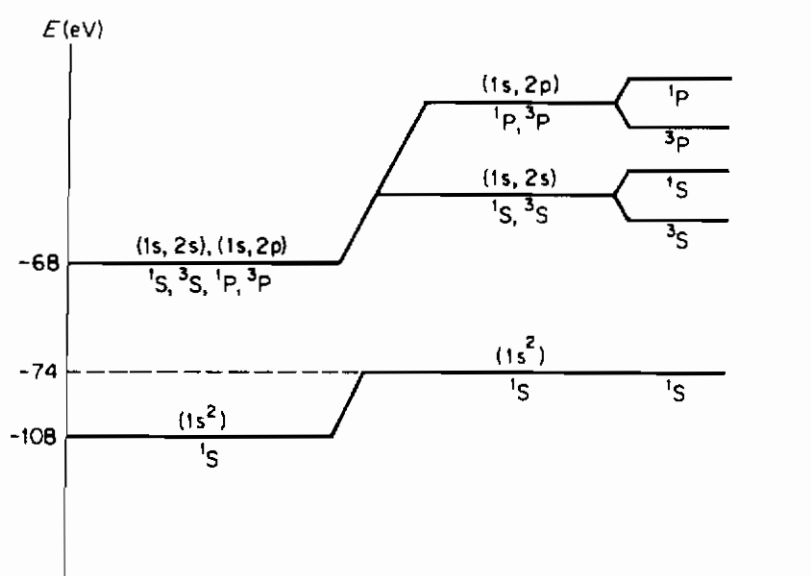
انرژی یونش اول هلیوم می‌شود

$$E_{\text{ion}} = E_{100} - E_{a00} = -54 - (-74) = 20 \text{ eV}$$

این مقدار به‌طور قابل قبولی با مقدار مشاهده شده  $24 \text{ eV}$  می‌خواند. اما اندازه نسبی جابه‌جایی انرژی عبارت است از

$$\left| \frac{\Delta E}{E_a} \right| \approx \frac{34}{108} \approx 0.3$$

که مقدار قابل ملاحظه‌ای است، در نتیجه اعتبار نظریه پیرشیدگی به‌صورتی که ارائه شد هم چنان مورد سؤال باقی می‌ماند.



برهم‌کنش‌تبادلی + برهم‌کنش مستقیم + بدون برهم‌کنش

شکل (۱۰-۴) جابه‌جاییهای انرژی حالت‌های اتمی ایده‌آل در هلیوم وقتی برهم‌کنش الکترونی در نظر گرفته می‌شود.

جابه‌جاییهای مربوط به حالت‌های برانگیخته اول  $1S$  و  $3S$  به‌طریق مشابهی به‌دست می‌آیند. با استفاده از (۹-۴۹)، این جابه‌جاییها به‌صورت زیر به‌دست می‌آیند

$$\Delta E = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}^{(1)} d\mathbf{r}^{(2)} \{ \psi_{100}^*(\mathbf{r}^{(1)}) \psi_{200}^*(\mathbf{r}^{(2)}) \pm \psi_{100}^*(\mathbf{r}^{(2)}) \psi_{200}^*(\mathbf{r}^{(1)}) \} \\ \times \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}|} \{ \psi_{100}(\mathbf{r}^{(1)}) \psi_{200}(\mathbf{r}^{(2)}) \pm \psi_{100}(\mathbf{r}^{(2)}) \psi_{200}(\mathbf{r}^{(1)}) \}$$

که علامت بالائی برای  $^1S$  و علامت پائینی برای  $^3S$  است. جابه‌جاییهای انرژی می‌توانند به صورت زیر تجزیه شوند

$$\Delta E = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}^{(1)} d\mathbf{r}^{(2)} \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}|} \{ |\psi_{100}(\mathbf{r}^{(1)})|^2 |\psi_{200}(\mathbf{r}^{(2)})|^2 \\ + |\psi_{100}(\mathbf{r}^{(2)})|^2 |\psi_{200}(\mathbf{r}^{(1)})|^2 \} \quad (\text{انتگرال مستقیم}) \\ \pm \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}^{(1)} d\mathbf{r}^{(2)} \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}|} \{ 2 \operatorname{Re} \psi_{100}^*(\mathbf{r}^{(1)}) \psi_{200}^*(\mathbf{r}^{(2)}) \\ \times \psi_{100}(\mathbf{r}^{(2)}) \psi_{200}(\mathbf{r}^{(1)}) \} \quad (\text{انتگرال تبادلی})$$

انتگرال مستقیم نشان می‌دهد که هر دو حالت برانگیخته اول ( $^1S$  و  $^3S$ ) به علت دافعه کولنی الکترون‌ها جابه‌جا می‌شوند. انتگرال تبادلی مثبت برای حالت  $^1S$  یک جابه‌جایی ثانوی به طرف بالا برای این حالت نشان می‌دهد. انتگرال تبادلی منفی برای حالت  $^3S$  نشان می‌دهد که حالت سه‌گانه قدری به طرف پائین جابه‌جا می‌شود. برای تعمیم، مشاهده می‌کنیم که انتگرال مستقیم یک انتقال بسته به مقدار  $L$  ایجاد می‌کند. به علاوه، بسته به اینکه حالت مورد نظر دارای ماهیت یگانه یا سه‌گانه باشد، یک شکافتگی دیگر هم رخ می‌دهد. برای یک آرایش معین حالت سه‌گانه همیشه در زیر حالت یگانه قرار دارد\*.

شکافتگی حالت‌های یگانه و سه‌گانه می‌تواند بر اساس اصل طرد پاولی توضیح داده شود. به خاطر آنکه در دترمینان اسلاتری که حالت یگانه  $S=0$  را می‌سازد ذرات دارای اسپین‌های مختلف‌الجهت می‌باشند. قسمت فضائی متقارن است و همبستگی‌های دافعه وجود ندارند. ذرات می‌توانند نزدیک یکدیگر قرار داشته باشند و انرژی برهم‌کنشی مثبت می‌تواند بزرگ باشد. از طرف دیگر، حالت  $S=1$  شامل دترمینان‌های اسلاتری با اسپین‌های هم‌جهت است. دافعه‌های آماری وابسته به قسمت فضائی پاد متقارن الکترون‌ها را دور از یکدیگر نگاه می‌دارد

---

\* تعمیم این اصل به اتم‌های چند الکترونی به نام قاعده هاند موسوم است. بنا به این قاعده هر چه چندگانگی اسپینی بالاتر باشد (برای یک آرایش ثابت) انرژی پائین‌تر است (رک مسئله ۹-۵).

و بنابراین انرژی برهم کنشی مثبت را کاهش می دهد . بنابراین حالت  $^3S$  ( $S = 1$ ) در زیر حالت  $^1S$  ( $S = 0$ ) قرار می گیرد .

برهم کنش الکتروستاتیکی تهیگنی را به طور کامل از بین نمی برد زیرا انرژی پریشیده در (۱۵-۱۲) هنوز از  $M_L$  و  $M_S$  مستقل است . در نتیجه هر ترکیب خطی از این زیر حالت های مغناطیسی هنوز ویژه حالت مرتبه صفر مناسب انرژی برای هامیلتونی الکتروستاتیکی هلیوم است . چون این هامیلتونی با عملگر  $\hat{J}^{(T)} = \hat{L}^{(T)} + \hat{S}^{(T)}$  جابه جاپذیر است ، قادر خواهیم بود ویژه حالت های انرژی را به صورت

$$|E_\alpha LSJM_J\rangle = \sum_{M_L, M_S} C_{M_L, M_S} |E_\alpha LSM_L M_S\rangle \quad (12-10)$$

با خواص

$$\hat{J}^{(T)^2} |E_\alpha LSJM_J\rangle = J(J+1)\hbar^2 |E_\alpha LSJM_J\rangle \quad (|L-S| \leq J \leq L+S)$$

و

$$\hat{J}_Z^{(T)} |E_\alpha LSJM_J\rangle = M_J \hbar |E_\alpha LSJM_J\rangle \quad (|M_J| \leq J)$$

بسازیم .

به بیان دیگر ، هم دسته حالت های  $|M_L M_S\rangle$  و هم دسته حالت های  $|JM_J\rangle$  پریشیدگی الکتروستاتیکی را قطری می کنند . اگر میدان های خارجی غایب باشند ، پریشیدگی غالب (بعد از برهم کنش الکتروستاتیکی) ناشی از آثار ساختار ریز است . مجموعه مرتبه صفر صحیح عبارتست از  $|JM_J\rangle$  ، و انرژی های مرتبه اول مربوطه وابستگی به  $J$  را نشان می دهند . اگر یک میدان ضعیف  $B$  وارد شود ، در ترازها بسته به مقدار  $M_J$  یک جابه جایی (اثر غیرعادی زمین ۷-۵۷) مشاهده می کنیم .

اگر یک میدان قوی  $B$  به اتم هلیوم اعمال شود ، جمله های ساختار ریز در هامیلتونی می توانند نادیده گرفته شوند و حالت های مرتبه صفر به شکل  $|M_L M_S\rangle$  هستند . جابه جایی های ترازها ، طبق الگوی پاشن - پاک (۶-۳۸) به  $M_L$  و  $M_S$  بستگی دارند .

برای متمایز کردن حالت های  $|E_\alpha LSM_L M_S\rangle$  از حالت های  $|E_\alpha LSJM_J\rangle$  ، یک شاخص پائین (مقدار  $J$ ) به نماد طیف نمایی اخیر اضافه می کنیم . به عنوان مثال ،  $^3P$  معرف حالت  $|E_\alpha 1, 1, M_L M_S\rangle$  است در حالی که  $^3P_2$  معرف حالت  $|E_\alpha 1, 1, 2, M_J\rangle$  می باشد .

قواعد گزینش برای گذارهای دو قطبی تابشی در اتم های جفت شده  $L-S$  شبیه به قواعدی هستند که در فصل ۷ برای هیدروژن به دست آمد ، یعنی ،  $\Delta S = 0$  و  $\Delta L = 0, \pm 1$  ، با  $\Delta J = 0, \pm 1$  اما  $J = 0 \rightarrow J = 0$  ممنوع است . قاعده  $\Delta S = 0$  بخصوص جالب است زیرا

ایجاب می‌کند که فقط گذارهای یگانه به یگانه ( $S = 0 \rightarrow S = 0$ ) یا سه‌گانه به سه‌گانه ( $S = 1 \rightarrow S = 1$ ) در تقریب دوقطبی امکان‌پذیر باشند. اگر هلیوم در اولین حالت برانگیخته سه‌گانه خود،  $^3S$ ، باشد نمی‌تواند از طریق یک گذار دوقطبی به حالت پایه خود،  $^1S$ ، بازگردد. بنابراین اولین حالت برانگیخته سه‌گانه یک حالت فراپایدار (شدیدا پایدار) است. یک گاز مرکب از اتمهای هلیوم می‌تواند به عنوان یک سیستم دومولفه‌ای در نظر گرفته شود. اتمهایی که در حالت‌های سه‌گانه و در حالت‌های یگانه هستند به ترتیب ارتو-هلیوم و پاراهلیوم را تشکیل می‌دهند. هرکدام از این زیرسیستمها از نظر طیف نمایی از دیگری متمایز است.

قبلاً دیدیم که برهم‌کنشهای الکتروستاتیکی بین الکترون‌ها در هلیوم تصحیحات قابل ملاحظه‌ای در ترازهای ایده‌آل (هیدروژن مانند) ایجاد می‌کنند. با اینکه تصحیحات مرتبه اول انرژی با تجربه سازگاراند، هیچ دلیلی وجود ندارد که قبول کنیم نظریه پیرشیدگی مرتبه بالاتر وضعیت را بهتر می‌کند. در واقع، سری پیرشیدگی حتی ممکن است همگرا نشود. خوشبختانه روشهای دیگری وجود دارد که بررسی اتمهای حقیقی را میسر می‌سازند و به نتایج متناهی منجر می‌شوند. این روشها در زیر مورد بحث قرار خواهند گرفت.

#### ۴- اتم هلیوم - یک روش وردشی

روش وردشی با موفقیت بزرگی (هیلراس<sup>۲</sup>، ۱۹۳۰) در محاسبه انرژیهای اتم هلیوم به کار گرفته شده است. مطلب را با در نظر گرفتن تابع آزمایشی یک پارامتری به شکل

$$\Psi_{\text{trial}}(\alpha, \mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}) = \frac{\alpha^3}{\pi a^3} \exp\left(-\frac{\alpha(r^{(1)} + r^{(2)})}{a}\right) \quad \left(a = \frac{\hbar^2}{me^2}\right) \quad (10-14)$$

شروع می‌کنیم. این تابع آزمایشی اساساً حاصل ضربی از توابع هیدروژن مانند است که در آن پارامتر وردشی  $\alpha$  است. انتگرال وردشی (با استفاده از هامیلتونی هلیوم) عبارت است از

$$I(\alpha) = \int d\mathbf{r}^{(1)} d\mathbf{r}^{(2)} \Psi_{\text{trial}}^*(\alpha, \mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}) \left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^{(1)2}}{2m} - \frac{\hbar^2 \nabla^{(2)2}}{2m} - \frac{2e^2}{r^{(1)}} - \frac{2e^2}{r^{(2)}} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}|} \right\} \Psi_{\text{trial}}(\alpha, \mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)})$$

$$= \langle T_1 \rangle + \langle T_2 \rangle + \langle V_1 \rangle + \langle V_2 \rangle + \langle V_{12} \rangle$$

از انتگرالها نتیجه می‌شود

$$\begin{aligned} \langle T_1 \rangle &= \langle T_2 \rangle = -\alpha^2 \varepsilon_1 \\ \langle V_1 \rangle &= \langle V_2 \rangle = 4\alpha \varepsilon_1 \quad \left( \varepsilon_1 = \frac{-me^4}{2\hbar^2} = -13.6 \text{ eV} \right) \\ \langle V_{12} \rangle &= -\frac{5}{4}\alpha \varepsilon_1 \end{aligned}$$

با مشتق‌گیری از انتگرال وردشی

$$I(\alpha) = -\varepsilon_1 [2\alpha^2 - 8\alpha + \frac{5}{4}\alpha] = -\varepsilon_1 [2\alpha^2 - \frac{27}{4}\alpha]$$

نتیجه خواهیم گرفت

$$\left. \frac{dI}{d\alpha} \right|_{\alpha=\alpha_0} = -\varepsilon_1 (4\alpha_0 - \frac{27}{4}) = 0 \quad \text{یا} \quad \alpha_0 = \frac{27}{16}$$

انرژی و ویژه تابع وردشی برای حالت پایه هلیوم می‌شود

$$E_{\text{var}} = I(\alpha_0) = -\varepsilon_1 [2(\frac{27}{16})^2 - \frac{27}{4} \frac{27}{16}] = 2(\frac{27}{16})^2 \varepsilon_1 \sim -76.6 \text{ eV}$$

و

$$\Psi_{\text{var}} = \left[ \frac{(\frac{27}{16})^3}{\pi a^3} \right] \exp \left[ -(\frac{27}{16}) \frac{(r^{(1)} + r^{(2)})}{a} \right] \quad (15-10)$$

این انرژی از نتیجه مرتبه صفر پیریشیدگی ( $E_{\text{pert}} \simeq -74 \text{ eV}$ ) کمتر است و بنابراین دقیقتر است. مقدار مشاهده شده برای انرژی حالت پایه عبارت است از

$$E_{\text{exp}} \simeq -78.6 \text{ eV}$$

می‌توان با تعمیم تابع آزمایشی به‌طوری که پارامترهای زیادتری در برداشته باشد نتایج فوق را بهبود بخشید. هیلراس یک تابع آزمایشی به‌شکل

$$\Psi_{\text{trial}} = e^{-as} P(s, t, u)$$

به‌کاربرد که در آن  $P$  یک چهارده جمله‌ای (با چهارده پارامتر) از متغیرهای زیر است



$$s = \frac{r^{(1)} + r^{(2)}}{a}, \quad t = \frac{r^{(1)} - r^{(2)}}{a}, \quad \text{و} \quad u = \frac{|r^{(1)} - r^{(2)}|}{a}$$

انرژی وردشی به دست آمده برای حالت پایه،  $0.0016 \text{ eV}$  پایین تر از مقدار مشاهده شده است — یک تناقض ظاهری با قضیه وردشی. با جلوگیری از هرگونه خطای عددی، تفاوت مزبور باید به نادیده گرفتن جمله‌های ساختار ریز در هامیلتونی الکتروستاتیکی هلیوم نسبت داده شود. مرتبه این تفاوت به راستی از همان مرتبه ساختار ریز است.

می‌توان قضیه وردشی را به حالت‌های برانگیخته هلیوم نیز اعمال کرد. این امر ایجاب می‌کند که شرایط اضافه‌تری (به عنوان مثال، تعامد نسبت به تابع حالت پایه) روی توابع حالت برانگیخته هلیوم اعمال کنیم و این کار خارج از محدوده این کتاب است\*.

## ۵ — مدل آماری توماس و فرمی برای اتمهای پیچیده

اتم  $Z$  الکترونی، چون یک سیستم چندجسمی است، نمی‌تواند دقیقاً حل شود. می‌توانستیم یک روش پریشیدگی را با استفاده از حالت‌های اتمی اتم ایده‌آل به عنوان تقریب مرتبه صفر، اعمال کنیم. اما همان‌طور که اخیراً دیدیم، تصحیحات وابسته به جمله‌های برهم‌کنش الکترونی غالباً آنقدر بزرگ‌اند که نظریه پریشیدگی نمی‌تواند مفید باشد. خواهیم دید که هر الکترون اتمی را می‌توان طوری در نظر گرفت که، تقریباً، به طور مستقل در یک پتانسیل الکتروستاتیکی حاصل از میدان کولنی هسته که به وسیله سایر الکترون‌ها پوشش شده است حرکت کند. بنابراین داشتن مدلی که پتانسیل و چگالی بار در داخل ابر الکترونی یک اتم را تعیین کند مفید خواهد بود. چنین مدلی نخستین بار توسط توماس و توسط فرمی (۱۹۲۸) به طور مستقل ارائه شد.

مدل (آماری) توماس — فرمی فرض می‌کند که هسته به وسیله یک گاز الکترونی با تقارن کروی احاطه شده است. چگالی به حد کافی بزرگ است، به گونه‌ای که ابر الکترونی می‌تواند به عنوان یک گاز فرمی تبه‌گن در نظر گرفته شود. به علاوه، فرض شده است که چگالی تابعی

\* برای بررسی مفصل اتم هلیوم به کتاب زیر مراجعه کنید

H.A. Bethe and E.E. Salpeter, "Quantum Mechanics of — one and Two Electron Atomes", PP.118-165. Springer-Verlag, Berlin, 1957.

از فاصله تا هسته است که به‌کندی با آن تغییر می‌کند\* در نتیجه، هر عنصر حجم  $dr$  را می‌توان به‌عنوان جعبه‌ای که حاوی یک گاز الکترونی یک‌نواخت با چگالی موضعی  $\rho(r)$  است در نظر گرفت. انرژی کل یک الکترون در داخل این جعبه عبارت است از

$$\varepsilon(r) = \frac{p^2}{2m} - e\phi(r) \quad (16-10)$$

که در آن  $\phi(r)$  پتانسیل موضعی در داخل عنصر حجم دیفرانسیلی است. انرژی جنبشی موضعی بیشینه، تراز فرمی موضعی،  $\varepsilon_F(r) = p_F^2/2m$ ، نامیده می‌شود. با استفاده از رابطه بین چگالی موضعی و  $\varepsilon_F$ ، (۹-۷۱)، خواهیم داشت

$$\varepsilon_{\max}(r) = \mu = \varepsilon_F - e\phi(r) = \frac{\hbar^2}{2m} [3\pi^2 \rho(r)]^{2/3} - e\phi(r) \quad (17-10)$$

انرژی موضعی کل بیشینه درست همان پتانسیل شیمیایی گاز است و وقتی تعادل حاصل شده باشد در همه‌جا ثابت است. برای یک اتم خنثی، می‌توان مقدار  $\phi(r)$  و  $\rho(r)$  در بینهایت را برابر با صفر در نظر گرفت، در این صورت نتیجه می‌شود که  $\mu$  در آن نقطه صفر است. چون  $\mu$  ثابت است، بنابراین باید در همه جا صفر باشد و از (۱۷-۱۰) نتیجه خواهد شد

$$\phi(r) = \frac{\hbar^2}{2me} [3\pi^2 \rho(r)]^{2/3} \quad (18-10)$$

این معادله ارتباطی بین چگالی موضعی و پتانسیل برقرار می‌سازد. از ترکیب این معادله و معادله پواسن،  $\nabla^2 \phi = 4\pi e\rho$ ، خواهیم داشت

$$\nabla^2 \phi = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d\phi}{dr} \right) = \frac{4\pi e (2me)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \phi^{3/2} \quad (19-10)$$

وقتی  $r \rightarrow 0$ ، قانون گاوس ایجاب می‌کند که میدان الکتریکی تماماً از هسته ناشی شده باشد

---

\* بخصوص چگالی باید در فاصله‌ای که در حدود طول موجهای دوبروی الکترونها در آن ناحیه است، تقریباً ثابت باشد. در اتمها، این شرط عموماً هم در فاصله بسیار نزدیک و هم در فاصله بسیار دور از هسته نقض می‌شود، بنابراین مدل توماس-فرمی در این نواحی غیرقابل اعتماد است.

یعنی،

$$\lim_{r \rightarrow 0} E \rightarrow \frac{Ze}{r^2} \quad (۱۰ - ۲۰ الف)$$

به طور معادل، وقتی به هسته نزدیک شویم پتانسیل باید به شکل  $\lim_{r \rightarrow 0} \phi(r) \sim Ze/r$  در آید. شرط مرزی روی  $\phi$  به طور مناسب به صورت  $\lim_{r \rightarrow 0} r\phi = Ze$  نوشته می شود. دور از اتم (خنثی)، انتظار داریم که پتانسیل (پوشش داده شده) سریع تر از  $1/r$  سقوط کند زیرا بار کل اتم صفر است. بنابراین شرط مرزی دیگر برای  $\phi$  عبارت است از

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r\phi \rightarrow 0 \quad (۱۰ - ۲۰ ب)$$

برای اینکه تحلیل ما مستقل از  $Z$ ، و بنابراین برای تمام اتمها معتبر باشد تبدیل مقیاسی

$$r = \frac{1}{2} \left( \frac{3\pi}{4} \right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{me^2} \frac{x}{Z^{1/3}} = 0.885 a \frac{x}{Z^{1/3}} \quad (۱۰ - ۲۱)$$

را وارد می کنیم که در آن  $x$  متغیر (بدون بعد) توماس - فرمی است. به علاوه، تابع توماس - فرمی  $\chi$  را توسط

$$\phi = \frac{Ze\chi}{r} \quad (۱۰ - ۲۲)$$

تعریف می کنیم. با استفاده از متغیرهای جدید، (۱۰-۱۹) می شود

$$x^{1/2} \frac{d^2 \chi}{dx^2} = \chi^{3/2} \quad (۱۰ - ۲۳)$$

با شرایط مرزی

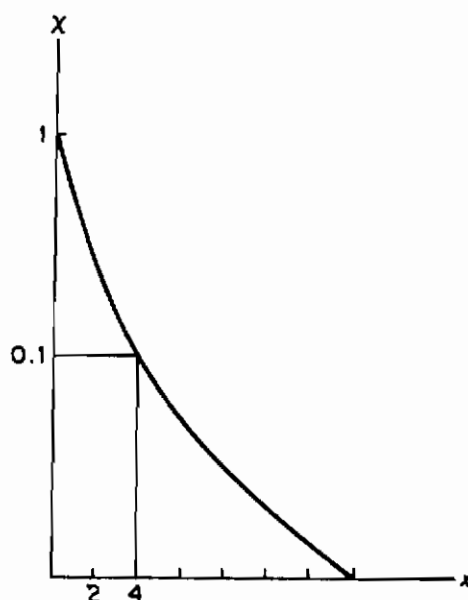
$$\lim_{x \rightarrow 0} \chi \rightarrow 1 \quad \text{و} \quad \lim_{x \rightarrow \infty} \chi \rightarrow 0$$

معادله (۱۰-۲۳) معادله (غیرخطی) توماس - فرمی است. جواب آن به طور عددی به دست می آید و به صورت منحنی نشان داده شده در شکل (۱۰-۵) است. وقتی  $\chi$  تعیین شد،  $\phi(r)$  و  $\rho(r)$  را از (۱۰-۲۲) و (۱۰-۱۸) به دست می آوریم. هم پتانسیل و هم چگالی هردو بسته به مقدار  $Z$  از اتمی به اتمی دیگر تغییر می کنند.

با وجودی که مدل توماس - فرمی از نظر ماهیت نیمه کلاسیکی است و اطلاعات کمی از جزئیات ساختار اتمی به دست می دهد، به بعضی از نتایجی منجر می شود که حتی در یک بررسی

بغرنج‌تر معتبر است.  $x_f$  را شعاع کره‌ای (در واحدهای توماس - فرمی) حول هسته تعریف خواهیم کرد که شامل کسر  $f$  از  $Z$  الکترون باشد. چون  $x_f$  مستقل از  $Z$  است، نتیجه می‌شود که کسر داخل کره‌ای به شعاع  $r_f$  روی مقیاس واقعی فاصله، با استفاده از (۱۰-۱۲)، عبارت است از

$$r_f = \frac{0.885a}{Z^{1/3}} x_f$$



شکل (۱۰-۵) تابع توماس - فرمی  $\chi(x)$ ، به منظور بزرگ نشان دادن منحنی برای مقادیر بزرگ  $x$ ، مقیاس قائم خطی نیست. توجه کنیم که  $\chi(4)$  فقط یک دهم  $\chi(0)=1$  است.

اگر "اندازه" اتم را عبارت از فاصله شعاعی که در آن کسر معینی (مثلاً ۹۰٪) الکترون‌ها قرار دارند در نظر بگیریم، این اندازه با افزایش عدد اتمی به صورت  $Z^{-1/3}$  کاهش می‌یابد. این "انقباض" اتم با افزایش  $Z$  یک ویژگی برای اتمها است و حتی در دقیق‌ترین بررسیها ظاهر می‌شود.

مفاهیم آشنای ظرفیت و ساختار لایه‌ای از مدل آماری توماس - فرمی نتیجه نمی‌شوند. یک بررسی کوانتومی دقیق‌تر از اتم  $Z$  الکترونی نخست توسط هارتری و توسط فوک ارائه شد. تقریب هارتری - فوک نتایجی را به دست می‌دهد که برای درک ما از اتم اساسی هستند و زیربنائی برای شیمی مولکولی تشکیل می‌دهند.

## ۶- روش میدان خود سازگار و تقریب هارتری- فوک - اسلاتر

اتم  $Z$  الکترونی - یک سیستم چند جسمی برهم کنش کننده - نمی تواند دقیقاً بررسی شود . طبیعی به نظر می رسد که در تقریب مرتبه صفر برهم کنش ها را نادیده بگیریم و نظریه پریشیدگی را اعمال کنیم . اما ، چون انرژی برهم کنش الکترون ها قابل ملاحظه است ، بعید است که حالت های اتمی ایده آل که از توابع مداری هیدروژن مانند تشکیل شده باشند بتوانند حتی شباهتی جزئی با ویژه حالت های اتمی حقیقی داشته باشند .

یک راه برای به دست آوردن توابع مداری دقیق تر این است که فرض کنیم هسته از نظر الکتروستاتیکی به وسیله یک پتانسیل موثر متوسط حاصل از ابر الکترونی پوشش شده است . به طور معادل ، برهم کنش های دو جسمی به وسیله پتانسیل های یک جسمی مؤثر جایگزین می شوند . هامیلتونی دقیق برای اتم می تواند با اضافه کردن و کم کردن پتانسیل موثر  $V_{eff}^{(q)}(\mathbf{r}^{(q)})$  باز نویسی شود ، یعنی ،

$$\mathcal{H} = \left\{ \sum_{q=1}^Z -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^{(q)2} - \frac{Ze^2}{r^{(q)}} + V_{eff}^{(q)}(\mathbf{r}^{(q)}) \right\} + \left\{ \frac{1}{2} \sum_q^Z \sum_{i \neq q}^Z \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(q)} - \mathbf{r}^{(i)}|} - \sum_q^Z V_{eff}^{(q)}(\mathbf{r}^{(q)}) \right\} \quad (10-24)$$

آکولاد اول که به ترتیب شامل انرژی جنبشی ، پتانسیل الکتروستاتیکی هسته و پتانسیل موثر پوششی می باشد به عنوان هامیلتونی ناپریشیده در نظر گرفته می شود . آکولاد دوم ، انرژی همبستگی ، معرف تفاضل بین برهم کنش های دو جسمی و پتانسیل های یک جسمی مؤثر است و به عنوان پریشیدگی منظور خواهد شد ؛ این جمله مسئول همبستگی های دینامیکی بین الکترون ها است . منظور ، البته ، پیدا کردن پتانسیل های موثری است که به بهترین وجه نزدیک به برهم کنش های دو جسمی باشند زیرا در این صورت جمله همبستگی به اندازه ای کوچک خواهد بود که بتوانیم نظریه پریشیدگی را اعمال کنیم .

چون هامیلتونی ناپریشیده حاصل جمع عملگر های یک جسمی است ، معادله شرودینگر متناظر چند جسمی تفکیک پذیر است و منجر به مجموعه ای از معادلات ویژه مقداری یک جسمی به شکل

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{r} + V_{eff}(\mathbf{r}) \right\} \psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}) \quad (10-25)$$

می‌شود.  $\psi_i$  و  $\varepsilon_i$  عبارتند از ویژه تابعها و انرژیهای مدارها. برای سهولت، فرض کرده‌ایم که پتانسیل موثر وارد به تمام الکترونها یکی است و اینکه این پتانسیل مرکزی است. یک تفاوت مهم بین این حالت‌های مداری و حالت‌های هیدروژن مانند اتم ایده‌آل این است که تبهمگنی تصادفی (کولنی) در حالت‌های مداری وجود ندارد. در نتیجه، انرژیهای مداری هم به  $n$  و هم به  $l$  بستگی دارند. انرژی کل اتم عبارت است از حاصل جمع انرژیهای حالت‌های اشغال شده\*.

حالت‌های اتمی می‌توانند از دترمینانهای اسلاتر مدارهای اشغال شده تشکیل شوند. چگالی بار ابر الکترونی در یک آرایش داده شده به وسیله رابطه

$$\rho(r) = e \sum_{i=1}^Z |\psi_i|^2 \quad (10-26)$$

به چگالیهای احتمال ذره انفرادی مرتبط می‌شود، که در آن جمع بندی روی مدارهای اشغال شده انجام شده است.

موجه به نظر می‌رسد که پتانسیل موثر پوششی به طریقی به این چگالی بستگی داشته باشد و بنابراین به وسیله ماهیت ویژه تابعهای مداری اشغال شده تعیین شود. به یک معنا، وقتی می‌گوئیم  $\psi_i$  توسط (۱۰-۲۵) به  $V_{eff}(r)$  بستگی دارد و  $V_{eff}(r)$  به نوبه خود از طریق (۱۰-۲۶) به  $\psi_i$  بستگی دارد، وارد مدار بسته‌ای خواهیم شد. این، در واقع، همان فکری است که در ورای روش میدان خودسازگار (SCF) که برای تعیین  $V_{eff}$  در یک آرایش داده شده به کار رفت، قرار دارد. نحوه عمل برای آرایش‌های حالت پایه را به طور خلاصه شرح می‌دهیم.

(الف) یک پتانسیل موثر حالت پایه تخمین می‌زنیم (به عنوان مثال، پتانسیل توماس - فرمی را برای آزمایش انتخاب می‌کنیم)

(ب) معادله (۱۰-۲۵) را حل می‌کنیم و توابع مداری  $\psi_i$  و ویژه مقدارهای  $\varepsilon_i$  را که  $Z$  تابع مداری با انرژی کمینه را نمایش می‌دهند، پیدا می‌کنیم.

(ج) از (۱۰-۲۶) چگالی ابر الکترونی را با استفاده از  $Z$  تابع مداری در (ب) پیدا

\* مانند نظریه هارتری - فوک، استثنائاتی برای این قاعده انرژی کل وجود دارد، اما در اینجا مورد بحث قرار نخواهند گرفت. به عنوان مثال به کتاب زیر مراجعه کنید:

H.A. Bethe and R.W. Jackiw, " Intermediate Quantum Mechanics," 2nd ed., P.63. Benjamin, New York, 1968.

می‌کنیم .

( د ) یک رابطه بین چگالی ابر و پتانسیل موثر وضع می‌کنیم (مثلاً "قانون کولن" ) و  $V_{\text{eff}}(r)$  را محاسبه می‌کنیم .

( ه ) اگر  $V_{\text{eff}}(r)$  مرکزی نباشد ، یک متوسط گیری روی یک زاویه حجمی انجام می‌دهیم و  $V_{\text{eff}}(r)$  را به دست می‌آوریم .

( و ) به مرحله (ب) باز می‌گردیم و مراحل از (ب) تا (و) را آنقدر تکرار می‌کنیم تا خود سازگاری حاصل گردد ، یعنی ، تا دیگر  $V_{\text{eff}}$  در هر دوره‌ای تغییر نکند .

تعداد دوره‌های لازم برای رسیدن به یک حالت معقول از خود سازگاری بستگی به تخمین اولیه در مرحله (الف) دارد . بعلاوه ، پتانسیل موثر به دست آمده به طور مؤثری بستگی به مرحله (د) دارد .

هارتری در ابتدا پیشنهاد کرد که پتانسیل باید توسط قانون کولن به چگالی بار ربط داده شود\* ، یعنی ،

$$V_{\text{eff}}(r) = e^2 \int \frac{dr' \rho(r')}{|r - r'|} \quad (10-27)$$

در این تحلیل ، هارتری کاملاً اثر همبستگی آماری در (۱۰-۲۷) را نادیده گرفت . فوک ، با به کار بردن روش وردشی ، نظریه هارتری را تعمیم داد تا آثار تبادلی را نیز شامل شود . متأسفانه ، روش فوک منجر به مجموعه معادلاتی می‌شود که بررسی عددی آنها نسبتاً مشکل است . اسلاتر معادلات هارتری-فوک را با استفاده از یک تقریب اضافی مبتنی بر نظریه توماس-فرمی ساده کرد . نتیجه اسلاتر در زیر خلاصه می‌شود :

$$V_{\text{eff}}(r) = e^2 \int \frac{dr' \rho(r')}{|r - r'|} - \frac{3}{2} e^2 \left( \frac{3}{\pi} \rho(r) \right)^{1/3} \quad (10-28)$$

که در آن

$$\rho = \sum_{\text{occupied orbitals}} |\psi_i|^2$$

در حالی که جمله اول اساساً پتانسیل هارتری است ، جمله دوم معرف تقریب اسلاتر از

\* در نظریه هارتری انتگرال کولنی (۱۰-۲۷) با حذف اثر الکترون روی خودش محاسبه می‌شود . در (۱۰-۲۸) انرژی خودی گنجانده شده است .

تصحیحات تبادلی فوک است .

تقریب اسلاتر در فاصله‌های زیاد از هسته اعتبار خود را از دست می‌دهد . چون انتگرال کولنی در (۱۰-۲۸) مربوط به چشمه‌ای است که بار آن  $-Ze$  است، از قانون گاوس نتیجه می‌شود که این پتانسیل در  $r$  بزرگ پتانسیل هسته را خنثی می‌کند . به‌طور معادل ، پتانسیل کل از دید یک الکترون لایه خارجی اساساً "پتانسیل تبادلی اسلاتر است که با فاصله به‌طور نمایی سقوط می‌کند . این مطلب از نظریه‌ی نادرست است زیرا انتظار داریم که یک الکترون خارجی یک پتانسیل پوشش شده معادل با پتانسیل الکترون هیدروژنی، یعنی  $-e^2/r$  را به‌بهنده تصحیح اسلاتر باید در فاصله زیاد با جانشینی جمله  $\rho^{1/3}$  به‌وسیله یک "دنباله کولنی" (یعنی  $-e^2/r$ ) اصلاح گردد (شکل ۱۰-۶) .

چون پتانسیل HFS معمولاً "تقارن کروی ندارد ، مناسب است که از آن روی یک زاویه حجمی متوسط گرفت ، یعنی ،

$$V_{\text{HFS}}(r) = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} V_{\text{HFS}}(r) d\Omega \quad (10-29)$$

این فرایند متوسط‌گیری تقریب میدان مرکزی نامیده می‌شود که در بالا در مرحله (ه) ذکر گردیده است .

کامپیوترها محاسبات پتانسیل HFS خود سازگار را تسان کرده‌اند . پتانسیلهای حالت پایه برای همه اتمهای جدول تناوبی محاسبه شده و در جداولی آورده شده‌اند\* نظریه HFS به‌صورتی که در فوق ارائه شد باید در مورد الکترونهای داخلی اتمهای سنگین اصلاح شود . چون این الکترونها انرژیهای در حدود 50 keV~ دارند آثار نسبیتی قابل ملاحظه‌اند .

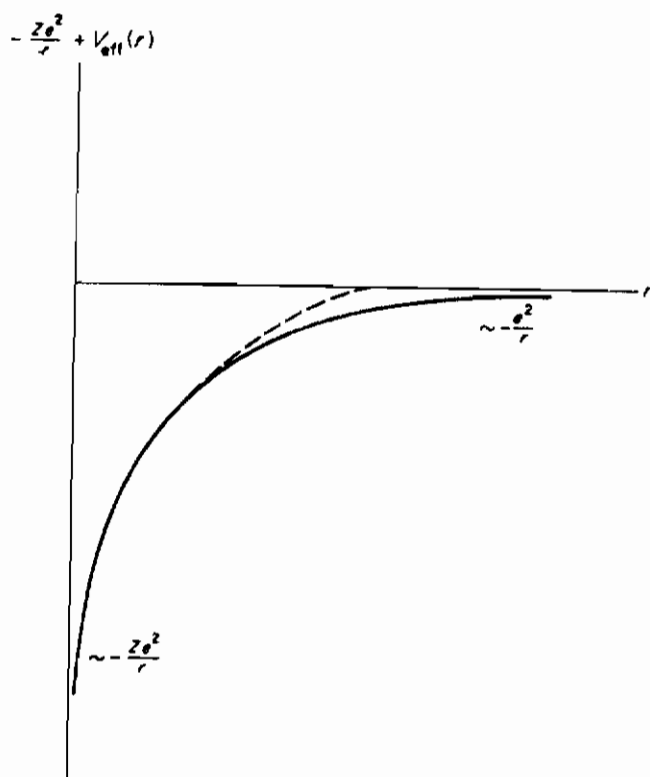
معمولاً "فرض می‌شود که پتانسیل موثر حالت پایه شبیه به پتانسیل حالت‌های برانگیخته پائینی است ، یعنی ، حالت‌هایی که در آنها فقط یک الکترون خارجی برانگیخته شده است . توجیه این فرض این است که چگالی اتمی یک اتم با  $Z$  بزرگ ، وقتی که فقط یک الکترون به‌مدار مجاور برود ، تغییر قابل ملاحظه‌ای نمی‌کند . توابع مداری HFS دارای شکل

$$\psi_{nlm_l m_s} = R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \phi) |m_s\rangle$$

\* به‌کتاب زیر مراجعه کنید :

F.Herman and S. Skillman, " Atomic structure Calculations, Prentice-Hall. Englewood Cliffs, New Jersey, 1963.





شکل (۱۰-۶) یک تابع انرژی پتانسیل نمونه‌ای که الکترون اتمی در آن قرار دارد، تابع رسم شده از یک پتانسیل HFS اصلاح شده به دست آمده است. به دنباله کولنی متصل شده در  $r \rightarrow \infty$  توجه کنید. در نزدیکی هسته، پتانسیل عمدتاً "محصول بار هسته" است. منحنی خط چین پتانسیل HFS اصلاح نشده را نشان می‌دهد.

می‌باشند. این توابع شبیه به توابع هیدروژن مانند اتم ایده‌آل هستند به استثنای اینکه قسمت شعاعی دیگر یک تابع وابسته لاگاریتمی نیست. انرژی مداری هم به  $l$  و هم به  $n$  بستگی دارد و بنابراین دیگر "بوهروگونه" نیست.

حالت‌های اتمی به دست آمده از مدارهای HFS نمایانگر تقریب‌های مرتبه صفراند. از نظر انرژی، این حالت‌ها بر حالت‌های اتم حقیقی منطبق‌اند. به طور معادل، انرژی همبستگی در (۱۰-۲۴) کوچک است. این تعجب‌آور نیست زیرا نظریه فوک بر یک اصل وردشی پایه‌گذاری شده و انرژی‌های دقیق غیرمنتظره نیستند. از طرف دیگر، خود تابع حالت‌های HFS ممکن است از سایر لحاظ شبیه تابع حالت‌های یک اتم حقیقی نباشند. توابع وردشی عموماً "همبستگی کمی" با حالت‌های دقیق دارند. تا آنجا که به انرژی مربوط است، شیمیایی یا طیف‌نمایی، تقریب HFS می‌تواند کاملاً درست باشد. برای مشاهده پذیرهای دیگر، این

تقریب می‌تواند به نتایج کاملاً بی‌معنی‌ای منجر شود .

## ۷- خواص اتمها در تقریب HFS

هامیلتونی الکتروستاتیکی برای اتم  $Z$  الکترونی در حالت پایه‌اش می‌تواند به صورت

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \lambda V$$

بیان شود که در آن

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{q=1}^Z \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^{(q)2} - \frac{Ze}{r^{(q)}} + V_{\text{HFS}}(r^{(q)}) \right\} \quad (10-30)$$

عبارت است از هامیلتونی هارتری - فوک - اسلاتر و

$$\lambda V = \frac{1}{2} \sum_q \sum_{i \neq q} \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(q)} - \mathbf{r}^{(i)}|} - \sum_{q=1}^Z V_{\text{HFS}}(r^{(q)}) \quad (10-31)$$

عبارت است از جمله همبستگی (دینامیکی) .

حالت‌های ایده‌آل ناپریشیده می‌توانند از دترمینانهای اسلاتر مدارهای HFS، یعنی،  $\psi_{nlm_l m_s}$  ساخته شوند. برای یک آرایش  $n-l$  داده شده از این مدارها، مدل‌پردازی ایجاب می‌کند که حالت‌های ایده‌آل بتوانند با کمک \*

$$|E_\alpha LS\rangle = \sum_{\substack{m_s \\ m_s' \\ \vdots}} \sum_{\substack{m_l \\ m_l' \\ \vdots}} C_{m_l m_l' \dots m_s m_s' \dots} |nn' \dots ll' \dots m_l m_l' \dots m_s m_s' \dots\rangle \quad (10-32)$$

با محدودیت‌های

$$|l + l' + \dots|_{\min} \leq L \leq (l + l' + \dots)$$

$$(10-33)$$

$$|s + s' + \dots|_{\min} \leq S \leq (s + s' + \dots)$$

\* بقیه اعداد کوانتومی را ننوشتیم زیرا بسته به طرحواره جفت‌شدگی می‌توانند  $M_s$  و  $M_L$  یا  $M_J$  باشند .

ساخته شوند. انرژی کل آرایش  $n-l$  عبارت است از

$$E_{\text{HFS}} = \varepsilon_{nl} + \varepsilon_{n'l'} + \dots \quad (10-34)$$

انرژی اتم به مقادیر  $n$  و  $l$  مربوط به مدارهای HFS اشغال شده بستگی دارد. گفته می‌شود که الکترونهای با یک عدد کوانتومی اصلی  $n$  در یک لایه قرار دارند. برای یک  $n$  معین، الکترونهای با یک  $l$  در یک زیر لایه قرار دارند. اصل پاولی حداکثر  $(2l+1)$  الکترون را در یک زیر لایه و  $2n^2$  الکترون را در یک لایه مجاز می‌دارد. در حالت پایه یک اتم، مدارهای با کمترین انرژی اشغال هستند. برای  $n$  و  $l$  های به حد کافی بزرگ بستگی  $\varepsilon_{nl}$  به  $l$  ممکن است به بستگی آن به  $n$  غالب گردد. به عنوان مثال، در  $^{36}\text{Kr}$  لایه  $4s$  در انرژی پائین‌تری نسبت به لایه  $3d$  قرار دارد و بنابراین قبل از آن پر می‌شود.

چگالی شعاعی یک اتم به وسیله ویژه تابعهای شعاعی مدارهای اشغال شده به صورت

$$\rho_r = \sum_{\substack{n,l \\ \text{occupied}}}^Z R_{nl}^2(r)r^2 \quad (10-35)$$

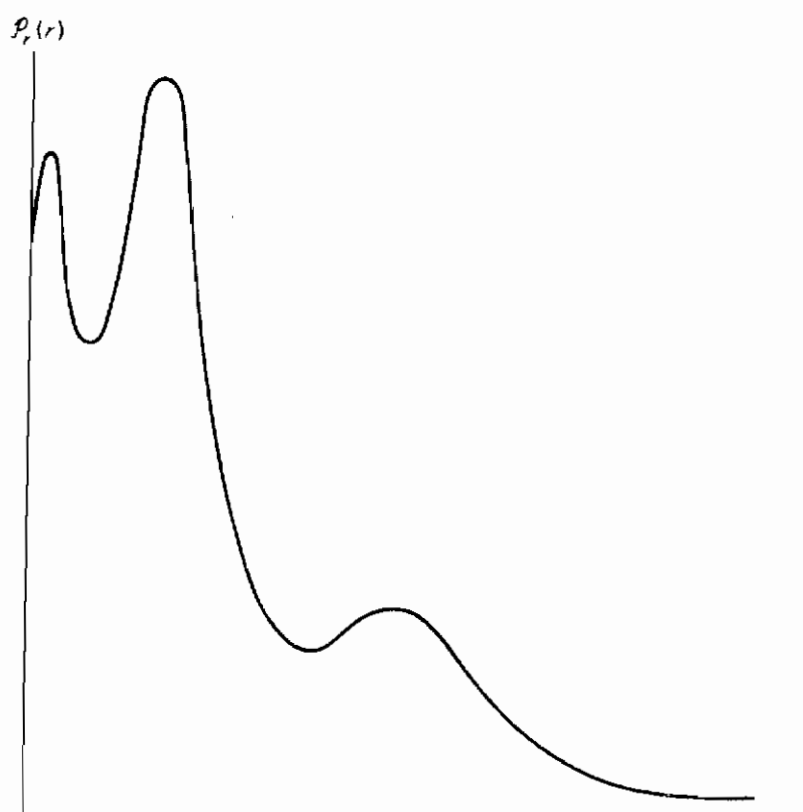
تعیین می‌شود. چگالی شعاعی حالت پایه برای  $^{18}\text{Ar}(1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6)$  در شکل (10-7) رسم شده است. توجه کنیم که این چگالی در فاصله‌های مشخصه‌ای از هسته دارای قله‌هایی است که تجمع فضائی الکترونها را در داخل لایه‌ها نشان می‌دهند.

حالت پایه یک اتم با لایه‌های کاملاً پر شده نا تهیگن است زیرا فقط یک آرایش از اعداد کوانتومی مغناطیسی، بدون نقض اصل پاولی، امکان پذیر است. در واقع، زیر حالت‌های مغناطیسی مداری ( $m_l$ ) به طور متقارن حول مقدار صفر مجتمع شده‌اند. هم چنین نیمی از الکترونها دارای  $m_s = \frac{1}{2}$  هستند در حالی که نیمی دیگر دارای  $m_s = -\frac{1}{2}$  می‌باشند. حالت پایه یک چنین اتمی به طور خود به خود یک حالت  $^1S_0$  ( $L=0, S=0, J=0$ ) است. می‌توانیم این نتیجه را تا حدی با مشاهده اینکه یک زیر لایه پرسهمی در تکانه زاویه‌ای اتم ندارد، تعمیم دهیم. در نتیجه، کافی است مدل برداری فقط به الکترونهای یک زیر لایه پر نشده اعمال شود تا حالت طیف نمایی اتم تعیین شود.

اتمهایی که آخرین زیر لایه آنها  $p^6$  و کاملاً پر باشد معمولاً "انرژی فوق العاده زیادی برای برانگیخته شدن طلب می‌کنند. بنابراین، به عنوان مثال، اتمهای  $^{18}\text{Ar}$  ( $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6$ ),  $^{10}\text{Ne}$  ( $1s^2, 2s^2, 2p^6$ ), و  $^{36}\text{Kr}$  ( $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^2, 3d^{10}, 4p^6$ ) همه گاز

\* به "جابه جایی" زیر لایه‌های  $s$  و  $d$  توجه کنید.

بی‌اثراند \* . علاوه ، همه آنها دارای حالت‌های پایه اتمی  $1S$  هستند . این اتمها از نظر شیمیایی غیرفعال می‌باشند و نسبتاً " پایدارند و انرژیهای یونش آنها خیلی زیاد است .



شکل (۷-۱۰) چگالی شعاعی حالت پایه برای آرگون

اتمهایی که یک الکترون کم‌تر از الکترونهای گازهای بی‌اثر مذکور در فوق دارند ، از نظر انرژی تعادل دارند که در یک واکنش شیمیایی یک الکترون کسب کنند . این اتمها ، یعنی  $^{53}\text{I}(\cdots 5p^5)$  ,  $^{35}\text{Br}(\cdots 4p^5)$  ,  $^{17}\text{Cl}(\cdots 3p^5)$  ,  $^9\text{F}(\cdots 2p^5)$  , شیمیایی مثل غیرفلزهای فعال رفتار می‌کنند و انرژیهای زیاد واکنش را تولید می‌کنند . اتمهایی که یک الکترون بیشتر از گازهای بی‌اثر دارند ، از نظر انرژی تعادل دارند که این الکترون ظرفیت را در واکنشهای شیمیایی شرکت دهند و یک رفتار فلزگونه‌ای از خود بروز می‌دهند . این اتمهای قلیائی شامل  $^{37}\text{Rb}(\cdots 4p^6, 5s^1)$  ,  $^{19}\text{K}(\cdots 3p^6, 4s^1)$  ,  $^{11}\text{Na}(\cdots 2p^6, 3s^1)$  ,

\* اتم  $^4\text{He}$  با یک آرایش  $1s^2$  نیز بی‌اثر است .

و  $^{55}\text{Cs}(5p^6, 6s^1)$  می باشند\*. اتمهای قلیائی از اهمیت خاصی برخوردارند زیرا خطوط طیفی آنها کاملاً شبیه به خطوط طیفی هیدرژن است. چون در اتمهای قلیائی الکترونها داخلی در زیر لایه های پر قرار دارند، تکانه زاویه ای مشخصه آنها به وسیله تنها الکترون ظرفیت  $s$  تعیین می شود. حالت پایه یک قلیائی مثل هیدرژن یک دوگانه  $^2S_{1/2}$  ( $J = \frac{1}{2}, S = \frac{1}{2}, L = 0$ ) است. اختلاف اصلی بین الکترون ظرفیت در یک قلیائی و الکترون هیدرژنی این است که اولی تحت یک پتانسیل پوشش شده غیر کولنی قرار دارد، در نتیجه، طیف انرژی قلیائی بوهرگونه نیست. یک فرمول تجربی خیلی مفید برای انرژی الکترون ظرفیت در یک قلیائی عبارت است از

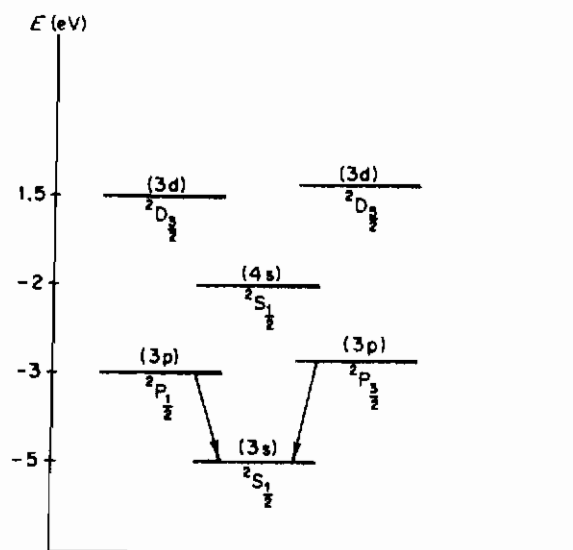
$$\varepsilon_{nl} = \frac{\varepsilon_1}{[n - \mu(l)]^2} \quad (\varepsilon_1 = -13.6 \text{ eV}) \quad (10-36)$$

انحرافهای از فرمول بوهر به وسیله مجموعه ای از پارامترهای  $\mu(l)$  موسوم به نقایص کوانتومی مشخص می شوند. این پارامترها از یک قلیایی به قلیایی دیگر تغییر کرده و پوشش هسته به وسیله الکترونها داخلی (مغزه) را ایجاد می کنند. برای سدیم ( $n \geq 3$ )، نقایص کوانتومی عبارتند از  $\mu(0) = 1.35$ ،  $\mu(1) = 0.86$ ،  $\mu(2) = 0.01$  و  $\mu(3) \simeq 0$ . این پارامترها با افزایش  $l$  کاهش می یابند. برای  $l$  های بزرگ (مدارهای شبه دایره ای)، الکترونها به طور قابل ملاحظه ای در مغزه نفوذ نمی کنند و یک پتانسیل کولنی پوششی معادل با پتانسیل الکترون هیدرژنی تحمل می کنند. برای مقادیر پائین، مدار به شدت غیر دایره ای می شود، الکترون ظرفیت وارد مغزه شده و بیشتر هسته را می بیند. مدار به هسته مقیدتر و انرژی آن کمتر است. با استفاده از (10-36) و مقادیر  $\mu(l)$  برای سدیم، به سادگی می توان تحقیق کرد که تراز  $4s$  دارای انرژی کمتری از تراز  $3d$  است.

حالت های اتمی پائین یک قلیائی با تراز اشغال شده به وسیله الکترون ظرفیت (نوری) تعیین می شود. حالت پایه ( $3s^1$ ) اتم  $\text{Na}$ ، به عنوان مثال، یک حالت  $^2S_{1/2}$  است. معادله (10-36) نشان می دهد که انرژی الکترون ظرفیت عبارت است از  $\varepsilon_{30} \simeq -5.13 \text{ eV}$ . آرایش  $3p^1$  می تواند به حالت های  $^3P_{1/2}$  و  $^3P_{3/2}$  که هر کدام دارای  $\varepsilon_{31} \simeq -2.96 \text{ eV}$  هستند پیوند شود. عملاً، وقتی تصحیحات ساختار ریز در نظر گرفته شوند،  $^2P_{3/2}$  کمی بالای  $^2P_{1/2}$  قرار خواهد گرفت. در واقع، گذارهای از حالت های  $^2P_{3/2}$  و  $^2P_{1/2}$  به حالت پایه

\*  $^3\text{Li}(1s^2, 2s^1)$  نیز یک قلیائی است زیرا یک الکترون بیش از  $^2\text{He}(1s^2)$  دارد.

$^2S_{1/2}$  مسئول رنگ زرد مشخصه دوگانه "P" ( $\lambda_1 = 5895.9 \text{ \AA}$ ) و ( $\lambda_2 = 5889.9 \text{ \AA}$ ) در طیف گسیلی سدیم است (شکل ۱۰-۸).



شکل (۱۰-۸) یک دیاگرام تراز برای حالت‌های برانگیخته پائین الکترون ظرفیت سدیم که گذارهای مسئول دوگانه زرد را نشان می‌دهد. جدائی مختصر در حالت‌های دوگانه P و دوگانه D همان ساختار ریز است.

اتم‌های با زیرلایه‌های نیمه‌پر به علت وجود تبهگنی از مرتبه بالا به طور قابل ملاحظه‌ای برای بررسی نظری مشکل‌ترند. به طور کلی، برانگیختگی‌های نوری پائین در اتم‌ها به وسیله گذارهای وابسته به الکترون‌های خارجی ایجاد می‌شوند. الکترون‌های داخلی نمی‌توانند گذارهایی به حالت‌های مجاور انجام دهند زیرا این حالت‌ها معمولاً اشغال هستند. با استفاده از الکترون‌های پرانرژی یا فوتونها ممکن است یک اتم را از یک الکترون داخلی خالی کرد. گذارهای به حالت‌های خالی معمولاً با گسیل تابش مشخصه اشعه X همراه هستند.

#### ۸- مولکول‌های دواتمی - تقریب بی‌دررو

نظریه کوانتومی مولکول‌ها به طور قابل ملاحظه‌ای پیچیده‌تر از نظریه کوانتومی اتم‌ها است. در مولکول‌ها، الکترون‌ها به بیش از یک مرکز نیرو، که در اینجا هسته‌ها هستند، مقیدند. پیچیدگی با توجه به این واقعیت که سیستم هسته‌ای در حرکت است افزایش بیشتری پیدا می‌کند. اما چند عامل فیزیکی وجود دارد که تقریب‌هایی را ممکن می‌سازند. فرکانس

حرکت هسته‌ای خیلی کمتر از فرکانس وابسته به الکترون‌ها است\* . این ویژگی کاربرد تقریب بی دررو را مجاز می‌نماید . ما این تقریب را وقتی به مولکولهای دو اتمی ، یعنی ، مولکولهای که از دو اتم تشکیل شده‌اند ، اعمال می‌شود ، مورد بحث قرار خواهیم داد\*\* .

معادله شرودینگر برای یک مولکول دو اتمی ، با صرف نظر کردن از اسپین ، عبارت است از

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{\nabla^{(A)^2}}{M_A} + \frac{\nabla^{(B)^2}}{M_B} \right] + \sum_{j=1}^{Z_A+Z_B} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^{(j)^2} + V_{\text{tot}}(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{R}^{(A)}, \mathbf{R}^{(B)}) \right\} \times \Psi_a(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{R}^{(A)}, \mathbf{R}^{(B)}) = \varepsilon_a \Psi_a(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{R}^{(A)}, \mathbf{R}^{(B)}) \quad (10-37)$$

که در آن  $M_A$  و  $M_B$  جرم هر کدام از هسته‌ها ،  $m$  جرم هر الکترون ،  $\mathbf{R}^{(A)}$  و  $\mathbf{R}^{(B)}$  مکانهای هسته‌ها ،  $\mathbf{r}^{(j)}$  مکان الکترون  $j$  ام و  $Z_A$  ،  $Z_B$  عدد اتمی هر کدام از اتمها است . انرژی پتانسیل کل سیستم مولکولی می‌تواند به صورت

$$V_{\text{tot}} = \frac{Z_A Z_B e^2}{|\mathbf{R}^{(A)} - \mathbf{R}^{(B)}|} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(i)} - \mathbf{r}^{(j)}|} - e^2 \sum_i \left\{ \frac{Z_A}{|\mathbf{r}^{(i)} - \mathbf{R}^{(A)}|} + \frac{Z_B}{|\mathbf{r}^{(i)} - \mathbf{R}^{(B)}|} \right\} \quad (10-38)$$

تجزیه شود . این جملات ، به ترتیب ، بیانگر انرژی دافعه الکتروستاتیکی بین هسته‌ها ، انرژی دافعه بین الکترون‌ها ، و انرژی جاذبه بین الکترون‌ها و هسته‌ها هستند . چون انرژی جنبشی برای هسته‌ها خیلی کوچکتر از الکترون‌ها است ، فرضهای زیر را در نظر می‌گیریم :

(الف) تابع حالت مولکولی می‌تواند به صورت یک حاصل ضرب از یک قسمت هسته‌ای در یک قسمت الکترونی بیان شود ، یعنی

$$\Psi_a(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{R}^{(A)}, \mathbf{R}^{(B)}) = \xi_{\text{nuc}}(\mathbf{R}^{(A)}, \mathbf{R}^{(B)}) \psi_{\text{elec}}(\mathbf{r}^{(j)}) \quad (10-39)$$

(ب) قسمت الکترونی می‌تواند طوری مورد بحث قرار گیرد که گوئی ، هسته‌ها با  $\mathbf{R}^{(A)}$  و  $\mathbf{R}^{(B)}$  ثابت ، ساکن باقی می‌مانند .

\* این امر به خاطر این است که هسته‌ها به طور قابل ملاحظه‌ای از الکترون‌ها سنگین‌ترند .  
 \*\* تقریب بی دررو اولین بار توسط بورن و اهنهایمر به مولکولها اعمال شد (۱۹۲۷)

بعلاوه فرض خواهیم کرد که در مورد مولکول دواتمی، مختصات هسته‌ای، از طریق بردار نسبی  $\mathbf{R} = \mathbf{R}^{(A)} - \mathbf{R}^{(B)}$  در پتانسیل مولکولی شرکت می‌کند. این استدلال نمی‌تواند به راحتی به یک مولکول سه‌اتمی، که دارای ساختار خیلی پیچیده‌تری است، تعمیم داده شود. فرض (ب) ایجاب می‌کند که قسمت الکترونی در معادله

$$\left\{ \sum_j -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^{(j)2} + V_{\text{tot}}(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{R}) \right\} \psi_n(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{R}) = E_n(\mathbf{R}) \psi_n(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{R}) \quad (40-10)$$

صدق کند که در آن  $n$  معرف مجموعه‌ای از اعداد کوانتومی الکترونی است. باید تأکید شود که  $\mathbf{R}$  در (40-10) یک متغیر نیست، بلکه صرفاً به عنوان یک پارامتر عمل می‌کند. به بیان دیگر، ویژه مقادیرها و ویژه تابعهای الکترونی به طور پارامتری به جدائی هسته‌ای  $\mathbf{R}$  بستگی دارند. برای خوب فهمیدن مفهوم (40-10)، فرض کنیم که هسته ساکن می‌ماند و  $\mathbf{R}$  برابر با یک ثابت  $\mathbf{R}_0$  است. بعلاوه فرض کنیم که الکترونها در حالت پایه هستند،  $n=0$ . اکنون فرض کنیم هسته به طور بی‌دررو حرکت کند، یعنی،  $\mathbf{R}$  به آهستگی تغییر کند. در این صورت موجه به نظر می‌رسد که الکترونها در حالت پایه ( $n=0$ ) باقی بمانند، ولی تابع و انرژی حالت پایه به آهستگی تغییر کنند. به بیان دیگر، انرژی و ویژه تابع حالت پایه با حل (40-10)، با استفاده از مقدار لحظه‌ای  $\mathbf{R}$ ، تعیین می‌شوند. به بیان معادل، وقتی مولکول ارتعاش می‌کند و می‌چرخد، اهر الکترونی نا برانگیخته باقی می‌ماند و به طور بی‌دررو حرکت هسته را تعقیب می‌کند. این توجیه شهودی برای تقریب بی‌دررو بر پایه قضیه بی‌دررو\* که برای آن اثبات دقیقی وجود دارد، پایه‌گذاری شده است.

برای منظور ما، کافی است موردی را در نظر بگیریم که در آن الکترونها در حالت پایه هستند. بنابراین، باید (40-10) را حل کنیم و تابع حالت پایه  $\psi_0(\mathbf{r}^{(j)}, \mathbf{R})$  و انرژی  $E_0(\mathbf{R})$  را برای تمام مقادیر پارامتری متغیر جدائی هسته‌ای  $\mathbf{R}$  پیدا می‌کنیم. این کار فی‌نفسه یک محاسبه عددی پیچیده است. با بردن (39-10) در (37-10) و با استفاده از (40-10) به معادله هسته‌ای

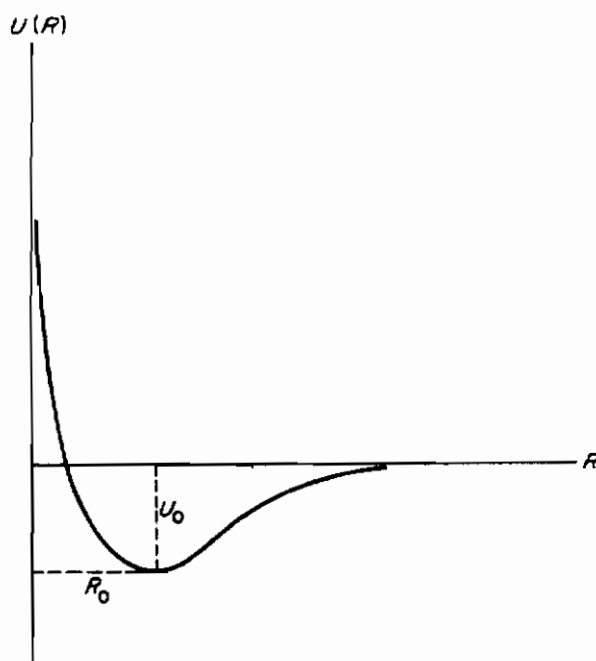
$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{\nabla^{(A)2}}{M_A} + \frac{\nabla^{(B)2}}{M_B} \right] + E_0(\mathbf{R}) \right\} \xi_v(\mathbf{R}^{(A)}, \mathbf{R}^{(B)}) = \varepsilon_v \xi_v(\mathbf{R}^{(A)}, \mathbf{R}^{(B)}) \quad (41-10)$$

\* به کتاب زیر مراجعه کنید

A. Messiah, "Quantum Mechanics," Volume II, P.747.  
wiley, New York, 1962.



هدایت خواهیم شد. توجه کنیم که ویژه مقدارهای الکترونی نقش یک پتانسیل بین هسته‌ای (مولکولی) را بازی می‌کنند. به‌طور کلی، قسمت هسته‌ای باید به‌صورت  $\epsilon_{n,v}$  و انرژی به‌صورت  $\epsilon_{n,v}$  نوشته شوند زیرا پتانسیل مولکولی  $E_n(R)$  به‌حالت الکترونی بستگی دارد.



شکل (۹-۱۰) پتانسیل مرس که نمایانگر انرژی مولکولی به‌صورت تابعی از فاصله بین هسته‌ای  $R$  است. انرژی کمینه  $U_0$  در  $R_0$  رخ می‌دهد و فاصله تعادل را تعیین می‌کند.

شکل عمومی  $E_0(R)$  برای بیشتر مولکولهای دواتمی می‌تواند به‌طور موجهی به‌پتانسیل مرس (شکل ۹-۱۰) تقریب زده شود

$$\begin{aligned} E_0(R) = U(R) &= -U_0[1 - e^{-(R-R_0)/a}]^2 + U_0 \\ &= U_0\{1 - [1 - e^{-(R-R_0)/a}]^2\} \quad (U_0 < 0) \end{aligned} \quad (۴۲-۱۰)$$

پارامترهای  $U_0$  و  $a$  بیانگر پارامترهای شدت و گستره‌اند و از مولکولی به‌مولکول دیگر تغییر می‌کنند. پارامتر  $R_0$  فاصله‌ای است که در آن  $U(R_0) = U_0$  کمینه است، یعنی، که در آن  $U'(R_0) = 0$ . بنابراین این پارامتر معرف جدائی تعادل هسته‌است. به‌علاوه،  $U_0$  را می‌توان به‌عنوان انرژی تجزیه مولکول در نظر گرفت.

با اعمال تبدیل مرکز جرم به (۴۰-۱۰)، معادله حرکت نسبی به‌شکل

$$\left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2\mu_M} + U(R) \right\} \xi_v(\mathbf{R}) = \varepsilon_v \xi_v(\mathbf{R}) \quad (10-43)$$

در می آید که در آن

$$\mu_M = \frac{M_A + M_B}{M_A M_B} \quad (\text{جرم کاهش یافته هسته ها})$$

چون پتانسیل مرس (۱۰-۴۲) دارای طبیعت مرکزی است، (۱۰-۴۳) می تواند با به کار بردن

$$\xi_v(\mathbf{R}) = u_{v,K}(R) Y_{K,M_K}(\theta, \phi) \quad (K = 0, 1, 2, \dots; |M_K| \leq K)$$

تفکیک شود که قسمت شعاعی آن در معادله

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu_M} \frac{d^2 u_{v,K}}{dR^2} + \left( U(R) + \frac{\hbar^2}{2\mu_M} \frac{K(K+1)}{R^2} \right) u_{v,K} = \varepsilon_{v,K} u_{v,K} \quad (10-44)$$

صدق می کند.

پتانسیل مولکولی موثر عبارت است از پتانسیل مرس و یک "پتانسیل گریز از مرکز". در حالی که حل دقیق (۱۰-۴۴) نسبتاً پیچیده است، این کار می تواند با فرض اینکه انحراف از وضع تعادل،  $\rho = R - R_0$ ، در مقایسه با  $R_0$  کوچک است، ساده شود. پتانسیل مرس (یا پتانسیل مولکولی دقیق اگر معلوم باشد) می تواند به یک سری تیلور در حول  $R_0$  به صورت

$$U(R) = U_0 + \frac{1}{2} U_0'' \rho^2 + \dots \quad (10-45)$$

بسط داده شود. در این بسط جمله خطی وجود ندارد زیرا، بنا به تعریف  $R_0$ ، داریم  $U_0' = 0$ . مقدار مشتق دوم پتانسیل مرس در  $R = R_0$  نقش ثابت کشسانی یک نیروی بازگرداننده خطی را بازی می کند. اگر  $\rho$  کوچک باشد، یعنی، مولکول خیلی برانگیخته نباشد، دو جمله اول در (۱۰-۴۵) به پتانسیل مرس نزدیک می شوند. به علاوه پتانسیل گریز از مرکز می تواند (تا مرتبه  $\rho^2$ ) به صورت

$$\frac{\hbar^2}{2\mu_M} \frac{K(K+1)}{(R_0 + \rho)^2} = \sigma K(K+1) \left[ 1 - 2 \frac{\rho}{R_0} + 3 \frac{\rho^2}{R_0^2} + \dots \right] \quad (10-46)$$

بسط داده شود که در آن

$$\sigma = \frac{\hbar^2}{2\mu_M R_0^2}$$

تقریباً "معرف یک "کوانتوم" دوران است. کمیت  $I_0 = \mu_M R_0^2$  به عنوان گشتاور اینرسی مولکول نسبت به مرکز جرم وقتی مولکول در وضعیت تعادل است شناخته می شود.

فرض خواهیم کرد که انرژی دورانی  $\sigma K(K+1)$  آن قدر کوچک است که جمله های شامل  $\rho$  و  $\rho^2$  در (۴۶-۱۰) می توانند به عنوان پیریشیدگی در نظر گرفته شوند. اگر در تقریب اول این جمله ها نادیده گرفته شوند، ویژه مقدارهای انرژی در (۴۴-۱۰) به شکل

$$\varepsilon_{v,K} = U_0 + (v + \frac{1}{2})\hbar\omega + \sigma K(K+1) \quad (47-10)$$

حاصل می شوند که در آن  $\omega = (U_0''/\mu_M)^{1/2}$  و  $v = 0, 1, 2, \dots$ . جمله اول انرژی حالت پایه الکترون در جدائی تعادل هسته ها است. جملات دوم و سوم به ترتیب بیانگر انرژی های ارتعاشی و دورانی هستند.

وقتی تصحیحات (تا مرتبه  $\rho^2$ ) پتانسیل گریزاز مرکز در (۴۶-۱۰) نگه داشته شوند، نظریه کوانتومی انرژی های ارتعاشی و دورانی را به صورت تقریبی زیر به دست می دهد

$$\begin{aligned} \varepsilon_{vib} &\simeq (v + \frac{1}{2})\hbar\tilde{\omega} \\ \varepsilon_{rot} &\simeq \sigma K(K+1) - \frac{\{K(K+1)\sigma\}^2}{3K(K+1)\sigma + \frac{1}{2}U_0''R_0^2} \end{aligned} \quad (48-10)$$

فرکانس ارتعاشی اصلاح شده عبارت است از

$$\tilde{\omega} = \left\{ \frac{U_0''R_0^2 + 6K(K+1)\sigma}{\mu_M R_0^2} \right\}^{1/2} \quad (49-10)$$

اصلاح فرکانس طبیعی و حضور پارامتر کشسانی  $U_0''$  در انرژی دورانی از "کشیدگی مرکزگریزی" مولکول ناشی می شود. اگر مولکول نسبتاً "سخت و مد دورانی پائین باشد ( $\sigma K(K+1) \ll U_0''R_0^2$ )، مولکول مستقلاً شبیه به یک نوسانگر و یک چرخنده عمل می کند و (۴۸-۱۰) به (۴۷-۱۰) تبدیل می شود.

البته نتایج (۴۸-۱۰) فقط برای ترازهای خیلی پائین دورانی و ارتعاشی معتبر است\*.

\* این محدودیت مستقل از شرط لازم برای تقریب بی-دررو است. برای بررسی بر مبنای پیریشیدگی به مرجع زیر رجوع کنید

Bethe and Jackiw, "Intermediate Quantum Mechanics", — 2nd ed, P. 131, Benjamin, 1968.

اگر تراز ارتعاشی خیلی بالا باشد، انحراف از تعادل آنقدر بزرگ است که ایجاب می‌کند جملات بالاتراز  $m^2$  را در بسط پتانسیل مرس در (۴۵-۱۰) نگه داریم. در واقع، (۴۸-۱۰) به غلط ایجاب می‌کند که ترازهای ارتعاشی متساوی‌الفاصله باشند. برای انرژیهای به‌اندازه کافی بالا، پتانسیل مرس حالت‌های مولکولی نامقید (گسسته شده) را تایید می‌کند. این نکته پیشنهاد می‌کند که، حداقل، ترازهای مولکولی باید وقتی انرژی افزایش می‌یابد به‌طرف یک پیوستار سوق داده شوند. بررسی دقیق‌تری از مولکولها می‌تواند در جای دیگری پیدا شود\*.

برای مورد خاص مولکول دواتمی هم‌بسته (یعنی، مرکب از اتمهای مشابه)، تمیزناپذیری دوهسته باید در نظر گرفته شود. این وضعیت را برای مولکول هیدروژن که هسته‌ها (پروتونها) فرمیونهای با اسپین  $\frac{1}{2}$  هستند تشریح می‌کنیم. همانند مورد دو الکترون هلیوم، اگر پروتونها اسپین‌های موازی داشته باشند، برای اسپین کل هسته یک حالت سه‌گانه (با اسپین  $S = 1$ ) داریم. به‌علاوه، تابع اسپینی کل هسته نسبت به تعویض مختصات اسپینی هسته‌ای متقارن است. چون تابع هسته‌ای کل برای فرمیونها باید کلا "پاد متقارن" باشد، نتیجه می‌شود که قسمت فضایی حالت سه‌گانه باید در اثر تعویض مختصات فضایی هسته‌ای تغییر علامت دهد. این تعویض از طریق یک انعکاس نسبت به مرکز جرم هسته‌ها خیلی راحت انجام می‌گیرد. برای اطمینان از پاد تقارن فضایی، شرط می‌کنیم که قسمت فضایی تابع هسته‌ای باید دارای پارите فرد باشد. چون عدد کوانتومی دورانی  $K$  پارите حالت را تعیین می‌کند، لازم است که  $K$  فرد باشد. بنابراین در حالت سه‌گانه دوپروتون (ارتو هیدروژن) فقط حالت‌های دورانی فرد (یعنی،  $K = 1, 3, 5 \dots$ ) امکان‌پذیر هستند. استدلال مشابهی نشان می‌دهد که در حالت یگانه ( $S = 0$ ) که اسپینهای پروتونها پاد موازی هستند (پارا هیدروژن) فقط حالت‌های دورانی زوج ( $K = 0, 2, 4 \dots$ ) منجر به تابع حالت‌هایی برای سیستم پروتونی می‌شود که کلا "پاد متقارن" است. در نتیجه کوانتش دورانی ( $K$  زوج یا فرد) بستگی به حالت اسپین کل هسته‌ای دارد. احتمال اینکه دو پروتون جهت‌های نسبی اسپینهای خود را عوض کنند کم است. به‌طور معادل اسپین کل هسته‌ای،  $S$ ، در حین گذارها پایسته است و قاعده گزینش  $\Delta S = 0$  را خواهیم داشت. معنی این مطلب این است که گذارها می‌توانند یا بین حالت‌های پارا و پارا یا بین حالت‌های ارتو و ارتو صورت گیرند و اینکه دو نمونه گاز هیدروژنی از نظر طیف نمایی متمایز

\* به‌کتاب زیر مراجعه کنید.

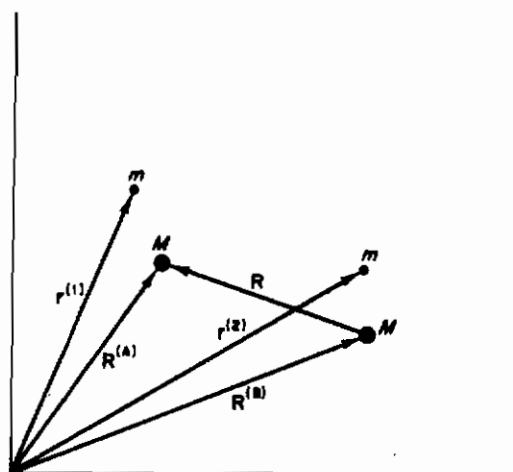
L. Pauling and E.B. Wilson, Jr. "Introduction to Quantum Mechanics", Chapters 12 and 13, Mc Graw-Hill, New York, 1935.

باقی می‌مانند .

### ۹- مولکول هیدرژن و پیوند کووالانسی (نظریه لندن ۳ - هایتلر ۴)

مولکول هیدرژن دو الکترون دارد و شاید ساده‌ترین مولکول (خنثی) دو اتمی برای بررسی باشد . به کارگیری روشهای بخش قبل برای محاسبه شکل پتانسیل مولکولی  $U(R)$  و پی بردن به اینکه یک پیوند کووالانسی (هم قطبی) چگونه تشکیل می‌شود آموخته شده است . طبق (۱۵-۳۷) ، هامیلتونی مولکولی  $H_2$  عبارت است از (شکل ۱۵-۱۰)

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -\frac{\hbar^2}{2M} [\nabla^{(A)2} + \nabla^{(B)2}] - \frac{\hbar^2}{2m} [\nabla^{(1)2} + \nabla^{(2)2}] + \frac{e^2}{|\mathbf{R}^{(A)} - \mathbf{R}^{(B)}|} \\ & + \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{r}^{(2)}|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{R}^{(A)}|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{R}^{(A)}|} \\ & - \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{R}^{(B)}|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{R}^{(B)}|} \quad (15-10) \end{aligned}$$



شکل (۱۵-۱۰) بردارهای مکانی وابسته به الکترونها ( $m$ ) و پروتونها ( $M$ ) در مولکول  $H_2$

با استفاده از تقریب بی‌دررو ، و با ثابت نگه داشتن  $\mathbf{R}^{(A)}$  و  $\mathbf{R}^{(B)}$  و حذف  $\nabla^{(A)}$  و  $\nabla^{(B)}$  در (۱۵-۵) ، یک معادله ویژه مقداری برای الکترونها برقرار می‌کنیم . از (۱۵-۴) برای

دو الکترون داریم

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} [\nabla^{(1)2} + \nabla^{(2)2}] + V_{\text{tot}}(\mathbf{R}^{(A)}, \mathbf{R}^{(B)}, \mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}) \right\} \Psi_n(\mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}, \mathbf{R}^{(A)}, \mathbf{R}^{(B)}) \\ = E_n(R) \Psi_n(\mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}, \mathbf{R}^{(A)}, \mathbf{R}^{(B)}) \quad (۱۰-۵۱)$$

که در آن  $n$  بیانگر اعداد کوانتومی حالت الکترونی است و  $\mathbf{R} = \mathbf{R}^{(B)} - \mathbf{R}^{(A)}$ . جمله  $V_{\text{tot}}$  شامل انرژی پتانسیل‌های داده شده در (۱۰-۵۰) است.

سعی خواهیم کرد که (۱۰-۵۱) را با استفاده از روشهای پیرشیدگی فصل ۷ حل کنیم. فرض می‌کنیم که مولکول از دو اتم هیدروژن بدون برهم‌کنش که در آن الکترون ۱ روی هسته A و الکترون ۲ روی هسته B قرار دارد تشکیل شده است. بنابراین هامیلتونی ناپیرشیده عبارت است از

$$\mathcal{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^{(1)2} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{R}^{(A)}|} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^{(2)2} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{R}^{(B)}|} \quad (۱۰-۵۲ \text{ الف})$$

در صورتی که پیرشیدگی نمایانگر برهم‌کنش بین دو اتم است، یعنی،

$$\lambda \mathcal{V} = \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{r}^{(2)}|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{R}^{(B)}|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{R}^{(A)}|} \quad (۱۰-۵۲ \text{ ب})$$

هامیلتونی ناپیرشیده منجر به یک معادله تفکیک‌پذیر می‌شود و ویژه تابعها نمایانگر یک جفت اتم هیدروژن مجزا هستند؛ قسمت فضائی ویژه تابع می‌تواند به صورت یک حاصل ضرب به شکل

$$\Psi_n = \psi_{nlm_l}^{(A)}(1) \psi_{n'l'm_l'}^{(B)}(2) \quad (۱۰-۵۳)$$

نوشته شود که در آن توابع  $\psi$  توابع هیدروژنی هستند. اعداد کوانتومی حالت‌های الکترونی دو اتم را مشخص می‌کنند. شاخصهای بالایی بیان می‌دارند که دو ویژه تابع نسبت به مبداء‌های واقع بر روی هسته‌های متفاوت در نظر گرفته شده‌اند.

هامیلتونی کل در (۱۰-۵۱) نسبت به جایگشت الکترونها متقارن است. در نتیجه، وقتی مولکول تشکیل شد ذرات تمیزناپذیراند و لازم است که (۱۰-۵۳) را با نوشتن

$$\Psi_n^\pm = \psi_{nlm_l}^{(A)}(1) \psi_{n'l'm_l'}^{(B)}(2) \pm \psi_{nlm_l}^{(A)}(2) \psi_{n'l'm_l'}^{(B)}(1) \quad (۱۰-۵۴)$$

به طور مناسبی متقارن کنیم. مثل مورد اتم هلیوم، قسمت فضائی و متقارن (علامت به اضافه) باید در یک قسمت اسپینی پاد متقارن متناظر یگانه  $S = 0$ ، حالتی که در آن دو اسپین الکترونی مختلف الجبهت هستند، ضرب شود. همین طور قسمت پاد متقارن در  $(10-54)$  در یک قسمت اسپینی متقارن متناظر با سه گانه  $S = 1$ ، حالتی که در آن اسپینهای الکترونها به صورت موازی ترکیب می شوند، ضرب می شود.

یک اشکال خیلی کوچک، ناشی از این واقعیت که ما هامیلتونی موجود در  $(10-51)$  را که نسبت به جایگشت متقارن است قدری به طور نامتقارن مثل  $(10-52)$  تفکیک کرده ایم، وجود دارد. توجه کنیم که نه  $(10-52)$  الف) و نه  $(10-52)$  ب) نسبت به شاخصهای الکترونها تقارن جایگشتی ندارند. بنابراین، اصولاً  $(10-54)$  ویژه تابع  $\Phi_0$  نیست. اما این اشکال می تواند با متقارن کردن معادلات پریشیدگی برطرف شود.

مناسب است که مبداء ترازها را طوری انتخاب کنیم که انرژی دو اتم بدون برهم کنش (سیستم ناپریشیده) صفر باشد. در این صورت پتانسیل مولکولی به طور ساده به وسیله تصحیح مرتبه اول ناشی از انرژی برهم کنش، یعنی،

$$E_n(R) = \frac{\lambda \int \hat{V} |\Psi_n^\pm|^2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2}{\int |\Psi_n^\pm|^2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2} \quad (10-55)$$

داده می شود. مخرج این کسر توابع مولکولی را بهنجار می کند. وقتی جملات شامل  $|\psi_{nlm_l}^{(A)}(1)\psi_{n'l'm_l'}^{(B)}(2)|^2$  را انتگرال گیری می کنیم، از  $\lambda V$  که توسط  $(10-52)$  ب) داده شده است برای متقارن کردن  $(10-55)$  استفاده می کنیم. از طرف دیگر وقتی جملات به شکل  $|\psi_{nlm_l}^{(A)}(2)\psi_{n'l'm_l'}^{(B)}(1)|^2$  را انتگرال گیری می کنیم، تبادیل  $1 \leftrightarrow 2$  را نیز در  $\lambda \hat{V}$  انجام می دهیم. جملات ضربداری در  $\lambda \hat{V}$  در اثر تبادیل  $1 \leftrightarrow 2$  دست نخورده باقی می ماند.

نشان دادن اینکه  $(10-55)$  شکل

$$E^\pm(R) = \frac{D \pm I}{1 \pm N} \quad (10-56)$$

را به خود می گیرد که در آن

$$\begin{aligned} D(R) &= \lambda \int V(\mathbf{R}^{(A)}, \mathbf{R}^{(B)}, \mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}) |\psi_{nlm_l}^{(A)}(1)\psi_{n'l'm_l'}^{(B)}(2)|^2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \\ I(R) &= \lambda \int V(\mathbf{R}^{(A)}, \mathbf{R}^{(B)}, \mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}) \{ \text{Re } \psi_{nlm_l}^{*(A)}(1)\psi_{n'l'm_l'}^{*(B)}(2) \\ &\quad \times \psi_{nlm_l}^{(A)}(2)\psi_{n'l'm_l'}^{(B)}(1) \} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \end{aligned}$$

$$N(R) = \text{Re} \int \psi_{nlm_1}^{*(A)}(1) \psi_{n'l'm_1}^{*(B)}(2) \psi_{nlm_1}^{(A)}(2) \psi_{n'l'm_1}^{(B)}(1) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2$$

به‌عنوان تمرین به‌عهد ه خواننده واگذار می‌شود .

۱۱.۹.۱.  $D(R)$  و  $I(R)$  به‌ت‌ت ب هم‌کنشهای مستقیم و تبادلی بین دو اتم را نشان



غالبی بازی می‌کند. از (۵۶-۱۰) نتیجه می‌شود که برای  $R$  متوسط  $E^+(R)$  منفی است در صورتی که  $E^-(R)$  مثبت است (شکل ۱۰-۱۱). بنابراین برای پیوندهای کووالانت به قواعد زیر می‌رسیم:

(۱) آثار تبادلی کوانتومی در تشکیل یک پیوند کووالانت یا هم‌قطبی پایدار نقش غالبی بازی می‌کنند.

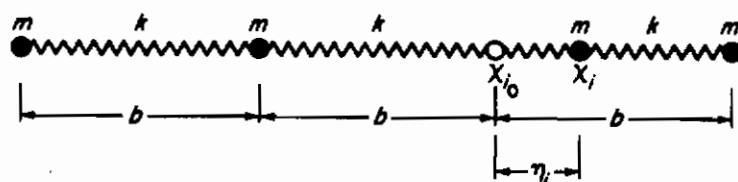
(۲) دو اتم هیدروژن تنها در صورتی یک مولکول پایدار تشکیل می‌دهند که الکترونهای آنها پاد موازی باشند، یعنی مولکول در حالت  $S=0$ ، یگانه، تشکیل می‌شود. وقتی  $E^+(R) = U(R)$  (به عنوان مثال در حالت پایه الکترونی) پیدا شد، مشخصات ارتعاشی و دورانی مولکول  $H_2$  می‌تواند مستقیماً با استفاده از روشهای بخش قبل به دست آیند.

#### ۱۰- تبدیل به مختصات بهنجار، شبکه خطی، فونونها

زنجیر کشان خطی یا شبکه خطی مثالی از یک مسئله چندجسمی حقیقی است که می‌تواند دقیقاً حل شود. این سیستم از یک ردیف یک بعدی  $N$  جرم نقطه‌ای یکسان که توسط فنرهای یکسانی به یکدیگر پیوند شده‌اند تشکیل شده است، برای سهولت، فرض خواهیم کرد که فقط حرکت‌های طولی، یعنی حرکت‌های در امتداد زنجیر، امکان‌پذیر هستند. شبکه سه‌بعدی، با اینکه قدری پیچیده‌تر از شبکه خطی است، نیز می‌تواند حل شود و نقش مهمی در نظریه ارتعاشات شبکه‌ای جامدات بازی می‌کند. گرچه نیروهای بین اتمی کاملاً کشان نیستند، مادامی که تغییر مکان اتمها از وضعیت‌های تعادلشان کوچک است، می‌توانند کشان در نظر گرفته شوند.

هامیلتونی کلاسیکی زنجیر (شکل ۱۰-۱۲) عبارت است از

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{P_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} K(\eta_{i+1} - \eta_i)^2 \quad (10-52)$$



شکل (۱۰-۱۲) یک زنجیر کشان خطی که جرم  $i$  ام آن از وضع تعادلش تغییر مکان داده است.

که در آن  $\eta_i = x_i - x_{i0}$  معرف تغییر مکان جرم نقطه‌ای  $i$  ام از وضع تعادل (در امتداد محور  $x$ ) است و  $K$  ثابت کشسانی فنرها است. این  $K$  را با عدد کوانتومی دورانی بخش ۸ اشتباه نکنید. بهتر است فاصله شبکه‌ای تعادل (بردار شبکه‌ای) را

$$b = x_{(i+1)0} - x_{i0}$$

تعریف کنیم و فرض کنیم که زنجیر طویل است\* یعنی  $L \gg b$  ( $N \gg 1$ ). با اعمال معادلات هامیلتون به (۱۵-۵۷)، معادلات حرکت زیر را برای جرم  $i$  ام به دست می‌آوریم

$$\dot{\eta}_i = \frac{P_i}{m} \quad \text{و} \quad \dot{P}_i = K(\eta_{i+1} - \eta_i) - K(\eta_i - \eta_{i-1}) \quad (10-58)$$

از ترکیب این معادلات خواهیم داشت

$$m\ddot{\eta}_i = K(\eta_{i+1} - 2\eta_i + \eta_{i-1}) \quad (i = 1 \dots N) \quad (10-59)$$

معادلات (۱۵-۵۹) مجموعه‌ای از  $N$  معادله دیفرانسیل معمولی جفت شده تشکیل می‌دهند زیرا  $\eta_{i-1}$  و  $\eta_{i+1}$  هر دو در معادله دیفرانسیل  $i$  ام ظاهر می‌شوند. معادلاتی از این قبیل برای مهندسين برق که با تجزیه و تحلیل مدارهای خطی سروکار دارند آشنا است. جوابهای آنها معمولاً با استفاده از تبدیلات خطی (به عنوان مثال، آنالیز فوریه) به دست می‌آیند.

جفت شدگی در (۱۵-۵۹) از جملات ضربدری  $\eta_{i+1}\eta_i$  در هامیلتونی (۱۵-۵۷) ناشی می‌شود. این جملات به نوبه خود مربوط به برهم‌کنشهای بین جرمهای مجاورند. اگر این جملات نبودند، هامیلتونی یک سیستم از نوسانگرهای جفت نشده را نشان می‌داد. ممکن است یک تبدیل خطی به یک مجموعه جدید متغیرهای بنیادی،  $\xi_i$  و  $p_{\xi_i}$  پیدا کرد، که در آنها هامیلتونی جدید دارای جمله‌های ضربدری نباشد. به بیان دیگر، ممکن است برهم‌کنشها را حذف کرد و مسئله جدیدی ایجاد کرد که شامل نوسانگرهای جفت نشده باشد. — برای انجام این کار،

\* توجه کنید که جرمهای واقع در دوانتهای زنجیر تنها یک جرم همسایه دارند و لذا از نظر دینامیکی با جرمهای درون زنجیر متفاوتند. لیکن وقتی زنجیر طویل باشد "اثر انتهایی" قابل اغماض است.

$$\eta_i = \sum_{n=1}^N a_{in} \xi_n \quad (۱۰-۶۰ \text{ الف})$$

و

$$P_i = \sum_{n=1}^N m a_{in} p_n \quad (۱۰-۶۰ \text{ ب})$$

را وارد می‌کنیم. با استفاده از رابطه  $P_i = m \dot{\eta}_i$ ، نتیجه می‌گیریم  $p_n = \dot{\xi}_n$  به طوری که مختصات و تکانه‌های بهنجار  $\xi_n$  و  $p_n$  سیستمهایی با جرم واحد را نمایش می‌دهند. ضرائب  $a_{in}$  باید طوری انتخاب شوند که وقتی (۱۰-۶۰) در (۱۰-۵۷) قرار داده شد، هامیلتونی جدید به صورت

$$H = \sum_{n=1}^N \left( \frac{1}{2} p_n^2 + \frac{1}{2} \omega_n^2 \xi_n^2 \right) \quad (۱۰-۶۱)$$

در آید. هامیلتونی جدید باید معرف مجموعه‌ای از  $N$  نوسانگر جفت نشده باشد که هر کدام دارای جرم واحد و یک فرکانس مشخصه  $\omega_n$  باشد. بعلاوه، هر نوسانگر یا مد بهنجار یک مجموعه از  $p_n$  و  $\xi_n$  های خاص خود را دارد. با اعمال معادلات بندادی هامیلتون به (۱۰-۶۱)، برای هر  $\xi_n$  معادله حرکتی به دست می‌آوریم که جواب آن عبارت است از\*

$$\xi_n = A_n e^{-i\omega_n t} \quad (۱۰-۶۲)$$

$A_n$  یک دامنه مختلطی است (دامنه و فاز) که باید از شرایط اولیه تعیین شود. به محض اینکه فرکانسهای بهنجار  $\omega_n$  برای هر مد شناخته شدند و ضرایب  $a_{in}$  تعیین شدند، (۱۰-۶۰) می‌تواند برای تعیین حرکت جرم نقطه‌ای  $i$  ام به صورت

$$\eta_i(t) = \sum_{n=1}^N a_{in} A_n e^{-i\omega_n t} \quad (۱۰-۶۳)$$

به کار رود.

برای محاسبه  $\omega_n$  و  $a_{in}$ ، (۱۰-۶۳) را در معادله حرکت (۱۰-۵۹) قرار می‌دهیم و نتیجه می‌گیریم

$$m \ddot{\eta}_i = K(\eta_{i+1} - 2\eta_i + \eta_{i-1})$$

---

\* در (۱۰-۶۲) و (۱۰-۶۳) فقط قسمت حقیقی معرف حرکت فیزیکی است.

یا

$$\sum_{n=1}^N -m\omega_n^2 a_{in} A_n e^{-i\omega_n t} = \sum_{n=1}^N K(a_{i+1,n} - 2a_{in} + a_{i-1,n}) A_n e^{-i\omega_n t} \quad (64-10)$$

چون (۶۴-۱۰) باید برای هر شرایط اولیه‌ای معتبر باشد، باید برای تمام  $A_n$  ها برقرار باشد. این فقط در صورتی ممکن است که ضرایب متناظر  $A_n$  در طرفهای راست و چپ برابر باشند، یعنی،

$$-m\omega_n^2 a_{in} = K(a_{i+1,n} - 2a_{in} + a_{i-1,n}) \quad (i = 1, \dots, N) \quad (65-10)$$

معادله (۶۵-۱۰) مجموعه‌ای از  $N$  معادله جبری خطی همگن برای مجهولهای  $a_{in}$  تشکیل می‌دهند. جوابهای غیر بدیهی ( $a_{in} \neq 0$ ) فقط برای بعضی از مقادیر  $\omega_n^2$  وجود دارند. این مقادیر به وسیله این شرط که دترمینان ضرایب  $a_{in}$  در (۶۵-۱۰) صفر باشد به دست می‌آیند. بدین ترتیب به یک معادله جبری درجه  $N$  که  $N$  ریشه آن مقادیر مجاز  $\omega_n^2$  را به دست می‌دهند، هدایت می‌شویم. هر کدام از مقادیر  $\omega_n$  مجدداً در (۶۵-۱۰) گذاشته می‌شود و مجموعه متناظر ضرایب  $a_{in}$  به دست می‌آیند.

محاسبه فرکانسهای بهنجار  $\omega_n$  و مجموعه متناظر ضرایب  $a_{in}$  حتی برای شبکه‌های نسبتاً کوچک فوق‌العاده مشکل است. نکته عجیب اینکه، برای مقادیر خیلی بزرگ  $N$ ، پیدا کردن جوابهای (۶۵-۱۰) با استفاده از استدلالات مبتنی بر تقارن انتقالی سیستم امکان‌پذیر می‌شود. اگر  $N \rightarrow \infty$ ، یک انتقال شبکه به اندازه مضربی از ثابت شبکه‌ای  $b$  هامیلتونی را دست‌نخورده باقی می‌گذارد. این موضوع پیشنهاد می‌کند که ضرایب موجود در (۶۵-۱۰) را به صورت

$$a_{in} = \frac{1}{(Nm)^{1/2}} \exp(ik_n x_{i0}) \quad (66-10)$$

اختیار کنیم که در آن  $k_n$  (بردار موج) ثابتی است که بستگی به مد دارد؛ به‌طور معادل، در یک مد داده شده حرکت‌های جرم‌های نقطه‌ای حداکثر در فاز با هم تفاوت دارند. از جایگذاری (۶۶-۱۰) در (۶۵-۱۰) محقق می‌شود که "حدس" ما در صورتی درست است که داشته باشیم

$$\begin{aligned} -m\omega_n^2 &= K\{\exp[ik_n(x_{(i+1)0} - x_{i0})] - 2 + \exp[-ik_n(x_{i0} - x_{(i-1)0})]\} \\ &= 2K[\cos k_n b - 1] \end{aligned}$$

یا

$$\omega_n = \left(\frac{K}{m}\right)^{1/2} \sin \frac{1}{2} k_n b \quad (۱۰-۶۷)$$

وقتی بردارهای موج مد معلوم شدند، ضرایب (۱۰-۶۶) و فرکانسهای (۱۰-۶۷) می‌توانند به دست آیند. معادله (۱۰-۶۷) مثالی است از یک رابطه پاشندگی، یعنی، رابطه‌ای بین  $\omega_n$  و  $k_n$  برای شبکه.

یک راه نسبتاً جالب برای پیدا کردن مقادیر  $k_n$  تحمیل شرایط مرزی روی جرمهای اول و آخر زنجیر است. وقتی  $N \rightarrow \infty$ ، می‌توان تصور کرد که هر دو نقطه مرزی به بینهایت می‌روند. به طور معادل، می‌توان شرط کرد که هر دو حرکت‌های یکسانی داشته باشند (شرایط دوره‌ای بورن - فون کارمن<sup>۵</sup>). از نظر ریاضی شرط می‌کنیم که

$$\eta_1(t) = \eta_N(t) \quad (۱۰-۶۸)$$

یا، از (۱۰-۶۰)،

$$\sum_{n=1}^N a_{1,n} \xi_n(t) = \sum_{n=1}^N a_{N,n} \xi_n(t)$$

چون این رابطه باید برای هر زمانی معتبر باشد، باید داشته باشیم

$$a_{1,n} = a_{N,n}, \quad \exp(ik_n x_{10}) = \exp(ik_n x_{N0})$$

یا

$$\exp[ik_n(x_{N0} - x_{10})] = e^{ik_n L} = 1 \quad (\text{برای هر } n) \quad (۱۰-۶۹)$$

معادله (۱۰-۶۹) در صورتی و فقط در صورتی می‌تواند برقرار باشد که\*

$$k_n = \frac{2\pi n}{L} \quad (n = 1, \dots, N) \quad (۱۰-۷۰)$$

فرکانسهای بهنجار و ضرایب (۱۰-۶۷) و (۱۰-۶۶) به شکل

۵ - Von Karman

\* این انتخاب بخصوص برای  $n$  تا حدی دلخواه است و هر مجموعه از  $N$  عدد صحیح متوالی می‌تواند مورد استفاده قرار گیرد.

$$\omega_n = \left(\frac{K}{m}\right)^{1/2} \sin \frac{\pi b n}{L}$$

و

$$a_{in} = \frac{1}{(Nm)^{1/2}} \exp\left(\frac{i2\pi x_{i0} n}{L}\right) \quad (۷۱-۱۰)$$

در می‌آیند. عبور به نظریه کوانتومی به وسیله جایگذاریهای

$$\eta_i \rightarrow \hat{\eta}_i, \quad P_i \rightarrow \hat{P}_i, \quad \xi_n \rightarrow \hat{\xi}_n, \quad p_n \rightarrow \hat{p}_n$$

و

$$\mathcal{H} \rightarrow \hat{\mathcal{H}} = \sum_{n=1}^N \frac{\hat{p}_n \hat{p}_n}{2} + \frac{1}{2} \omega_n^2 \hat{\xi}_n \hat{\xi}_n \quad (۷۲-۱۰)$$

انجام می‌گیرد. معادله شرودینگر حاصله تفکیک پذیر است (زیرا برهم کنش وجود ندارد) و ویژه مقدارهای کل به وسیله حاصل جمع

$$E_{tot} = \sum_{n=1}^N \varepsilon_{v_n}^{(n)} = \sum_{n=1}^N (v_n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_n \quad (v_n = 0, 1, 2, \dots) \quad (۷۳-۱۰)$$

داده می‌شوند. حالت ارتعاشی شبکه با معلوم بودن اعداد صحیح  $v_n$  وابسته به برانگیختگی برای هر کدام از نوسانگرهای مد بهنجار معلوم می‌شود. حالت پایه شبکه وقتی به تحقق می‌پیوندد که تمام  $v_n$  ها صفر باشند. انرژی متناظر با "نقطه صفر" شبکه عبارت است از

$$E_{\text{ground state}} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \hbar \omega_n \quad (۷۴-۱۰)$$

هم ارزی بین یک شبکه کشسان و یک مجموعه از نوسانگرهای مستقل بهنجار فرمولبندی نظری نسبتاً ساده‌ای برای ارتعاشات شبکه ممکن می‌سازد. این روش در توضیح رفتار حرارتی و صوتی مشاهده شده جامدات کاملاً مفید است.

یک راه جالب برای تعبیر طیف انرژی شبکه (۷۳-۱۰) وجود دارد. مفهوم یک شبه ذره به نام فونون را وارد می‌کنیم. هر فونون یک فرکانس  $\omega_n$  و یک انرژی  $\hbar \omega_n$  دارد. به هر مد بهنجار یک چنین فونونی با همان فرکانس وابسته می‌کنیم. اعداد صحیح برانگیختگی  $v_n$  به عنوان تعداد فونونهای موجود با فرکانس  $\omega_n$  تعبیر می‌شوند. وقتی هیچ فونونی حضور

نداشته باشد، یعنی، تمام  $\nu_n$  ها صفر باشند، یک "حالت تهی" با انرژی

$$\sum_{n=1}^N \frac{1}{2} \hbar \omega_n$$

داریم. چون عدد فونونی  $\nu_n$  ممکن است تغییر کند، فونونها می‌توانند ایجاد شوند یا از بین بروند. بعلاوه، چون  $\nu_n$  می‌تواند بزرگتر از یک باشد، بیش از یک فونون می‌توانند دارای یک انرژی  $\hbar \omega_n$  باشند. بنابراین، فونونها می‌توانند به عنوان بوزونهای تمیزناپذیر در نظر گرفته شوند که از آمار بوز-اینشتین پیروی می‌کنند. اما چون فونونها از نظر تعداد پایسته نیستند، پتانسیل شیمیایی باید مساوی با صفر قرار داده شود و توزیع فونونی خواهد شد

$$\bar{\nu}_n = \frac{1}{e^{\hbar \omega_n / k_B T} - 1} \quad (n = 1, \dots, N) \quad (10-75)$$

این رابطه، توزیع پلانک برای فوتونها (۱-۳۲) را به یاد می‌آورد. فوتونها کوانتای میدان الکترومغناطیسی هستند.

دو قسمت اول این کتاب عمدتاً با نظریه کوانتومی ذرات غیرنسبیتی سروکار داشت. فرض اینکه تمام تصحیحات نسبیتی می‌توانند از معادله‌های کلاسیکی‌شان نتیجه شوند نادرست است. به عنوان مثال، از جملات ساختار ریز نسبیتی در هیدرژن فقط جمله مربوط به تغییر جرم قابل اقتباس از یک شکل کلاسیکی است. جمله اسپین-مداری و جمله داروین هیچ‌همتای کلاسیکی ندارند. در حالی که ممکن است برهم‌کنش اسپین-مداری را با استفاده از مقایسه بین  $\hat{S}$  و  $\hat{L}$  توضیح داد، جمله داروین هیچگونه معادل کلاسیکی ندارد و یک بررسی کوانتومی نسبیتی را طلب می‌کند. در فصل ۱۱ خواهیم دید که هر سه جمله ساختار ریز مستقیماً از معادله دیراک برای الکترون نسبیتی نتیجه می‌شوند.

### مسائل

- ۱-۱۰ جابه‌جائی اولین خط بالمر در هیدروژن را وقتی که حرکت هسته‌ای در نظر گرفته می‌شود پیدا کنید. این جابه‌جایی را با تصحیحات ساختار ریز مقایسه کنید.
- ۲-۱۰ مجموعه‌ای از اتمهای هیدروژن را در یک جعبه بزرگ در نظر بگیرید که هر کدام به وسیله  $\psi = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \psi_i(\mathbf{r})$  مشخص می‌شوند. علاوه بر عوامل داخلی (به عنوان مثال، ساختار ریز، تصحیحات مربوط به جرم کاهش یافته، و غیره) آیا هیچ اثر کلاسیکی دیگری ناشی از انتقال، وجود دارد که بتواند روی طیف گسیلی اتمها تاثیر بگذارد؟ عبارتی برای این اثر بنویسید.
- ۳-۱۰ (الف) نشان دهید که وقتی یک جرم متحرک به یک جرم مشابه دیگری که در آغاز در حال سکون بوده است برخورد کند، جرم اول هرگز نمی‌تواند نسبت به امتداد اولیه‌اش، وقتی در دستگاه مقایسه آزمایشگاهی مشاهده شود، بیش از  $90^\circ$  منحرف شود (راهنمایی: از رابطه

$$\frac{\sin \theta}{\cos \theta + 1} = \tan \frac{\theta}{2}$$

استفاده کنید).

- (ب) با استفاده از معادله (۵-۱۰) و رابطه‌ای که بعد از (۸-۱۰) آمده است نشان دهید که مقطع موثرهای آزمایشگاهی و مرکز جرمی با رابطه

$$\sigma_{lab} = \left\{ \frac{[1 - (m/M)^2 + 2(m/M) \cos \theta_{c.m.}]^{3/2}}{1 + (m/M) \cos \theta_{c.m.}} \right\} \sigma_{c.m.}$$

به یکدیگر مربوط می‌شوند.

- ۴-۱۰ تابع وردشی برای اتم هلیوم که در معادله (۱۵-۱۰) داده شده است، می‌تواند به صورت

$$\Psi_{var}(1, 2) = \psi(1)\psi(2)$$

نوشته شود که در آن

$$\psi(r) = \left( \frac{Z'}{\pi a^3} \right)^{1/2} e^{-Z'r/a}$$



و "بار موثر" عبارت است از  $Z' = \frac{2}{10}$ .

(الف) چگالی بار در اطراف هسته را پیدا کنید. (راهنمایی: فرض کنید که چگالی الکترونی عبارت است از مجموع چگالیهای احتمال وابسته به هر تابع الکترونی).  
(ب) تحقیق کنید که پتانسیل الکتروستاتیکی در اطراف هسته عبارت است از

$$\phi(r) = 2e \left( \frac{1}{r} + \frac{Z'}{a} \right) e^{-2Z'r/a}$$

(راهنمایی: از معادله پواسن استفاده کنید)

۵-۱۰ (الف) نشان دهید که انرژی متوسط هر ذره یک گاز ایده‌آل فرمی در  $T = 0$  عبارت است از

$$\bar{\epsilon} = \frac{3}{5} \epsilon_F$$

(ب) نشان دهید که انرژی جنبشی کل گاز الکترونی اتمی، طبق مدل توماس-فرمی عبارت است از

$$T = \int \tau(r) d\mathbf{r} = \int \frac{\hbar^2 (3\pi^2)^{5/3}}{10m\pi^2} [\rho(r)]^{5/3} d\mathbf{r}$$

(ج) عبارتی برای انرژی کل اتم توماس-فرمی برحسب  $\rho(r)$  بنویسید.

۶-۱۰ با استفاده از معادله (۱۰-۳۶) و مقادیر نقایص کوانتومی داده شده در متن، طول موج خط زرد مشخصه سدیم را محاسبه کنید. این خط به وسیله الکترون ظرفیت درگذار  $3p \rightarrow 3s$  گسیل می‌شود.

۷-۱۰ یک اتم  $Z$  الکترونی که در آن هر الکترون به طور مستقل در یک پتانسیل الکتروستاتیکی پوشش شده  $V(r)$  حرکت می‌کند در نظر بگیرید.

(الف) نشان دهید که برای هر الکترون رابطه زیر برقرار است

$$[\hat{z}, \mathcal{H}] = \frac{i\hbar}{m} \hat{p}_z$$

$\mathcal{H} = (\hat{p}^2/2m) + V(r)$  هامیلتونی هر الکترون است.

(ب) با استفاده از نتیجه بالا نشان دهید که

$$(\epsilon_i - \epsilon_j) \langle \epsilon_j | \hat{z} | \epsilon_i \rangle = \frac{i\hbar}{m} \langle \epsilon_j | \hat{p}_z | \epsilon_i \rangle$$

( ج ) هر دو طرف را در  $z_{ji}$  ضرب کنید و روی  $j$  جمع بندی کنید، و با استفاده از قواعد ضرب ماتریسها نشان دهید که

$$\sum_{j=1}^{\infty} (\epsilon_i - \epsilon_j) |z_{ji}|^2 = \frac{i\hbar}{m} (2\hat{p}_z)_{ii}$$

یا ، با مزدوج کردن دو طرف ،

$$\sum_{j=1}^{\infty} (\epsilon_i - \epsilon_j) |z_{ji}|^2 = -\frac{i\hbar}{m} (\hat{p}_z)_{ii}$$

( د ) با جمع کردن معادلات فوق ، نشان دهید که

$$\sum_{j=1}^{\infty} (\epsilon_j - \epsilon_i) |z_{ji}|^2 = \frac{\hbar^2}{2m}$$

و

$$\sum_{i=1}^Z \sum_{j=1}^{\infty} (\epsilon_j - \epsilon_i) |r_{ji}|^2 = \frac{3\hbar^2}{2m} Z$$

که در آن

$$|r_{ji}|^2 = |x_{ji}|^2 + |y_{ji}|^2 + |z_{ji}|^2$$

نتیجه فوق به قاعده جمع نوسانگر موسوم است .

۸-۱۰ یک اتم هلیوم در نظر بگیرید که تابع حالت پایه  $(1S)^T$  عبارت است از

$$\Psi_{He}(1, 2) = \psi_{100}^A(1) \psi_{100}^A(2) \left\{ \frac{|\frac{1}{2}\rangle^{(1)} |-\frac{1}{2}\rangle^{(2)} - |\frac{1}{2}\rangle^{(2)} |-\frac{1}{2}\rangle^{(1)}}{\sqrt{2}} \right\}$$

$\psi^A$  از نظر شکل هیدروژنی است و نسبت به هسته A در نظر گرفته شده است .

( الف ) تابع کل سیستمی را که مرکب از اتم هلیوم فوق و یک اتم هیدروژنی در حالت پایه ، با هسته B ، است ، وقتی دو اتم دور از یکدیگر قرار دارند بنویسید .

( ب ) نشان دهید که وقتی دو اتم پهلوی هم آورده شوند ، تنها حالت با تقارن مناسب حالتی است که در آن اثرهای تبادلی ، دافعه ایجاد می‌کنند . به‌طور معادل ، نشان دهید که یک اتم هلیوم نمی‌تواند یک پیوند پایدار با هیدروژن تشکیل دهد . این

نتیجه را تعمیم دهید و نشان دهید که آثار تبادللی بین اتمهای گاز بی اثر منجر به دافعه می شوند .

۹-۱۰ در پیوند یونی مولکول  $\text{NaCl}$  ، الکترون ظرفیت اتم سدیم به اتم کلر منتقل می شود. یون  $\text{Na}^+$  شبیه به اتم نئون که به طور مثبت باردار شده است می باشد در صورتی که  $\text{Cl}^-$  کاملاً شبیه به اتم آرگون که به طور منفی باردار شده است می باشد . بر پایه نتایج مسئله ۸-۱۰ ویژگیهای دافعه و جاذبه پیوند یونی پایدار را توضیح دهید .  
۱۰-۱۰ یک پتانسیل مولکولی به شکل

$$U(R) = -\frac{A}{R} + \frac{B}{R^2}$$

در نظر بگیرید .

( الف ) محل تعادل و انرژی تجزیه مولکول را بر حسب  $A$  و  $B$  پیدا کنید .  
( ب ) با استفاده از (۴۷-۱۰) عبارتهای تقریبی برای طیفهای دورانی و ارتعاشی بر حسب  $A$  و  $B$  پیدا کنید .

۱۱-۱۰ نشان دهید که معادله (۵۶-۱۰) از معادله (۵۵-۱۰) نتیجه می شود .  
۱۲-۱۰ رابطه پاشندگی مناسب  $\omega = \omega(k)$  در شبکه یک بعدی را وقتی که بعد از نزدیکترین همسایه ها را شامل می شود پیدا کنید .  
۱۳-۱۰ عبارت انرژی کل یک شبکه مرتعش یک بعدی در دمای  $T$  را با فرض اینکه شبکه به وسیله یک گاز فونونی ایده آل نمایانده می شود بنویسید . گاز فونونی بوزونهای هستند که در  $T=0$  مار بوز - اینشتین ، با  $\mu = 0$  ، صدق می کنند .

### مراجع پیشنهادی

- Bethe, H. A., and Jackiw, R. W., "Intermediate Quantum Mechanics." 2nd ed. Benjamin, New York, 1968.  
Bethe, H. A., and Salpeter, E. E., "Quantum Mechanics of One and Two Electron Atoms." Springer-Verlag, Berlin, 1957.  
Borowitz, S., "Fundamentals of Quantum Mechanics." Benjamin, New York, 1967.  
Condon, E. U., and Shortley, G. H., "The Theory of Atomic Spectra." Cambridge Univ. Press, London and New York, 1963.  
Eisberg, R. M., "Fundamentals of Modern Physics," Chapter 13. Wiley, New York, 1961.  
Goldstein, H., "Classical Mechanics," Chapter 3. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1950.  
Heitler, W., "Elementary Wave Mechanics," 2nd ed. Oxford Univ. Press, London and New York, 1956.  
Stehle, P., "Quantum Mechanics." Holden-Day, San Francisco, 1966.



قسمت سوم

مکانیک کوانتومی نسبیتی و نظریه میدانها



# ۱۱

## مکانیک کوانتومی نسبیتی

در یک بحث دقیق نظریه کوانتومی نسبیتی از فرمولبندی هموردایی استفاده می‌شود که در آن تمام قوانین در یک فضای چهاربعدی که زمان به عنوان بعد چهارم آن به کار می‌رود، بیان می‌شوند. مزیت این صورتبندی در این است که متغیرهای زمانی و فضایی خود به خود به طور متقارن در نظر گرفته می‌شوند. هم چنین این اطمینان را می‌دهد که قوانین به دست آمده، تحت تبدیلات لورنتس<sup>۱</sup>، که بین مشاهده پذیرها از دید دوناظر که نسبت به یکدیگر با سرعت ثابت حرکت می‌کنند ارتباطی ایجاد می‌کنند، تغییرناپذیراند.

برای احتراز از پیچیدگیهای یک بررسی هموردا، تمام کمیت‌های نسبیتی در یک فضای سه بعدی معمولی بیان خواهند شد. نتایج به دست آمده در صورتی صحیح فرض می‌شوند که:

(الف) با همتهای کلاسیکی خود سازگار باشند،

(ب) نسبت به متغیرهای زمانی و فضایی متقارن باشند،

(ج) وقتی  $v \ll c$  باشد به نتایج نظریه شرودینگر منتهی شوند.

### ۱- معادله کلاین - گوردون

معادله حرکت شرودینگر می‌تواند با وارد کردن عملگر انرژی،  $\hat{E} = i\hbar \partial/\partial t$ ، به دست آید. از مساوی قرار دادن این عملگر با عملگرهای میلیتونی، خواهیم داشت

$$\hat{H}\Psi = \hat{E}\Psi = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right\} \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (1-11)$$

که همان نتیجه مطلوب است. از تامل در (۱-۱۱) آشکار می‌شود که معادله شرودینگر به عنوان یک معادله نسبیتی قابل قبول نیست زیرا از نظر فضائی مشتقات مرتبه دوم (یعنی  $\nabla^2$ ) ولی از نظر زمانی فقط مشتقات مرتبه اول را در بردارد. دو انتخاب داریم. یا معادله‌ای ایجاد کنیم که نسبت به زمان از مرتبه دوم باشد (معادله کلاین - گوردون) یا اینکه هامیلتونی را نسبت به عملگر تکانه خطی کنیم (معادله دیراک). هر دو انتخاب باید در حد غیرنسبیتی به معادله شرودینگر تقلیل پیدا کنند، و در مورد یک ذره در یک میدان الکترومغناطیسی، هر دو باید با رابطه کلاسیکی نسبیتی\*

$$c^2(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A})^2 + m^2c^4 = (\varepsilon - q\Phi)^2 \quad (11-2)$$

سازگار باشند.

با دنبال کردن روش کلاین و گوردون، جایگذاریهای

$$\varepsilon \rightarrow \hat{\varepsilon} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad \text{و} \quad \mathbf{p} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i} \nabla$$

را در (۱۱-۲) اعمال می‌کنیم و معادله KG را به شکل

$$\left\{ c^2 \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 + m^2 c^4 \right\} \Psi = \left\{ \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\Phi \right)^2 \right\} \Psi \quad (11-3)$$

به دست می‌آوریم.

این معادله ابتدا توسط خود شرودینگر در نظر گرفته شد، ولی به علت اینکه منجر به احتمالات منفی می‌شد از آن صرف نظر کرد. معادله KG با شرایط (الف) و (ب) مذکور در فوق سازگار است.

برای میدانهای الکتریکی و مغناطیسی ایستا داریم

$$\left( \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = \frac{\partial \Phi}{\partial t} = 0 \right)$$

و معادله کلاین - گوردون می‌شود

---

\* از  $m$  (به جای  $m_0$ ) برای جرم در حال سکون استفاده می‌کنیم. معادله (۲-۸۶) از فصل ۲ را به بینید.



$$\left\{ c^2 \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 + m^2 c^4 \right\} \Psi = \left\{ -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} - 2i\hbar q \Phi \frac{\partial}{\partial t} + q^2 \Phi^2 \right\} \Psi \quad (4-11)$$

بعداً نشان خواهیم داد که معادله KG وقتی  $v/c \rightarrow 0$ ، به معادله شرودینگر تقلیل پیدا می‌کند. یادآوری کنیم که، از نظر نسبیتی، انرژی کل  $\varepsilon$  ی یک سیستم شامل یک قسمت سکون  $mc^2$  است که باید در تابع حالت مکانیک کوانتومی منعکس شود، لذا بستگی به  $mc^2$  را با بیان تابع حالت به شکل

$$\Psi = e^{-imc^2 t/\hbar} \Psi_{\text{kin}} \quad (5-11)$$

جدا می‌کنیم. قسمت جنبشی  $\Psi_{\text{kin}}$  جمله‌ای است که باید با تابع حالت غیرنسبیتی شرودینگر مقایسه شود. با قراردادن (5-11) در (4-11)، معادله KG برای قسمت جنبشی به صورت زیر به دست می‌آید

$$\begin{aligned} \left\{ c^2 \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 + m^2 c^4 \right\} \Psi_{\text{kin}} &= \left\{ \left( -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} + 2i\hbar(mc^2 - q\Phi) \frac{\partial}{\partial t} \right) \right. \\ &\quad \left. - [q\Phi(2mc^2 - q\Phi) + m^2 c^4] \right\} \Psi_{\text{kin}} \\ \left\{ c^2 \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 \right\} \Psi_{\text{kin}} &= \left\{ -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} + 2i\hbar(mc^2 - q\Phi) \frac{\partial}{\partial t} \right. \\ &\quad \left. - q\Phi(2mc^2 - q\Phi) \right\} \Psi_{\text{kin}} \quad (6-11) \end{aligned}$$

اما، اگر ذره غیرنسبیتی باشد، انرژی سکون غالب است و جملاتی که در طرف راست (6-11) شامل  $mc^2$  نیستند می‌توانند حذف شوند. لذا برای  $v \ll c$  داریم

$$\left\{ \frac{(\hat{\mathbf{p}} - (q/c)\mathbf{A})^2}{2m} + q\Phi \right\} \Psi_{\text{kin}} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\text{kin}} \quad (7-11)$$

که تحت عنوان معادله شرودینگر شناخته خواهد شد. چون ویژگیهای اسپینی در معادله KG حضور ندارند این معادله حاکم بر رفتار بوزونهای بدون اسپین، به عنوان مثال، مزونهای  $\pi$ ، خواهد بود.

می‌توان فرض کرد که ویژه حالت‌های مانای یک ذره KG با زمان به صورت

$$\Psi = e^{-ieit/\hbar} \psi_i(\mathbf{r})$$

تحول پیدا می‌کنند. از قراردادن این عبارت در (۱۱-۴)، معادله ویژه مقدار انرژی KG به صورت

$$\left\{ c^2 \left( \hat{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 + m^2 c^4 \right\} \psi_i(\mathbf{r}) = (\epsilon_i - q\Phi)^2 \psi_i(\mathbf{r}) \quad (11-18)$$

به دست می‌آید. اگر (۱۱-۱۸) را در مورد یک الکترون هیدروژنی که در  $\mathbf{A} = 0$ ،  $q = -e$  و  $\Phi = e/r$  است به کار ببریم، می‌توانیم نشان دهیم که اثرات اسپینی ظاهر نمی‌شوند. چون این یک مسئله نیروی مرکزی است، (۱۱-۱۸) با به کارگیری

$$\psi_i = R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \phi)$$

تفکیک پذیر است. مثل مورد غیرنسبیتی، معادله شعاعی طیف انرژی اتم را تعیین می‌کند. بدون اثبات\* متذکر می‌شویم که  $R_{nl}$  فقط در صورتی در شرایط حالت مقید صدق می‌کند که انرژی توسط

$$\epsilon_{nl} = mc^2 \left[ 1 + \frac{\gamma^2}{\{n - (l + \frac{1}{2}) + [(l + \frac{1}{2})^2 - \gamma^2]^{1/2}\}^2} \right]^{-1/2} \quad (n = 1, 2, 3 \dots; \quad l = 0, 1, \dots, n-1) \quad (11-9)$$

که در آن  $\gamma = e^2/\hbar c = 1/137$  ثابت ساختار ریز است، داده شده باشد. در حد غیرنسبیتی\*\*، با استفاده از  $\gamma \ll 1$ ، ترازهای "هیدروژنی" خواهند شد

$$\epsilon_{nl} \simeq mc^2 \left\{ 1 - \frac{\gamma^2}{2n^2} - \frac{\gamma^4}{2n^4} \left( \frac{n}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right\} + (\text{جملاتی از مرتبه } \gamma^6) \quad (11-10)$$

\* به عنوان مثال به کتاب زیر مراجعه کنید

L.I. Schiff, "Quantum Mechanics," 3rd ed. P.470, McGraw-Hill, New York 1968.

\*\* در واقع می‌توان اثبات کرد که سرعت الکترون در اولین مدار بوهر برابر  $v = e^2/\hbar$  است. بنابراین رابطه  $\gamma = e^2/\hbar c = v/c = 1/137 \ll 1$  نشان می‌دهد که الکترون در یک حالت مقید هیدروژن به وضوح غیرنسبیتی است.

جمله اول دقیقاً "انرژی سکون ذره است . جمله بعدی عبارت است از

$$-\frac{mc^2\gamma^2}{2n^2} = \frac{\varepsilon_1}{n^2} = \varepsilon_n$$

که همان فرمول بوهر است . جملات آخر از ساختار ریز ناشی می‌شوند و به صورت زیر در می‌آیند

$$\varepsilon_{rs} = \varepsilon_n \frac{\gamma^2}{n} \left[ \frac{1}{(l + \frac{1}{2})} - \frac{3}{4n} \right] \quad (11-11)$$

از مقایسه این نتیجه با (۷-۵۱) می‌بینیم که (۱۱-۱۱) در صورتی صحیح خواهد بود که  $l$  ، به جای عدد صحیح ، عدد نیمه صحیح (یعنی ،  $l = j$  ) باشد ، مسلماً ، (۱۱-۱۱) معرف ساختار ریز بدون اسپین ، مثل مورد یک اتم مزونی (به عنوان مثال ، یک اتم هیدروژن که به جای الکترون آن یک مزون  $\pi$  نشسته است ) می‌باشد .

## ۲- معادله دیراک

دیراک در یک مقاله کلاسیک (۱۹۲۸) یک شق دیگری از معادله کلاین - گوردون را ارائه نمود . این معادله در حالی که تمام خواسته‌های نسبیتی را تأمین می‌کرد ، وجود یک اسپین ذاتی را در حد غیرنسبیتی نیز ایجاب می‌کرد . نه تنها این اسپین برابر با  $\frac{1}{2}$  بود ، بلکه جملات ساختار ریز که برای یک ذره دیراک در یک میدان کولنی به دست می‌آمدند با جملات مشاهده شده در طیف هیدروژن توافق داشتند . تردیدی نیست که الکترون نسبیتی ذره‌ای است که از معادله دیراک پیروی می‌کند . یعنی ، یک ذره دیراک است . دیراک شکل خطی معادله شرودینگر ، یعنی

$$\mathcal{H}\Psi = \mathcal{E}\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (11-12)$$

را انتخاب کرد . چون  $\mathcal{H}$  باید نسبت به  $\hat{p}$  خطی باشد ، دیراک شکل

$$\mathcal{H} = c\hat{\alpha} \cdot \hat{p} + \hat{\beta}m_0c^2 \quad (11-13)$$

را پیشنهاد کرد . ماهیت عملگرهای هرمیتی  $\hat{\alpha}$  و  $\hat{\beta}$  در زیر تعیین خواهد شد . با استفاده از

جایگذاریهای (جایگذاری "کمینه‌ای")

$$\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \quad \text{و} \quad \hat{\mathcal{E}} \rightarrow \hat{\mathcal{E}} - q\Phi \quad (11-14)$$

معادله حرکت دیراک (۱۱-۱۲) برای یک ذره در یک میدان الکترومغناطیسی خواهد شد

$$\left\{ c\hat{\alpha} \cdot \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) + \hat{\beta} m_0 c^2 \right\} \Psi = \left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\Phi \right\} \Psi \quad (11-15)$$

با "مجذور" کردن (تأثیر دادن مجدد عملگرها) طرفین (۱۱-۵) نتیجه می‌گیریم

$$\left\{ c\hat{\alpha} \cdot \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) + \hat{\beta} m c^2 \right\}^2 \Psi = \left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\Phi \right\}^2 \Psi \quad (11-16)$$

طرف راست همان طرف راست معادله KG است. طرف چپ در صورتی با (۱۱-۳) مطابقت می‌کند که اگر فقط اگر  $\hat{\alpha}$  و  $\hat{\beta}$  با  $\hat{\mathbf{p}}$  و  $\mathbf{r}$  جابه‌جاپذیر باشند و روابط زیر نیز برقرار باشند

$$[\hat{\alpha}_i, \hat{\alpha}_j]_+ = 2\delta_{ij}\hat{1}, \quad [\hat{\alpha}_i, \hat{\beta}]_+ = 0, \quad \text{و} \quad \hat{\beta}^2 = \hat{1} \quad (11-17)$$

این روابط جابه‌جایی تضمین می‌کنند که جملات ضربدری ناشی از "مجذور کردن" طرف چپ (۱۱-۱۶) حذف شوند.

ویژگیهای روابط جابه‌جایی عملگرهای  $\hat{\alpha}$  و  $\hat{\beta}$  کاملاً "شبه به روابط جابه‌جایی ماتریسهای پاولی هستند". این شباهت پیشنهاد می‌کند که ماتریسهای  $4 \times 4$  زیر را بسازیم

$$\hat{\alpha}_i = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_i \\ \hat{\sigma}_i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{و} \quad \hat{\beta} = \begin{pmatrix} \hat{1} & 0 \\ 0 & -\hat{1} \end{pmatrix} \quad (11-18)$$

که در آن  $\hat{\sigma}_i$  ها ماتریسهای هستند  $2 \times 2$  که به وسیله (۶-۷) داده شده‌اند. معادلات (۱۱-۱۸) مخفف ماتریسهای زیراند

$$\hat{\alpha}_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\alpha}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (11-19)$$

$$\hat{\alpha}_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\beta} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

جایگذاری مستقیم محقق می‌دارد که این ماتریسها واقعا" در روابط جابه‌جائی (۱۱-۱۷) صدق می‌کنند\*. بنابراین معادله دیراک (۱۱-۱۵) می‌تواند به‌عنوان یک معادله دیفرانسیل ماتریسی  $4 \times 4$  برای تابع حالت چهار مولفه‌ای (اسپینور)

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi^{(1)} \\ \Psi^{(2)} \\ \Psi^{(3)} \\ \Psi^{(4)} \end{pmatrix} \quad (11-20)$$

در نظر گرفته شود. یا به‌طور معادل، این معادله می‌تواند به‌عنوان مجموعه‌ای از چهار معادله دیفرانسیل جفت شده برای مولفه‌های  $\Psi$  در نظر گرفته شود. ویژه حالت‌های مانای انرژی با در نظر گرفتن

$$\Psi = e^{-iEt/\hbar} \psi(\mathbf{r})$$

به دست می‌آیند که وقتی در (۱۱-۱۵) قرار داده شود معادله ویژه مقداری انرژی دیراک را به صورت زیر به دست می‌دهد

$$\left\{ c \hat{\alpha} \cdot \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) + q\Phi + \hat{\beta} mc^2 \right\} \psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}) \quad (11-21)$$

فرض می‌کنیم که  $A$  و  $\Phi$  معرف میدانهای ایستا هستند.

### ۳- ذرات آزاد دیراک

معادله (ویژه مقداری انرژی) دیراک برای یک ذره آزاد ( $A = \Phi = 0$ ) عبارت است از

$$\left\{ c \frac{\hbar}{i} \hat{\alpha} \cdot \nabla + \hat{\beta} mc^2 \right\} \psi_p = \varepsilon_p \psi_p \quad (11-22)$$

در مقایسه با مورد غیرنسبیتی، فرض می‌کنیم که جواب، یک ویژه تابع تکانه به شکل زیر است

$$\psi_p = |u_p\rangle e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar} \quad (11-23)$$

---

\* این نمایش بخصوص برای  $\hat{\alpha}$  و  $\hat{\beta}$ ، هرچند یکتا نیست، ولی اغلب مورد استفاده قرار می‌گیرد.

که دامنه آن اسپینور چهار مولفه‌ای

$$|u_p\rangle = \begin{pmatrix} u_p^{(1)} \\ u_p^{(2)} \\ u_p^{(3)} \\ u_p^{(4)} \end{pmatrix}$$

است. با قراردادن (۱۱-۲۳) در (۱۱-۲۲) معادله ویژه مقداری ماتریسی  $4 \times 4$

$$\{c\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\alpha} + \beta mc^2\} |u_p\rangle = \varepsilon_p |u_p\rangle \quad (11-24)$$

به دست می‌آید. نشان دادن اینکه ویژه مقدارهای (۱۱-۲۴) عبارتند از

$$\varepsilon_p^+ = (c^2 p^2 + m^2 c^4)^{1/2} \quad \text{و} \quad \varepsilon_p^- = -(c^2 p^2 + m^2 c^4)^{1/2} \quad (11-25)$$

به عنوان یک تمرین واگذار می‌شود (رک مسئله ۱-۳). در زیر نشان خواهیم داد که حالت‌های انرژی منفی نباید به عنوان زاید و نامربوط کنار گذاشته شوند. نتیجه می‌شود که ویژه‌بردارها برای انرژی مثبت عبارتند از

$$|u_{p\uparrow}^+\rangle = N_p \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{cp_z}{\varepsilon_p^+ + mc^2} \\ \frac{c(p_x + ip_y)}{\varepsilon_p^+ + mc^2} \end{pmatrix} \quad \text{و} \quad |u_{p\downarrow}^+\rangle = N_p \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{c(p_x - ip_y)}{\varepsilon_p^+ + mc^2} \\ \frac{-cp_z}{\varepsilon_p^+ + mc^2} \end{pmatrix} \quad (11-26 \text{ الف})$$

که در آن  $N_p$  یک ثابت بهنجارش است. "پیکانها" برای تمایز بین دو حالت انرژی مثبت به کار می‌روند و، همان‌طور که خواهیم دید، جهت اسپین (بالا یا پائین) ذره دیراک را نشان می‌دهند. حالت‌های انرژی منفی دارای دامنه‌هایی به صورت زیراند

$$|u_{p\uparrow}^-\rangle = N_p \begin{pmatrix} \frac{-cp_z}{-\varepsilon_p^- + mc^2} \\ \frac{-c(p_x + ip_y)}{-\varepsilon_p^- + mc^2} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{و} \quad |u_{p\downarrow}^-\rangle = N_p \begin{pmatrix} \frac{-c(p_x - ip_y)}{-\varepsilon_p^- + mc^2} \\ \frac{cp_z}{-\varepsilon_p^- + mc^2} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (11-26 \text{ ب})$$

هر چهار اسپینور فوق می‌توانند بر طبق  $\langle u_p | u_p \rangle = 1$  ، با قرارداد

$$N_p = \left[ \frac{\varepsilon_p^+ + mc^2}{2\varepsilon_p^+} \right]^{+1/2}$$

به‌هم‌نگار شوند . حالت کل به‌وسیله تگانه  $\bar{A}$  ،  $p$  ، اسپین (بالا یا پائین)  $\bar{A}$  ، و نوع انرژی (مثبت یا منفی)  $\bar{A}$  ، مشخص می‌شود . به‌عنوان مثال ، یک ذره که در امتداد محور  $z$  با انرژی منفی و اسپین بالا حرکت می‌کند ، به‌وسیله

$$\psi_{p\uparrow}^- = |u_{p\uparrow}^- \rangle e^{ip_z z/\hbar} = N_p \begin{pmatrix} \frac{-cp_z}{-\varepsilon_p^- + mc^2} \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{ip_z z/\hbar}$$

با انرژی

$$\varepsilon_p = \varepsilon_p^- = -(p_z^2 c^2 + m^2 c^4)^{1/2}$$

نشان داده می‌شود .

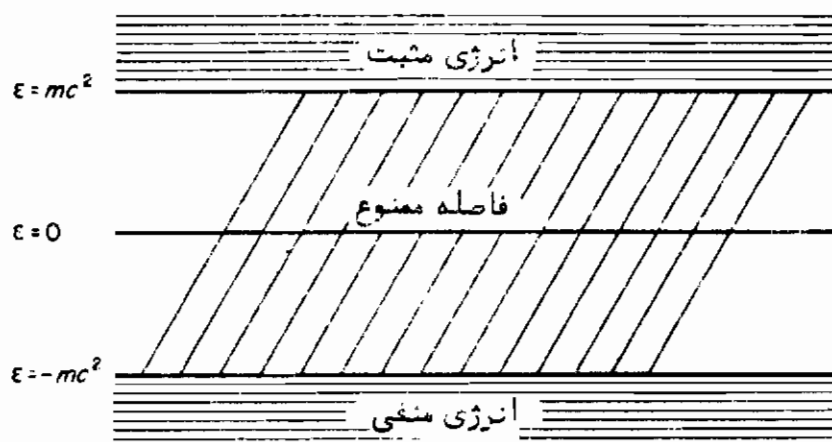
اثبات اینکه برای حالت‌های انرژی مثبت ، دو مولفه پائین (۱۱-۲۶ الف) نسبت به دو مولفه بالائی از مرتبه  $v/c$  هستند به‌عنوان یک تمرین واگذار می‌شود (رک مسئله ۱۱-۵) . بنابراین ، در حد غیرنسبیتی ، مولفه‌های پائین کوچک‌اند و می‌توانند نادیده گرفته شوند . وقتی  $v/c \rightarrow 0$  ، ویژه تابع‌های انرژی مثبت متناظر با حالت‌های غیرنسبیتی ذره‌اند ، و بنابر این ویژگی‌های این حالت‌ها به‌وسیله دو مولفه بالائی (۱۱-۲۶ الف) تعیین می‌شوند. در حد غیرنسبیتی ، تابع حالت‌های نسبیتی (۱۱-۲۶ الف) به‌اسپینورهای مولفه‌ای  $\psi_{p\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{ip \cdot r/\hbar}$  و  $\psi_{p\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{ip \cdot r/\hbar}$  تقلیل می‌یابند که به‌ترتیب معرف یک ذره آزاد با اسپین  $\frac{1}{2}$  در جهت "بالا" و در جهت "پائین" می‌باشند .

#### ۴- حالت‌های انرژی منفی

همان‌طور که در بالا ذکر شد ، حالت‌های انرژی منفی نمی‌توانند به‌عنوان جواب‌های نامربوط کنار گذاشته شوند؛ در زیر نشان می‌دهیم که این حالت‌ها معنی فیزیکی دارند. طیف ذره آزاد پیوسته است و از  $-\infty$  تا  $+\infty$  ، به‌جز برای یک فاصله ممنوع  $-mc^2 < \varepsilon < mc^2$  ،

گسترده است. (شکل ۱۱-۱).

دیراک پیشنهاد کرد که در طبیعت بینهایت الکترون - بیش از آنچه که برای پرکردن حالت‌های انرژی منفی لازم باشد - وجود دارد. اصل پاولی جمعیت هر حالت یک ذره آزاد را به یک الکترون محدود می‌کند. حالت‌های انرژی منفی یک چگالی بار یکنواختی در همه‌جای فضا ایجاد می‌کند. قانون گاوس ایجاب می‌کند که میدان در مرکز یک کره که به‌طور یکنواخت باردار شده است، صفر باشد. چون شعاع این کره می‌تواند به سمت بینهایت میل کند، و هر نقطه از فضا می‌تواند به‌عنوان مرکز کره در نظر گرفته شود، به‌این نتیجه می‌رسیم که یک توزیع بار با چگالی یکنواخت در یک گستره نامحدود هیچ میدان قابل مشاهده‌ای ایجاد نمی‌کند. حالتی که در آن دقیقاً آنقدر الکترون وجود دارد که ترازهای منفی را پر کنند حالت خلاء نامیده می‌شود. هر ذره اضافی باید در حالت‌های انرژی مثبت قرار گیرد و به‌عنوان الکترون مشاهده می‌شود.



شکل (۱۱-۱) دیاگرام تراز انرژی برای ذرات آزاد دیراک.

از حالت خلاء شروع می‌کنیم. با جذب یک فوتون باید برانگیختن یک الکترون با انرژی منفی به تراز مثبت امکان‌پذیر باشد. جای خالی یا "حفره" به‌جای مانده این الکترون یکنواختی در فضای فرمی را از بین می‌برد. میدان ایجاد شده به‌وسیله این حفره معادل با میدانی است که یک ذره با بار مخالف بار الکترون ایجاد می‌کند. این حفره به‌صورت یک الکترون مثبت - یک پوزیترون - که پاد ذره الکترون است مشاهده می‌شود. فرایندی که در آن یک فوتون جذب می‌شود و یک جفت الکترون - پوزیترون از خلاء به‌وجود می‌آید "آفرینش جفت" نامیده می‌شود. کمترین انرژی لازم فوتون عبارت است از

$$mc^2 - (-mc^2) = 2mc^2 = \hbar\omega \simeq 1 \text{ MeV}$$



فوتونی با این انرژی متناظر با یک کوانتای اشعه  $\gamma$  است. اثبات اینکه ممکن نیست وقتی یک فوتون اشعه  $\gamma$  از بین می‌رود و یک جفت الکترون - پوزیترون به وجود می‌آید هم تکانه و هم انرژی هردو پایسته باشند، به عنوان تمرین به خواننده واگذار می‌شود. چون هم تکانه و هم انرژی، هردو، باید پایسته باشند، این فرایند تنها در حضور یک میدان خارجی مثل میدان یک هسته اتمی، که مقداری از تکانه را جذب می‌کند، رخ می‌دهد. فرایند معکوس (نابودی جفت) وقتی رخ می‌دهد که الکترون بازگشت کند و حفره را پر نماید، و بدین وسیله یک جفت فوتون اشعه  $\gamma$  آزاد می‌کند. چون دو فوتون در این فرایند گسیل می‌شود، انرژی و تکانه می‌توانند به طور همزمان، بدون نیاز به هیچ جرم اضافی مثل هسته، پایسته بمانند. توجه کنیم که این تعبیر حالت‌های انرژی منفی نمی‌تواند به ذرات کلاین - گوردون اعمال شود زیرا آنها بوزون‌هایی هستند که از اصل طرد پاولی پیروی نمی‌کنند.

#### ۵ - یک ذره دیراک در یک میدان ایستا

معادله ویژه مقداری انرژی دیراک (۱۱-۱۲) برای یک ذره در یک میدان الکتریکی ایستا (الکتروستاتیک) ( $E = -\nabla\Phi$ ) و یک میدان مغناطیسی ایستا (ماگنتوستاتیک) ( $B = \nabla \times A$ ) عبارت است از

$$\left\{ c \left( \hat{p} - \frac{q}{c} A \right) \cdot \hat{\alpha} + \beta mc^2 + q\Phi \right\} \psi_i = \varepsilon_i \psi_i \quad (11-27)$$

که در آن

$$\psi_i = \begin{pmatrix} \psi_i^{(1)} \\ \psi_i^{(2)} \\ \psi_i^{(3)} \\ \psi_i^{(4)} \end{pmatrix}$$

معادله (۱۱-۲۷) معادل است با دو معادله جفت شده:

$$\left\{ c \left( \hat{p} - \frac{q}{c} A \right) \cdot \hat{\alpha} \right\} \psi_i^{(B)} + (mc^2 + q\Phi) \psi_i^{(A)} = \varepsilon_i \psi_i^{(A)} \quad (11-28)$$

$$\left\{ c \left( \hat{p} - \frac{q}{c} A \right) \cdot \hat{\alpha} \right\} \psi_i^{(A)} - (mc^2 - q\Phi) \psi_i^{(B)} = \varepsilon_i \psi_i^{(B)}$$

که در آنها

$$\psi_i^{(A)} = \begin{pmatrix} \psi_i^{(1)} \\ \psi_i^{(2)} \end{pmatrix} \quad \text{و} \quad \psi_i^{(B)} = \begin{pmatrix} \psi_i^{(3)} \\ \psi_i^{(4)} \end{pmatrix}$$

مولفه‌های بالائی و پائینی ویژه تابع چهارمولفه‌ای دیراک هستند. برای تفکیک این معادلات نخست دومی را حل می‌کنیم و نتیجه می‌گیریم

$$\psi_i^{(B)} = \left\{ \frac{c(\hat{p} - (q/c) A) \cdot \hat{\sigma}}{\varepsilon_i - q\Phi + mc^2} \right\} \psi_i^{(A)} \quad (29-11)$$

با قرار دادن این نتیجه در معادله اول خواهیم داشت

$$c^2 \left\{ \left( \hat{p} - \frac{q}{c} A \right) \cdot \hat{\sigma} (\varepsilon_i - q\Phi + mc^2)^{-1} \left( \hat{p} - \frac{q}{c} A \right) \cdot \hat{\sigma} \right\} \psi_i^{(A)} + (mc^2 + q\Phi) \psi_i^{(A)} = \varepsilon_i \psi_i^{(A)} \quad (30-11)$$

در حد غیرنسبیتی،  $\psi^{(B)}$  در مقابل  $\psi^{(A)}$  قابل صرف نظر کردن است؛ در حد  $v/c \rightarrow 0$  رفتار این ذره کلا "به وسیله (30-11) تعیین می‌شود. به علاوه، در حد غیرنسبیتی، انرژی غیر نسبیتی کل  $\varepsilon'_i = \varepsilon_i - mc^2$  و انرژی پتانسیل  $q\Phi$  خیلی کوچکتر از انرژی سکون هستند. می‌توان بسط زیر را انجام داد

$$(\varepsilon_i - q\Phi + mc^2)^{-1} = (\varepsilon'_i - q\Phi + 2mc^2)^{-1} \approx \frac{1}{2mc^2} \left[ 1 - \frac{\varepsilon'_i - q\Phi}{2mc^2} + \dots \right] \quad (31-11)$$

در حد نهائی غیرنسبیتی، فقط جمله اول طرف راست (31-11) را نگه می‌داریم و (30-11) می‌شود

$$\left\{ \frac{[(\hat{p} - (q/c) A) \cdot \hat{\sigma}]^2}{2m} + q\Phi \right\} \psi_i^{(A)} = \varepsilon'_i \psi_i^{(A)} \quad (32-11)$$

برای نشان دادن اینکه چگونه اسپین به صورت یک نتیجه طبیعی معادله دیراک در حد غیر-نسبیتی حاصل می‌شود، (31-11) را با وارد کردن اتحادهای عملگری زیر ساده می‌کنیم\*

\* توجه کنید که حاصل ضرب برداری دو عملگر یکسان در (ب) صفر نیست. این بدان علت است که مولفه‌های  $\hat{p}$  و  $A$  جابجاپذیر نیستند.

(الف)

$$(\hat{\sigma} \cdot \hat{U})(\hat{\sigma} \cdot \hat{V}) = \hat{U} \cdot \hat{V} + i\hat{\sigma} \cdot (\hat{U} \times \hat{V})$$

$$[\hat{\sigma}, \hat{U}] = [\hat{\sigma}, \hat{V}] = 0$$

(۱۱-۳۳ الف)

و (ب)

$$\left(\hat{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A}\right) \times \left(\hat{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A}\right) = \frac{iq\hbar}{c} \nabla \times \mathbf{A} = \frac{iq\hbar}{c} \mathbf{B} \quad \left(\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla\right)$$

(۱۱-۳۳ ب)

با قراردادن  $\hat{U} = \hat{V} = \hat{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A}$ ، (۱۱-۳۲) خواهد شد

$$\left\{ \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A}\right)^2 - \frac{q}{mc} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} + q\Phi \right\} \psi_i^{(\Lambda)} = \varepsilon_i' \psi_i^{(\Lambda)} \quad (۱۱-۳۴)$$

که در آن  $\hat{S} = \frac{1}{2}\hbar\hat{\sigma}$ .

معادله (۱۱-۳۴) با معادله ویژه مقدار انرژی غیرنسبیتی شرودینگر با تعمیم پاولی، یکسان است. جمله اول هامیلتونی طرف چپ (۱۱-۳۴) شامل انرژی جنبشی و برهم کنش مداری با میدان  $\mathbf{B}$  است. جملات دوم و سوم به ترتیب برهم کنشهای اسپین - مغناطیسی و الکتروستاتیکی هستند.

بنابراین، در حد غیرنسبیتی، یک ذره دیراک دارای ویژگیهای اسپین - مغناطیسی است. قابل توجه است که این جنبه، که از ملاحظات نسبیتی نشأت گرفته است، در حد  $v/c \rightarrow 0$  محفوظ می ماند. همچنین توجه کنیم که گشتاور دو قطبی اسپینی در (۱۱-۳۴) به طور صحیحی به صورت

$$\mu_s = \frac{g_s q \hat{S}}{2mc} = \frac{q \hat{S}}{mc}$$

داده می شود، در این رابطه ضریب ژیرومغناطیسی برابر است با  $g = 2$ ، مقداری که به طور تجربی برای الکترون مشاهده شده است.

جالب توجه است که تصحیحات نسبیتی مهم در (۱۱-۳۵) را در موردی که  $\mathbf{A} = 0$  است و  $q\Phi = V(r)$  یک پتانسیل نیروی مرکزی است، در نظر بگیریم. این وضعیت، وقتی قرار دهیم  $V = -e^2/r$ ، متناظر با یک الکترون هیدروژنی است. با بردن (۱۱-۳۱) در (۱۱-۳۵)، نتیجه می گیریم

$$\left\{ \left[ \frac{\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} (1 - [\varepsilon_i' - V(r)]/2mc^2)}{2m} \right] + V(r) \right\} \psi_i^{(\Lambda)} = \varepsilon_i' \psi_i^{(\Lambda)} \quad (۱۱-۳۵)$$

در این مورد  $T = \varepsilon_i' - V(r) = \hat{p}^2/2m$  انرژی جنبشی غیرنسبیتی ذره است. با استفاده از اتحادهای (۱۱-۳۳) و خواص عملگرهای  $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$  و  $\hat{\mathbf{p}} = (\hbar/i)\nabla$  اتحاد زیر می‌تواند برقرار گردد

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \left[ 1 - \frac{(\varepsilon_i' - V)}{2mc^2} \right] (\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \\ &= \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2} - \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} \nabla V \cdot \nabla + \frac{\hbar}{4m^2c^2} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \nabla V \times \hat{\mathbf{p}} \quad (۱۱-۳۶) \end{aligned}$$

با استفاده از این رابطه و توجه به اینکه برای میدانهای مرکزی داریم

$$\nabla V = \frac{dV}{dr} \frac{\mathbf{r}}{r}$$

(۱۱-۳۵)، بعد از جمع و جور کردن جملات، می‌شود

$$\begin{aligned} & \left\{ \left( \frac{\hat{p}^2}{2m} + V \right) - \frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2} + \frac{\hbar}{4m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}) - \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} \frac{dV}{dr} \frac{\partial}{\partial r} \right\} \psi_i^{(\Lambda)} \\ &= \varepsilon_i' \psi_i^{(\Lambda)} \quad (۱۱-۳۷) \end{aligned}$$

دوجمله اول طرف چپ نمایشگرها میل‌تونی غیرنسبیتی هستند، جمله سوم جمله مربوط به تغییر جرم است که تصحیحات نسبیتی برجسته انرژی جنبشی را تأمین می‌کند. جمله چهارم می‌تواند به صورت

$$\Delta E_{\text{اسپین - مدار}} = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$$

یا در مورد هیدروژن به صورت

$$\Delta E_{\text{اسپین - مدار}} = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{e^2}{r^3} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$$

نوشته شود. این جمله مانند جمله به دست آمده در (۳۵-۶) جمله برهم کنش اسپین - مدار نامیده می شود، و در آن ضریب تقدیمی توماس  $\frac{1}{4}$  به طور طبیعی ظاهر شده است. جمله پنجم جمله داروین است که اشاره به بحثمان از ساختار ریز در فصل ۷ دارد. در هیدروژن، جمله داروین تصحیحات مرتبه اول انرژی را فقط در حالت های  $s$  ( $l=0$ ) ایجاد می کند. این تصحیحات به وسیله

$$\Delta E(\text{داروین}) \propto \langle n, l | \frac{dV}{dr} \frac{\partial}{\partial r} | n, l \rangle \rightarrow \int_0^\infty R_{nl} \frac{dV}{dr} \frac{dR_{nl}}{dr} r^2 dr$$

داده می شوند. برای هیدروژن ( $V = -e^2/r$ ) این رابطه خواهد شد

$$\begin{aligned} \Delta E(\text{داروین}) &\propto e^2 \int_0^\infty R_{nl} \frac{1}{r^2} \frac{dR_{nl}}{dr} r^2 dr \\ &= e^2 \int_0^\infty R_{nl} dR_{nl} = \frac{1}{2} e^2 \left| R_{nl}^2 \right|_0^\infty \end{aligned}$$

یادآوری کنیم که  $R_{nl}$  در بینهایت، برای تمام حالت های مقید، صفر می شود. چون این تابع در مبداء نیز برای تمام حالت ها به استثنای حالت های  $s$  صفر می شود، تصحیحات انرژی فقط برای این حالت ها وجود دارد.

بنابراین اثرات ساختار ریز در هیدروژن آثارنسبیتی مرتبه اول معادله دیراک هستند. در نتیجه می توانیم یک ذره دیراک را یک الکترون نسبیتی بدانیم.

#### ۶- ذره دیراک در یک پتانسیل کولنی - ساختار ریز در هیدروژن

می توان انرژی ساختار ریز الکترون هیدروژنی را با اعمال نظریه پیرشیدگی مرتبه اول به سه جمله ساختار ریز در (۳۷-۱۱)، محاسبه کرد. اما در مورد خاص یک پتانسیل کولنی حل دقیق معادله دیراک امکان پذیر است. ویژه مقدارهای دقیق انرژی می توانند بهر حساب توانهای ثابت ساختار ریز بیان شوند، و جملات عمده نگه داشته شوند. چون این روش بسیار پیچیده است، ما فقط خلاصه مراحل کار را بیان می کنیم و نتایج را فهرست می کنیم. معادله دیراک (۳۷-۱۱) برای پتانسیل کولنی عبارت است از

$$\left\{ c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2 - \frac{e^2}{r} \right\} \psi_i = \varepsilon_i \psi_i \quad (۳۸-۱۱)$$

گرچه به نظر می‌رسد که (۱۱-۳۸) معرف یک مسئله نیروی مرکزی است، اما نمی‌توان با به کار بردن  $R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta, \phi)$  متغیرها را از هم تفکیک کرد، زیرا خود معادله جفت شدگی اسپین-مدار را در بر دارد و  $L_z$  پایسته نیست. به طور معادل،  $m_l$  یک عدد کوانتومی "خوب" نیست. برای انجام یک تفکیک، دو دسته جواب زیر را وارد می‌کنیم

$$\psi_{uj \pm m_j} = \begin{pmatrix} u(r) \left[ \frac{l \pm m_j + \frac{1}{2}}{2l+1} \right]^{1/2} Y_{l, m_j - \frac{1}{2}} \\ \mp u(r) \left[ \frac{l \mp m_j + \frac{1}{2}}{2l+1} \right]^{1/2} Y_{l, m_j + \frac{1}{2}} \\ - iv(r) \left[ \frac{(l \pm 1) \mp (m_j \mp \frac{1}{2})}{(2l+1) \pm 2} \right]^{1/2} Y_{l \pm 1, m_j - \frac{1}{2}} \\ \mp iv(r) \left[ \frac{(l \pm 1) \pm (m_j \pm \frac{1}{2})}{(2l+1) \pm 2} \right]^{1/2} Y_{l \pm 1, m_j + \frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad (11-39)$$

که در آن  $j = l \pm \frac{1}{2}$  و  $|m_j| \leq j$ ، با بیان (۱۱-۳۸) در مختصات کروی و قراردادن (۱۱-۳۹) در آن، به معادلات زیر برای قسمت‌های شعاعی  $u(r)$  و  $v(r)$  هدایت می‌شویم

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar c} \left\{ \varepsilon_i + \frac{e^2}{r} + mc^2 \right\} v &= \frac{du}{dr} + \frac{(1+k)u}{r} \\ \frac{1}{\hbar c} \left\{ \varepsilon_i + \frac{e^2}{r} - mc^2 \right\} u &= -\frac{dv}{dr} - \frac{(1-k)v}{r} \end{aligned} \quad (11-40)$$

که در آنها

$$\begin{aligned} k &= -(l+1) \quad (\text{برای } \psi_{j+}) \\ k &= l \quad (\text{برای } \psi_{j-}) \end{aligned}$$

این معادلات به روشی مشابه با روش به کار برده شده در معادلات شعاعی غیرنسبیتی مورد بررسی قرار می‌گیرند. شرایط حالت مقید\* روی  $u$  و  $v$  در صورتی می‌توانند برقرار شوند که

\* برای جزئیات به یکی از دو مرجع زیر مراجعه کنید

L.I.Schiff, "Quantum Mechanics." 3rd ed. P.485, Mc

Graw-Hill, New York, 1968.

H.A.Bethe and E.E.salpeter, "Quantum Mechanics of one and two Electron Atomes," P. 65, Springer-verlag, Berlin, 1957.

اگر و تنها اگر  $\varepsilon_i$  به مقادیر زیر محدود شود

$$\varepsilon_i = \varepsilon_{n'k} = mc^2 \left\{ 1 + \frac{\gamma^2}{[(k^2 - \gamma^2)^{1/2} + n']^2} \right\}^{-1/2}, \quad \left( \gamma = \frac{e^2}{\hbar c} \right) \quad (41-11)$$

که در آن  $n' = 0, 1, 2, \dots$ . این نتیجه دقیق است و انرژیهای کوانتیده یک الکترون نسبیتی هیدروژنی را به دست می دهد. چون  $\gamma^2 \simeq (\frac{1}{137})^2 \simeq 10^{-4}$ ، می توانیم (41-11) را بر حسب توانهای  $\gamma^2$  بسط دهیم. جملات عمده عبارتند از

$$\varepsilon_i \simeq mc^2 \left[ 1 - \frac{\gamma^2}{2n^2} - \frac{\gamma^4}{2n^4} \left( \frac{n}{|k|} - \frac{3}{4} \right) + \dots \right] \quad (42-11)$$

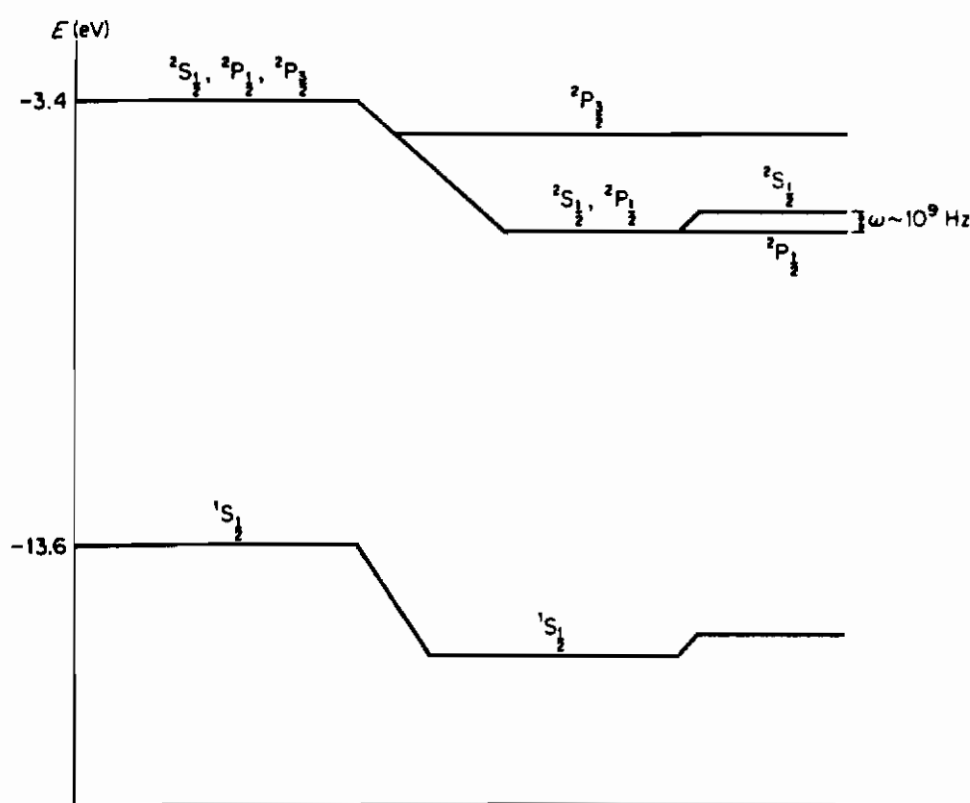
که در آن  $n = n' + |k| = 1, 2, 3, \dots$ . به خاطر داریم که  $|k| = l + 1$  — برای  $j = l + \frac{1}{2}$  و  $|k| = l$  برای  $j = l - \frac{1}{2}$ ، در نتیجه برای هر کدام از این دو مورد داریم  $|k| = j + \frac{1}{2}$  به طوری که (42-11) می تواند به صورت زیر بیان شود

$$\begin{aligned} \varepsilon_{n,j} &= mc^2 - \frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} - \frac{\gamma^2 me^4}{2\hbar^2 n^3} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \\ &= mc^2 + \varepsilon_n + \frac{\gamma^2 \varepsilon_n}{n} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \end{aligned} \quad (43-11)$$

این جملات به ترتیب عبارتند از انرژی سکون، انرژی "بوهر" و انرژی ساختار ریز، که در (۷-۵۱) داده شده اند. جمله آخر با داده های طیف نمایی مشاهده شده در هیدرژن مطابقت می کند.

جملات ساختار ریز در هیدرژن آن طور که توسط (43-11) داده شده اند تصحیحاتی به دست می دهند که نسبت به ترازهای الکتروستاتیکی بوهر از مرتبه  $10^{-4}$  هستند. عوامل اضافی دیگری وجود دارند که تصحیحاتی خیلی کوچکتر از تصحیحات ناشی از ساختار ریز به وجود می آورند. به عنوان مثال، پروتون، که دارای گشتاور دوقطبی مغناطیسی اسپینی مخصوص به خود است، می تواند با دوقطبی وابسته به اسپین الکترونی برهم کنش کند. این برهم کنشها ساختار فوق ریز را در طیف هیدرژن به وجود می آورند. هم چنین، الکترون هیدروژنی فقط در خارج پروتون تحت تاثیر یک پتانسیل کولنی قرار می گیرد. در داخل پروتون ( $r < 10^{-13}$  cm)، پتانسیل قطعا "به صورت  $1/r$  نیست. این انحراف یک جابه جایی خیلی کوچکی در طیف انرژی هیدروژنی ایجاد می کند. سومین عامل مهم مربوط به برهم کنش

بین یک الکترون و تابش در خلا<sup>۲</sup> است. در غیاب تابش خارجی، مقادیر متوسط  $E$  و  $B$ ، همان طور که انتظار می رود، صفراند. اما، افت و خیزهای غیر صفر یا عدم قطعیت های میدان کوانتیده هنوز با الکترون برهم کنش می کنند و یک ضریب اسپینی غیر عادی  $g$ ، یعنی،  $g_s \simeq 2.00232$  به وجود می آورند. این اثر که مسئول جابه جایی کوچک در طیف هیدروژنی است، جابه جایی لمب<sup>۱</sup> نامیده می شود و جدائی مختصری بین ترازهای  $^2S_{1/2}$  و  $^2P_{1/2}$  در هیدروژن ایجاد می کند (شکل ۱۱-۲). افت و خیزهای میدان تابشی کوانتیده مسئول گذارهای خود به خود در غیاب میدانهای مشاهده پذیر  $E$  و  $B$  نیز هستند.



جابه جایی لمب + ساختار ریز + انرژی الکتروستاتیک

شکل (۱۱-۲) - سهم های ساختار ریز و جابه جایی لمب در طیف انرژی هیدروژن. جدایی انرژیهای الکتروستاتیک، ساختار ریز و جابه جایی لمب به نسبت های ۱،  $10^{-4}$  و  $10^{-5}$  هستند.

کوانتش میدان الکترومغناطیسی نه تنها سازگاری با اصل عدم قطعیت هایزنبرگ را تأمین می کند، بلکه مفهوم فوتون به عنوان یک کوانتای میدان را نیز توجیه می کند.



علاقه‌مندان به مسئله عمومی کوانتس را به فصل ۱۲ ارجاع می‌دهیم .  
 در حالی که به نظر می‌رسد معادله دیراک بر رفتار کوانتومی الکترون نسبیتی حاکم است ، جوابهای آن از نظر فیزیکی همیشه آشکار نیستند . از یک نظر مفهوم مکان و سرعت یک ذره دیراک تا اندازه‌ای مبهم باقی می‌ماند . در واقع ، یک تحلیل دقیق معادله دیراک نشان می‌دهد که یک ذره دیراک که در یک جهت معین حرکت می‌کند عملاً " دو حرکت با هم انجام می‌دهد . حرکت اول یک انتقال مکان متوسط ذره در جهت حرکت کلاسیکی است . حرکت دوم یک حرکت نامنظم است ، که عبارت است از نوسان بسا فرکانس زیاد ( $\omega \simeq 2mc^2/\hbar = 2 \times 10^{21}$  Hz) ذره حول مرکز متوسط آن . فرکانس نوسانی این حرکت " لرزشی " بسیار بسیار بالاتر از آن است که بتواند مستقیماً مشاهده شود . جمله " افت و خیز " داروین در انرژی ساختار ریز می‌تواند ، به طور فیزیکی ، برپایه حرکت " لرزشی " الکترون توضیح داده شود\* .

---

\* به عنوان مثال به کتاب زیر مراجعه کنید .

J.D. Bjorken and S.D. Drell, "Relativistic Quantum Mechanics," P.52, Mc Graw-Hill, New York, 1964.

### مسائل

- ۱-۱۱ نشان دهید که روابط جابه‌جائی (۱۷-۱۱) تضمین می‌کنند که معادلات دیراک وکلاین-گوردون با یکدیگر سازگارند .
- ۲-۱۱ نشان دهید که ماتریسهای دیراک (۱۹-۱۱) در (۱۷-۱۱) صدق می‌کنند .
- ۳-۱۱ معادله ویژه مقداری ماتریسی (۲۴-۱۱) را بنویسید و حل کنید . تحقیق کنید که ویژه بردارها و ویژه مقدارها دقیقاً به وسیله (۲۵-۱۱) و (۲۶-۱۱) داده می‌شوند .
- ۴-۱۱ تحقیق کنید که ویژه اسپینورهای ذره آزاد در (۲۶-۱۱) بهنجار شده به یک هستند ،  
 $\langle u|u \rangle = 1$
- ۵-۱۱ نشان دهید که درحد غیرنسبیتی، دمولفه پائینی (۲۶-۱۱ الف)  $v/c$  برابر مولفه‌های بالائی هستند .
- ۶-۱۱ نشان دهید که واکنش  $\gamma \rightarrow e^+ + e^-$  (آفرینش جفت) نمی‌تواند هم انرژی و هم تکانه را در خلأ پایسته نگه دارد .
- ۷-۱۱ اتحادهای داده شده در (۳۳-۱۱) و (۳۶-۱۱) را به دست آورید .
- ۸-۱۱ (الف) نشان دهید که اگر چگالی احتمال وابسته به اسپینور دیراک  $\rho = \Psi^\dagger \Psi$  باشد، جریان احتمال به وسیله

$$\mathbf{J} = c\Psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \Psi$$

- داده می‌شود (راهنمایی: معادله (۱۵-۱۱) را به شکل  $\nabla \cdot \mathbf{J} + (\partial \rho / \partial t) = 0$  درآورید)
- (ب) یک ذره آزاد دیراک با انرژی مثبت، که در جهت مثبت محور  $z$  با تکانه  $p$  حرکت می‌کند در نظر بگیرید . با استفاده از تعریف  $\mathbf{J}$  در بالا، سرعت جریان احتمال را پیدا کنید . نتیجه را توضیح دهید .
- ۹-۱۱ با استفاده از نظریه پیرشیدگی مرتبه اول، جابه‌جائی انرژی حالت پایه هیدروژن را در صورتی که پروتون را به صورت کره‌ای با شعاع  $10^{-13} \text{ cm}$  که به طور یکنواخت بسازدار شده است در نظر بگیریم، محاسبه کنید .

### مراجع پیشنهادی

Berestetskii, V. B., Lifshitz, E. M., and Pitaevskii, L. P., "Relativistic Quantum Theory." Addison-Wesley, Reading Massachusetts, 1971.

Bethe, H. A., and Salpeter, E. E., "Quantum Mechanics of One and Two Electron Atoms." Springer-Verlag, Berlin, 1957.

Bjorken, J. D., and Drell, S. D., "Relativistic Quantum Mechanics." McGraw-Hill, New York, 1964.

Messiah, A., "Quantum Mechanics," Volume II. Wiley, New York, 1962.

Schiff, L. I., "Quantum Mechanics," 3rd ed. McGraw-Hill, New York, 1968.



# ۱۲

## نظریه میدان کوانتومی

یک میدان کلاسیکی از نظر ریاضی به وسیله یک تابع  $\psi(x, t)$  که حالت میدان را در نقطه  $x$  و زمان  $t$  مشخص می‌کند نشان داده می‌شود. به عنوان مثال،  $\psi$  می‌تواند نمایانگر افت و خیز چگالی وابسته به یک موج صوتی در هوا یا تغییر مکان یک نقطه از یک تار مرتعش باشد. این میدانها اساساً دانه‌ای هستند زیرا معرف حرکات ذرات می‌باشند. نمایش میدانی اغلب اوقات مسئله چندجسمی را ساده می‌کند. به عنوان مثال، امواج عرضی یک تار کشیده شده در معادله موج یک بعدی

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = 0 \quad (12-1)$$

صدق می‌کند که در آن  $y(x, t)$  جابه‌جایی تار و  $v = \left( \frac{\text{تension}}{\text{چگالی خطی}} \right)^{1/2}$  سرعت فاز امواج

در امتداد تار است. بررسی این یک معادله میدان از  $10^{23} \sim$  معادله حرکت مولکولهای انفرادی تار ساده‌تر است، تقریب یک سیستم چندجسمی میکروسکوپیکی به وسیله یک میدان کلاسیکی وقتی که ویژگیهای ماکروسکوپیکی مورد نظر باشند مفید است. از طرف دیگر میدان الکترومغناطیسی اساساً یک میدان غیردانه‌ای است و از نظر دینامیکی معادل با یک مسئله چندجسمی شامل بینهایت ذره است.

معادله (12-1) اصولاً یک فرمولبندی نیوتنی از دینامیک محیطهای پیوسته است. نظریه کوانتومی میدانها باید براساس یک صورتبندی لاگرانژی - هامیلتونی بندادی توسعه یابد. ما یک نظریه بندادی را با در نظر گرفتن گذار از یک زنجیر کشان گسسته به یک تار

پیوسته هموار گسترش خواهیم داد .

### ۱- نظریه کلاسیکی میدانها

لاگرانژی وابسته به ارتعاشات عرضی یک زنجیرکشسان خطی  $N$  - ذره ای عبارت است از\*

$$L = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m \dot{y}_i^2 - \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} K (y_{i+1} - y_i)^2 \quad (12-2)$$

که  $m$  جرم هر ذره ،  $K$  ثابت کشسانی هر فنر و  $y_i$  جابه جایی عرضی جرم نقطه ای  $i$  ام است . حرف  $a$  را برای نشان دادن فاصله دو جرم متوالی در حال تعادل (ثابت شبکه ای) به کار خواهیم برد و در نتیجه  $Na$  طول کل زنجیر خواهد بود . گذار از زنجیر گسسته به پیوسته ، با برداشتن نیمی از هر جرم و انتقال آن به اندازه  $a/2$  به سمت راست ، شروع می شود . با تکرار این عمل در بینهایت بار ، زنجیری با یک توزیع جرمی پیوسته ایجاد می کنیم . به علاوه در هر "نیمه سازی" ثابت شبکه ، ثابت کشسانی هر فنر دوبرابر می شود . بدین ترتیب ، به روابط ریاضی زیر هدایت می شویم

$$\lim_{a \rightarrow 0} \sum a \rightarrow \int dx$$

$$\lim_{a \rightarrow 0} \frac{m}{a} \rightarrow \frac{dm}{dx} = \mu = \text{چگالی جرمی خطی}$$

$$\lim_{\substack{a \rightarrow 0 \\ K \rightarrow \infty}} Ka \rightarrow \tau = \text{کشش کشسانی}$$

شکل حدی لاگرانژی (۱۲-۲) عبارت است از

$$L = \lim_{a \rightarrow 0} \sum a \left\{ \frac{1}{2} \frac{m}{a} \dot{y}_i^2 - \frac{1}{2} Ka \left( \frac{y_{i+1} - y_i}{a} \right)^2 \right\} \rightarrow \int dx \left\{ \frac{1}{2} \mu \dot{y}^2 - \frac{1}{2} \tau y'^2 \right\} \quad (12-3)$$

که در آن  $\dot{y} = \partial y / \partial t$  و  $y' = \partial y / \partial x$  . معادله (۱۲-۳) می تواند به صورت  $L = \int \mathcal{L}(\dot{y}, y') dx$  نوشته می شود که  $\mathcal{L}$  چگالی لاگرانژی (بر واحد طول) است و بر حسب چگالیهای انرژی جنبشی

\* در این فصل  $L$  و  $H$  را به عنوان لاگرانژی و هامیلتونی به کار خواهیم برد و از  $\mathcal{L}$  و  $\mathcal{H}$  برای نمایش دادن چگالیهای آنها استفاده خواهیم کرد .

و انرژی پتانسیل به صورت  $\mathcal{L} = \mathcal{T} - \mathcal{V}$  ، با  $\mathcal{T} = \frac{1}{2}\mu\dot{y}^2$  و  $\mathcal{V} = \frac{1}{2}\tau y'^2$  ، است .  
 چگالی لاگرانژی تابعی از سرعت میدان ،  $\dot{y}(x, t)$  ، و مختصه میدان ،  $y(x, t)$  (و احتمالاً " مشتق آن  $y'$  ) است . باید تأکید کرد که  $x$  ، که نمایانگر نقطه‌ای است که در آن میدان در نظر گرفته شده است ، یک مختصه میدان نیست ، بلکه صرفاً " متغیری است که از شاخص پائینی  $i$  در (۱۲-۳) سرچشمه می‌گیرد . اکنون باید تعیین کنیم چگونه معادله حرکت برای میدان ، (۱۲-۱) ، از  $\mathcal{L}$  به دست می‌آید . تعمیم به سه بعدی (۱۲-۳) با رفتن از تابع میدان  $y(x, t)$  به  $\psi(\mathbf{r}, t)$  حاصل می‌شود که  $\psi$  یک میدان نرده‌ای است ، لاگرانژی این میدان دارای شکل عمومی زیر است

$$L = \int \mathcal{L}(\psi, \psi, \nabla\psi) d\mathbf{r} = \int \mathcal{L}\left(\psi, \psi, \frac{\partial\psi}{\partial x}, \frac{\partial\psi}{\partial y}, \frac{\partial\psi}{\partial z}\right) d\mathbf{r}$$

مشتق "تابعی" یا "وردشی"  $L$  نسبت به  $\psi$  را به صورت

$$\frac{\delta L}{\delta\psi} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi} - \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial\psi/\partial x_i)} \quad (x_1 = x, \quad x_2 = y, \quad x_3 = z) \quad (۱۲-۴)$$

تعریف می‌کنیم . به طور مشابه مشتق نسبت به سرعت میدان (۱۲-۴) ،  $\delta L/\delta\dot{\psi}$  ، با جانشین کردن  $\psi$  به وسیله  $\dot{\psi}$  به دست می‌آید . با استفاده از این تعریف مشتق ، بدون اثبات بیان می‌کنیم که معادله حرکت برای میدان می‌تواند از طرحواره آشنای\* فصل ۲ به صورت

$$\frac{d}{dt} \frac{\delta L}{\delta\dot{\psi}} - \frac{\delta L}{\delta\psi} = 0 \quad (۱۲-۵)$$

به دست آید . این معادلات ، معادلات لاگرانژی برای یک میدان هستند . با اعمال (۱۲-۵) به چگالی لاگرانژی تار ، (۱۲-۳) ، خواهیم داشت\*\*

\* مشتق نسبت به زمان به صورت زیر محاسبه می‌شود

$$\frac{d}{dt} \frac{\delta L}{\delta\dot{\psi}} = \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\psi}} - \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial\dot{\psi}/\partial x_i)} \right\}$$

\*\* چون  $\dot{y}' = 0$  در  $\mathcal{L}$  وارد نمی‌شود می‌توانیم قرار دهیم  $\partial\mathcal{L}/\partial\dot{y}' = 0$

$$\frac{\delta L}{\delta y} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y'} = \tau \frac{\partial^2 y}{\partial x^2}$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\delta L}{\delta \dot{y}} = \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{y}} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{y}'} \right) = \mu \frac{\partial^2 y}{\partial t^2}$$

به‌طوری که از (۱۲-۵) نتیجه می‌شود

$$\mu \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} - \tau \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = 0$$

که همان شکلی است که (۱۲-۱) ایجاب می‌کند.

برای یک میدان برداری  $\psi(x, t)$ ، برای هر مولفه  $\psi_i$ ، به‌شرط اینکه این مولفه‌ها مستقل باشند، یک معادله میدان به‌شکل (۱۲-۵) به‌دست می‌آوریم.

## ۲- چگالی هامیلتونی

هامیلتونی یک میدان می‌تواند برحسب چگالی آن به‌صورت  $H = \int \mathcal{H} d\mathbf{r}$  بیان شود. چگالی  $\mathcal{H}$  تابعی است از مختصات میدانی،  $\psi_i$ ، و چگالی‌های تکانه مزدوج بندادی آنها که به‌صورت زیر تعریف شده‌اند

$$\pi_i = \frac{\delta L}{\delta \dot{\psi}_i} \quad (12-6)$$

با انجام یک تبدیل لوژاندر، شبیه به (۱۲-۵)، خواهیم داشت

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^3 \dot{\psi}_i \pi_i - \mathcal{L} \quad (12-7)$$

مسلم است که  $\mathcal{H}$  باید به‌صورت تابعی از  $\pi_i$ ،  $\psi_i$  و  $\nabla \psi_i$  بیان شود ولی نمی‌تواند شامل  $\dot{\psi}_i$  باشد. با استفاده از تعریف (۱۲-۴)، معادلات هامیلتون یک میدان به‌صورت

$$\frac{\delta H}{\delta \pi_j} = \dot{\psi}_j \quad \text{و} \quad \frac{\delta H}{\delta \psi_j} = -\dot{\pi}_j \quad (12-8)$$

به‌دست می‌آیند. این معادلات هم‌ارز با معادلات لاگرانژی میدان می‌باشند. به‌ویژه، می‌توان نشان داد که چگالی هامیلتونی یک تار به‌شکل



$$\mathcal{H} = \frac{\pi_y^2}{2\mu} + \frac{\tau y'^2}{2} \quad (9-12)$$

است. این تابع از لحاظ عددی با چگالی انرژی وابسته به تار مرتعش برابر است، از اعمال معادلات هامیلتون (۸-۱۲) به (۹-۱۲) نتیجه می‌شود

$$\dot{y} = \frac{\pi_y}{\mu} \quad \text{و} \quad \dot{\pi}_y = \tau y''$$

که پس از ترکیب با یکدیگر خواهند داد  $\mu \ddot{y} - \tau y'' = 0$ . این نتیجه، همان‌طور که انتظار می‌رفت، با (۱-۱۲) یکی است.

### ۳- کوانتش میدان

کوانتش یک میدان به این ترتیب انجام می‌گیرد که نخست متغیرهای بندادی میدان به وسیله عملگرهای هرمیتی

$$\pi_j \rightarrow \hat{\pi}_j \quad \text{و} \quad \psi_j \rightarrow \hat{\psi}_j$$

جایگزین می‌شوند و سپس روابط جابه‌جایی بین مختصات و تکانه‌های میدان، با مشابهت با روابط وابسته به یک سیستم ذرات، به صورت زیر وضع می‌شود

$$[\hat{\pi}_j(\mathbf{r}'), \hat{\pi}_k(\mathbf{r})] = [\hat{\psi}_j(\mathbf{r}'), \hat{\psi}_k(\mathbf{r})] = 0$$

$$(10-12)$$

$$[\hat{\psi}_j(\mathbf{r}'), \hat{\pi}_k(\mathbf{r})] = i\hbar \delta_{jk} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

این روابط جابه‌جایی ایجاب می‌کنند که اندازه‌گیریهای همزمان دو مختصه یا دو تکانه متفاوت میدان می‌توانند با دقت کامل در یک زمان انجام گیرند. از طرف دیگر، اندازه‌گیریهای همزمان و دقیق  $\hat{\psi}_j$  و  $\hat{\pi}_j$  نمی‌توانند در یک نقطه از فضا انجام پذیرند. در بعضی موارد (به عنوان مثال، میدانهای نسبیتی) اثرات تاخیری مهم اند. در این صورت روابط جابه‌جایی (۱۰-۱۲) باید به اندازه‌گیریهایی اشاره داشته باشند که در زمانهای متفاوت انجام می‌شوند. اما، (۱۰-۱۲) به طور مناسبی راه عمومی کوانتش را روشن می‌کند. هامیلتونی میدان به وسیله عملگر هرمیتی

$$\hat{H}_{\text{field}} = \int \mathcal{H}(\hat{\pi}_j, \hat{\psi}_j, \nabla \hat{\psi}_j) d\mathbf{r}$$

نشان داده می‌شود. ویژه حالت‌های انرژی  $\hat{H}_{\text{field}}$  حالت‌های مانای میدان کوانتیده را تعیین می‌کنند. به‌طور معادل، ویژه‌بردارها و ویژه مقدارهای معادله

$$\hat{H}_{\text{field}}|\text{field}\rangle = \varepsilon_{\text{field}}|\text{field}\rangle$$

را جستجو می‌کنیم. چون  $\hat{H}$  یک مشاهده‌پذیر مناسبی برای میدان نیست، این معادله ویژه مقداری نمی‌تواند در زبان دیفرانسیلی مکانیک موجی فرمولبندی شود.

#### ۴- الکترودینامیک کلاسیکی

به‌طور مضحکی، یکی از مشکل‌ترین میدان‌های کلاسیکی برای کوانتش، میدان وابسته به تابش الکترومغناطیسی است. چون میدان تابشی طبیعتاً "نسبیتی" است، باید در اعمال روابط جابه‌جایی دقت کافی مبذول شود. همان‌طور که خواهیم دید، مولفه‌های  $E$  و  $B$  وابسته به میدان الکترومغناطیسی مستقل نیستند. بنابراین قبل از اعمال کوانتش لازم است که آنها را به مختصات میدان مستقل تقلیل داد. سیستمی از ذرات باردار را در حضور میدان‌های الکترومغناطیسی در نظر بگیریم معادلات حرکت نیوتنی\* ذرات به وسیله قانون نیروی لورنتس، یعنی،

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i = q\mathbf{E}_i + \frac{q}{c} \mathbf{v}_i \times \mathbf{B}_i \quad (11-12)$$

داده می‌شوند که در آن  $E_i$  و  $B_i$  میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی در محل ذره  $i$  ام هستند. معادلات این میدان‌ها توسط معادلات ماکسول به صورت زیر داده می‌شوند

$$(1) \quad \nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho$$

$$(2) \quad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

$$(3) \quad \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \dot{\mathbf{B}} \quad (12-12)$$

$$(4) \quad \nabla \times \mathbf{B} = \frac{1}{c} \dot{\mathbf{E}} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{J}$$

---

\* در آنچه به دنبال می‌آید فرض می‌کنیم ذرات غیرنسبیتی هستند.

چگالیهای بار و جریان به وسیله روابط زیر به مختصات ذرات ارتباط پیدا می کنند

$$\rho = \sum_i q \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \quad \text{و} \quad \mathbf{J} = \sum_i q \mathbf{v}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \quad (12-13)$$

ساختن یک لاگرانژی بر حسب  $\mathbf{E}$  و  $\mathbf{B}$  به عنوان مختصات میدان، بیهوده است زیرا این میدانها مستقل نیستند. شش مولفه ( $\mathbf{E}$  و  $\mathbf{B}$ ) می توانند با استفاده از معادلات دوم و سوم ماکسول به چهار مولفه تقلیل یابند. معادله دوم،  $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ ، ایجاب می کند که  $\mathbf{B}$  مشتق از یک پتانسیل برداری به صورت

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (12-14)$$

باشد. معادله سوم می تواند به صورت

$$\nabla \times \left( \mathbf{E} + \frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}} \right) = 0$$

نوشته شود که به ما اجازه می دهد یک پتانسیل نردهای  $\Phi$  به گونه ای تعریف کنیم که داشته باشیم

$$\mathbf{E} + \frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}} = -\nabla \Phi \quad \text{یا} \quad \mathbf{E} = -\nabla \Phi - \frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}} \quad (12-15)$$

سه مولفه  $\mathbf{A}$  همراه با  $\Phi$  چهار مولفه میدان را نمایش می دهند، گرچه این چهار مولفه هنوز کاملاً مستقل نیستند، تقلیل نهائی را بعد از اینکه لاگرانژی و هامیلتونی ساخته شدند انجام می دهیم. معادلات حرکت (12-11) و (12-12) اکنون می توانند با بیان  $\mathbf{E}$  و  $\mathbf{B}$  بر حسب  $\mathbf{A}$  و  $\Phi$  نوشته شوند.

لاگرانژی کل سیستم الکترو دینامیکی می تواند به صورت

$$L = \int (\mathcal{L}_{\text{part}} + \mathcal{L}_{\text{rad}} + \mathcal{L}_{\text{int}}) d\mathbf{r} \quad (12-16)$$

نوشته شود، که در آن

$$\mathcal{L}_{\text{part}} = \sum_i \frac{1}{2} m \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) v_i^2$$

$$\mathcal{L}_{\text{rad}} = \frac{\left( -\nabla \Phi - \frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}} \right)^2 - (\nabla \times \mathbf{A})^2}{8\pi} = \frac{E^2 - B^2}{8\pi}$$

$$\mathcal{L}_{\text{int}} = -\rho \Phi + \frac{\mathbf{J} \cdot \mathbf{A}}{c}$$

و  $\rho$  و  $J$  توسط (۱۲-۱۳) داده می‌شوند. تحقیق اینکه اعمال معادلات لاگرانژ به (۱۲-۱۶) هم قانون نیروی لورنتس برای ذرات و هم معادلات ماکسول برای میدانها را دوباره ایجاد می‌کند کاری است طولانی ولی سرراست\*.

چگالی تکانه مزدوج با  $A$ ، با استفاده از (۱۲-۱۶)، عبارت است از

$$\Pi = \frac{\delta L}{\delta \dot{A}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}} = \frac{1}{4\pi c} \left( -\nabla\Phi - \frac{1}{c} \dot{A} \right) = \frac{E}{4\pi c} \quad (12-17)$$

چون  $\Phi$  در  $\mathcal{L}$  ظاهر نمی‌شود، چگالی تکانه مزدوج با آن صفر است. تبدیل لوژاندر برای ساختن  $H$  سرراست است و نتیجه آن عبارت است از

$$H = \int \left\{ \frac{1}{8\pi} (E^2 + B^2) + \frac{E \cdot \nabla\Phi}{4\pi} \right\} + \left\{ \sum_i \left[ \frac{(p_i - (q/c) A)^2}{2m} + q\Phi \right] \delta(r - r_i) \right\} dr \quad (12-18)$$

که در آن  $E = 4\pi c \Pi$  و  $B = \nabla \times A$ .

مشاهده می‌شود که  $A$  و  $\Phi$  فقط تا آنجا فیزیکی هستند که  $E$  و  $B$  بتوانند از آنها به دست آیند. بخصوص، تبدیل پیمانه‌ای

$$A \rightarrow A + \nabla\chi, \quad \Phi \rightarrow \Phi - \frac{\dot{\chi}}{c}$$

که در آن  $\chi$  یک نرده‌ای دلخواه است، میدانهای  $E$  و  $B$  در (۱۲-۱۴) و (۱۲-۱۵) رادست نخورده می‌گذارد (مسئله ۱۲-۳). این مطلب می‌تواند با جایگذاری مستقیم، و با توجه به اینکه تاو گرادیان هر تابع  $\chi$  صفر است، مشاهده شود. بنابراین، این آزادی را داریم که  $A$  و  $\Phi$  را با یک انتخاب مناسب  $\chi$  محدود کنیم. پیمانه لورنتس که در آن محدودیت  $\nabla \cdot A = \Phi/c$  را قائل می‌شویم، برای یک فرمولبندی که از نظرنسبیتی هموردا باشد مناسب است، اما به پیچیدگیهای زیادی در نظریه کوانتومی منجر می‌شود. یک پیمانه ساده‌تر برای مقاصد ما پیمانه تابشی است که در آن

$$\nabla \cdot A = 0 \quad (12-19)$$

\* به عنوان مثال به کتاب زیر مراجعه کنید

H. Goldstein, " Classical Mechanics", Chapter 11.

Addison-wesley, Reading, Massachusetts, 1950.

با انتخاب این پیمانه، هموردائی آشکار را به خاطر سادگی قربانی می‌کنیم، مع ذالک نتایج معتبر باقی می‌مانند.

با قراردادن (۱۲-۱۵) در اولین معادله ماکسول خواهیم داشت

$$\nabla^2 \Phi + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \cdot \mathbf{A}) = -4\pi\rho$$

یا، با استفاده از (۱۲-۱۹)،

$$\nabla^2 \Phi = -4\pi\rho \quad (\text{معادله پواسن}) \quad (۱۲-۲۰)$$

جواب (۱۲-۲۰) به وسیله قانون کولن، یعنی،

$$\Phi = \int \frac{\rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \int \frac{\sum_i q_i \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_i) d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

داده می‌شود. به همین جهت پیمانه تابشی اغلب اوقات پیمانه کولنی نامیده می‌شود. در این پیمانه،  $\Phi$  به وسیله مکانهای لحظه‌ای ذرات باردار تعیین می‌شود و در غیاب آنها صفر است. در زیر خواهیم دید که  $\Phi$  یک مختصه میدان تابشی در پیمانه تابشی نیست. هر میدان برداری همیشه می‌تواند به یک قسمت طولی (غیرچرخشی) و یک قسمت عرضی (سیملولهای)، به صورت زیر تجزیه شود

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_L + \mathbf{A}_T \quad (۱۲-۲۱ \text{ الف})$$

این دو قسمت با ویژگیهای زیر تعریف می‌شوند

$$\nabla \cdot \mathbf{A}_T = 0, \quad \nabla \times \mathbf{A}_L = 0 \quad (۱۲-۲۱ \text{ ب})$$

در پیمانه تابشی (۱۲-۱۹)، نتیجه می‌شود که  $\mathbf{A}$  کاملاً "عرضی" است، پیمانه تابشی پیمانه عرضی نیز نامیده می‌شود. از معادله دوم ماکسول،  $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ ، نتیجه می‌شود که  $\mathbf{B}$  همیشه، بدون توجه به پیمانه، عرضی است. میدان الکتریکی، از (۱۲-۱۷)، عبارت است از

$$\mathbf{E} = 4\pi c \mathbf{\Pi} = -\nabla \Phi - \frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}}$$

نتیجه می‌شود

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_L + \mathbf{E}_T$$

که در آن

$$\mathbf{E}_L = -\nabla\Phi = 4\pi c\Pi_L \quad \text{و} \quad \mathbf{E}_T = -\frac{1}{c}\dot{\mathbf{A}} = 4\pi c\Pi_T \quad (۱۲-۲۲)$$

این تجزیه  $\mathbf{E}$  در (۱۲-۲۲) در پیمانه تابشی معتبر است زیرا تنها در این صورت  $\dot{\mathbf{A}}$  عرضی خواهد بود. از (۱۲-۲۲) نتیجه خواهیم گرفت

$$E^2 = E_T^2 + E_L^2 + 2\mathbf{E}_T \cdot \mathbf{E}_L = E_T^2 + E_L^2 - 2\mathbf{E}_T \cdot \nabla\Phi$$

و

$$\dot{\mathbf{E}} \cdot \nabla\Phi = \mathbf{E}_T \cdot \nabla\Phi + \mathbf{E}_L \cdot \nabla\Phi = \mathbf{E}_T \cdot \nabla\Phi - E_L^2$$

با استفاده از این روابط، هامیلتونی (۱۲-۱۸) خواهد شد

$$H = \int \left\{ \frac{1}{8\pi} (E_T^2 + B^2) + \frac{\mathbf{E} \cdot \nabla\Phi}{8\pi} - \frac{\mathbf{E}_T \cdot \nabla\Phi}{8\pi} \right\} + \left\{ \sum_i \left[ \frac{(\mathbf{p}_i - (q/c)\mathbf{A})^2}{2m} + q\Phi \right] \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \right\} d\mathbf{r} \quad (۱۲-۲۳)$$

با انتگرال‌گیری به‌روش جزء به‌جزء، و نادیده گرفتن جمله سطحی که برای یک میدان فیزیکی در بینهایت صفر می‌شود، و با استفاده از

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho = 4\pi \sum_i q \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$$

خواهیم داشت

$$\int \frac{\mathbf{E} \cdot \nabla\Phi}{8\pi} d\mathbf{r} = -\frac{1}{2} \int \frac{\nabla \cdot \mathbf{E}}{4\pi} \Phi d\mathbf{r} = -\frac{1}{2} \int \sum q \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \Phi d\mathbf{r}$$

و

$$\int \mathbf{E}_T \cdot \nabla\Phi d\mathbf{r} = - \int \Phi \nabla \cdot \mathbf{E}_T d\mathbf{r} = 0$$

با قراردادن این تساوی در (۱۲-۲۳) و با استفاده از ویژگیهای تابع دلتا، هامیلتونی الکترودینامیکی خواهد شد

$$H = \int \frac{1}{8\pi} (E_T^2 + B^2) d\mathbf{r} + \sum_i \left[ \frac{(p_i - (q/c) A_i)^2}{2m} + \frac{1}{2} q \Phi_i \right]$$

با استفاده از قانون کولن برای  $\Phi_i$ ، هامیلتونی الکترودینامیکی شکل نهائی

$$H = H_{\text{rad}} + H_{\text{part}} + H_{\text{int}}$$

را به‌خود می‌گیرد، که در آن

$$\begin{aligned} H_{\text{rad}} &= \int \frac{1}{8\pi} (E_T^2 + B^2) d\mathbf{r} = \int \frac{1}{8\pi} [(4\pi c \Pi_T)^2 + (\nabla \times \mathbf{A})^2] d\mathbf{r} \\ H_{\text{part}} &= \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \frac{q^2}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|} \\ H_{\text{int}} &= \sum_i \left[ -\frac{q}{mc} \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{A}_i + \frac{q^2}{2mc^2} A_i^2 \right] \end{aligned} \quad (12-24)$$

در پیمانه تابشی،  $E_L$  و  $\Phi$  در هامیلتونی تابش‌آزاد وارد نمی‌شوند، بلکه در برهم‌کنشهای کولنی الکتروستاتیکی بین ذرات شرکت می‌کنند. متأسفانه، جمله کولنی در (۱۲-۲۴) انرژیهای خودی ذرات را در بر دارد. این اشکال از آنجا ناشی می‌شود که فرض کرده‌ایم ذرات نقطه‌ای هستند. در عمل، اگر بارها از نظر تعداد پایسته باشند، این انرژی خودی تغییر نمی‌کند و نمی‌تواند روی دینامیک ذرات تاثیر بگذارد، بنابراین در برهم‌کنشهای کولنی از جمله‌هایی که در آنها  $i=j$  است صرف‌نظر می‌کنیم.

میدان تابشی فقط مولفه‌های عرضی را دخالت می‌دهد. سپس کوانتش این میدان تابشی آزاد، یعنی، وضعیتی را که در آن هیچ ذره‌ای حضور ندارد ( $q = p_i = 0$ )، بررسی می‌کنیم.

## ۵- هم‌ارزی بین تابش آزاد و نوسانگرها

در حالی که ممکن است  $H_{\text{rad}}$  در (۱۲-۲۴) را مستقیماً "کوانتیده کرد، بهتر است که نخست میدان تابش آزاد را به‌صورت یک سری فوریه بسط دهیم. این کار از ابهامات وابسته به‌اثرات تاخیری در روابط جابه‌جایی میدانها جلوگیری می‌کند. فرض می‌کنیم که تابش در یک جعبه بزرگ به‌حجم  $\mathcal{V}$  محبوس است و مدهای مشخصه کاواک را که امواج تختی به‌شکل

$$u_{\mathbf{k}\lambda} = \frac{(4\pi)^{1/2} c}{\sqrt{\mathcal{V}}} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (12-25)$$

هستند، اختیار می‌کند. هر مد به وسیله یک بردار موج  $\mathbf{k}$  و یک شاخص قطبش  $\lambda$  مشخص می‌شود. بردار قطبش طولی  $\mathbf{e}_k$  بردار واحدی در جهت  $\mathbf{k}$  است، در حالی که بردارهای عرضی  $\mathbf{e}_{k,1}$  و  $\mathbf{e}_{k,2}$  بر یکدیگر و بر  $\mathbf{k}$  عموداند. این مدهای میدان دارای ویژگی تعامدزیراند

$$\int_V \mathbf{u}_{k\lambda}^* \cdot \mathbf{u}_{k'\lambda'} d\mathbf{r} = 4\pi c^2 \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\lambda\lambda'} \quad (12-26)$$

حالت عمومی تابش داخل کاواک به وسیله برهم‌نهی این مدها داده می‌شود و می‌توانیم بسط‌های زیر را انجام دهیم\*

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) &= \sum_{\mathbf{k}\lambda} q_{\mathbf{k}\lambda}(t) \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) \\ \Pi_T(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{4\pi c^2} \sum_{\mathbf{k}\lambda} p_{\mathbf{k}\lambda}(t) \dot{\mathbf{u}}_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (12-27)$$

که در آن  $q_{\mathbf{k}\lambda}$  و  $p_{\mathbf{k}\lambda}$ ، ضرایب حقیقی بسط هستند، که به وسیله شرایط اولیه تعیین می‌شوند. (توجه کنیم که ضرایب  $q_{\mathbf{k}\lambda}$  و  $p_{\mathbf{k}\lambda}$  فقط توابعی از زمان هستند و نه از مکان). مقادیر مجاز  $\mathbf{k}$  به وسیله شرایط مرزی که در دیواره‌های کاواک تحمیل می‌شوند، تعیین می‌شوند. وقتی حجم محفظه بزرگ می‌شود، عدد کوانتومی  $\mathbf{k}$  شبه پیوسته می‌گردد. حاصل جمع‌ها شامل فقط قطبشهای عرضی ( $\lambda = 1, 2$ ) هستند زیرا هامیلتونی تابش آزاد شامل میدانهای کاملاً "عرضی" است.

عمل تاو گرفتن از موج تخت  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  منجر به ضرب آن در  $i\mathbf{k} \times$  می‌شود. بنابراین داریم

$$\nabla \times \mathbf{A} = \sum_{\mathbf{k}, \lambda=1,2} q_{\mathbf{k}\lambda} i\mathbf{k} \times \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda} \quad (12-28)$$

با استفاده از روابط  $\mathbf{k} \times \mathbf{u}_{\mathbf{k}1} = k \mathbf{u}_{\mathbf{k}2}$  و  $\mathbf{k} \times \mathbf{u}_{\mathbf{k}2} = -k \mathbf{u}_{\mathbf{k}1}$  (رک شکل ۱۲-۱) همراه با (۱۲-۲۶)، بعد از مقداری ساده‌سازی خواهیم داشت

$$\int |\nabla \times \mathbf{A}|^2 d\mathbf{r} = \sum_{\mathbf{k}\lambda=1,2} q_{\mathbf{k}\lambda}^2 k^2 4\pi c^2 \quad (12-29)$$

به‌طور مشابه، با توجه به تعریف  $\Pi_T$  در (۱۲-۲۷)، خواهیم داشت

\* به عبارت دقیقتر، میدانها برای یک سیستم فیزیکی در (۱۲-۲۷) باید حقیقی باشند و در بینهایت صفر شوند. در حالی که مدهای (۱۲-۲۵) در این شرط صدق نمی‌کنند، ولی محاسبات را به‌طور قابل ملاحظه‌ای ساده می‌کنند و با وجود این نتایج معتبرند.



$$|\Pi_T|^2 = \frac{1}{(4\pi c^2)^2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}',\lambda,\lambda'} p_{\mathbf{k}'\lambda'} p_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{u}_{\mathbf{k}'\lambda'}^* \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda} \quad (12-30)$$

با قراردادن این نتایج در (۱۲-۲۴)، انتگرال گیری و استفاده از روابط تعامد (۱۲-۲۶) خواهیم داشت

$$H_{rad} = \int \left[ \frac{|4\pi c \Pi_T|^2 + |\nabla \times \mathbf{A}|^2}{8\pi} \right] d\mathbf{r} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda=1,2} \left[ \frac{p_{\mathbf{k}\lambda}^2}{2} + \frac{1}{2} \omega_k^2 q_{\mathbf{k}\lambda}^2 \right] \quad (12-31)$$

که در آن  $\omega_k = ck$ . بنابراین هامیلتونی تابش آزاد معادل است با هامیلتونی یک مجموعه بینهایت از نوسانگرهای با جرم واحد که هر کدام وابسته به یکی از مدهای مشخصه اند. ضرایب  $p_{\mathbf{k}\lambda}$  و  $q_{\mathbf{k}\lambda}$  نقش متغیرهای بندادی برای هر کدام از نوسانگرهای مد را ایفا می کنند. هر نوسانگر به وسیله یک بردار موج  $\mathbf{k}$  و یک شاخص قطبش  $\lambda = 1, 2$  مشخص می شود. در اینجاست که به خاطر دانه ای نبودن میدان بینهایت نوسانگر (به جای  $N$  نوسانگر زنجیرگسته در فصل ۱۰) داریم.

## ۶- کوانتش میدان (عرضی) تابش آزاد

کوانتش میدان تابشی با همان الگوی آشنای تبدیلات زیر به دست می آید

$$\mathbf{A} \rightarrow \hat{\mathbf{A}} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hat{q}_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}\lambda} \quad (12-32)$$

$$\Pi_T \rightarrow \hat{\Pi}_T = \frac{1}{4\pi c^2} \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hat{p}_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hat{\Pi}_{T\mathbf{k}\lambda} \quad (12-33)$$

که در آنها

$$\hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}\lambda} = \hat{q}_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda} \quad \text{و} \quad \hat{\Pi}_{T\mathbf{k}\lambda} = \frac{1}{4\pi c^2} \hat{p}_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}$$

با استفاده از (۱۲-۱۵)، روابط جابه جایی میدان برای مولفه های فوریه عرضی می شوند

$$[\hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}'\lambda'}(\mathbf{r}'), \hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r})] = [\hat{\Pi}_{T\mathbf{k}'\lambda'}(\mathbf{r}'), \hat{\Pi}_{T\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r})] = 0 \quad (12-34)$$

$$[\hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}'\lambda'}(\mathbf{r}'), \hat{\Pi}_{T\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r})] = i\hbar \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\lambda\lambda'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

بر طبق اصل عدم قطعیت هایزنبرگ، توانائی ما در اندازه گیری همزمان مولفه های فوریه عرضی  $\hat{A}$  و  $\hat{\Pi}_T$  در یک نقطه از فضا محدود است، با انتگرال گیری از (۱۲-۳۴) روی تمام فضا و با کاربرد (۱۲-۲۶) خواهیم یافت

$$[\hat{q}_{\mathbf{k}'\lambda'}, \hat{q}_{\mathbf{k}\lambda}] = [\hat{p}_{\mathbf{k}'\lambda'}, \hat{p}_{\mathbf{k}\lambda}] = 0 \quad (12-35)$$

$$[\hat{q}_{\mathbf{k}'\lambda'}, \hat{p}_{\mathbf{k}\lambda}] = i\hbar\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\lambda\lambda'}$$

کوانتش هامیلتونی،

$$\hat{H}_{rad} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{1}{2}\hat{p}_{\mathbf{k}\lambda}^2 + \frac{1}{2}\omega_k^2\hat{q}_{\mathbf{k}\lambda}^2 \quad (12-36)$$

از الگوئی که مشخصه کوانتش برای نوسانگرهاست پیروی می کند، حالت تابش به وسیله یک حاصل ضرب مستقیم حالت های نوسانگر که هر کدام از آنها به یک مد مشخص وابسته هستند، نمایش داده می شود، یعنی

$$|\text{rad}\rangle = |v_{\mathbf{k}_1\lambda_1}\rangle \otimes |v_{\mathbf{k}_2\lambda_2}\rangle \otimes \dots = |\{v_{\mathbf{k}\lambda}\}\rangle \quad (12-37)$$

که در آن  $v_{\mathbf{k}\lambda}$  ها اعداد صحیح برانگیختگی مد  $\mathbf{k}$  و  $\lambda$  هستند. وقتی دنباله اعداد صحیح برانگیختگی  $\{v_{\mathbf{k}\lambda}\}$  مشخص شده باشد حالت تابش معلوم است، انرژی حالت عبارت است از

$$\varepsilon(\text{rad}) = \sum_{\mathbf{k}\lambda} (v_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2})\hbar\omega_k \quad (12-38)$$

شبهات بین (۱۲-۳۸) و (۱۵-۷۳) پیشنهاد می کند که فوتون را به عنوان کوانتای میدان الکترومغناطیسی وارد کنیم. به هر مد فوتونی با انرژی  $\varepsilon_k = \hbar\omega_k$  نسبت می دهیم. فوتون یک ذره کاملاً نسبیتی با جرم در حال سکون صفر است که با سرعت نور حرکت می کند. با قراردادن  $m=0$  در رابطه  $\varepsilon = (P^2c^2 + m^2c^4)^{1/2}$ ، نتیجه می گیریم که تکانه فوتون عبارت است از  $\varepsilon/c = \hbar\omega_k/c$  یا به شکل برداری  $\mathbf{P}_k = \hbar\mathbf{k}$ . اعداد صحیح دنباله برای یک حالت داده شده، یعنی  $v_{\mathbf{k}\lambda}$ ، به عنوان تعداد فوتون های موجود از هر نوع تعبیر می شوند. حالت خلاء ( $v_{\mathbf{k}\lambda}=0$  تمام) دارای انرژی

$$\varepsilon_{vac} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{1}{2}\hbar\omega_k \rightarrow \infty$$

است. انرژی بینهایت خلاء مشخصه میدان الکترومغناطیسی است، اما، چون این انرژی

ثابت است، آنرا نادیده می‌گیریم، همانطور که در مورد انرژی خودی بینهایت برهم‌کنش کولنی در (۱۲-۲۴) انجام دادیم.

## ۷- الکترو دینامیک کوانتومی - گذارهای تابشی

ویژه حالت‌های مانای یک سیستم الکترو دینامیکی به وسیله ویژه بردارهای  $\hat{H} = \hat{H}_{\text{rad}} + \hat{H}_{\text{part}} + \hat{H}_{\text{int}}$  نمایش داده می‌شوند. جمله برهم‌کنش، از (۱۲-۲۴)، عبارت است از

$$\hat{H}_{\text{int}} = - \sum_i \frac{q}{mc} \hat{\mathbf{p}}^{(i)} \cdot \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}^{(i)}) + \sum_i \frac{q^2}{2mc^2} \hat{A}^2(\mathbf{r}^{(i)}) \quad (12-39)$$

برای الکترون‌ها، ثابت پیریشیدگی، در یکاهای cgs، مقدار زیر در نظر گرفته می‌شود

$$\lambda = \frac{q}{c} = \frac{4.8 \times 10^{-10}}{3 \times 10^{10}} \sim 10^{-20}$$

با صرف نظر کردن از جمله دوم (چون شامل  $\lambda^2$  است)، برهم‌کنش می‌تواند به عنوان یک پیریشیدگی مرتبه اول در نظر گرفته شده و به صورت

$$\hat{H}_{\text{int}} \simeq - \lambda \sum_i \frac{\hat{\mathbf{p}}^{(i)} \cdot \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}^{(i)})}{m} \quad (12-40)$$

نوشته شود. با انتخاب  $\hat{H}_0 = \hat{H}_{\text{rad}} + \hat{H}_{\text{part}}$  به عنوان هامیلتونی ناپیریشیده، ویژه تابعهای آن می‌توانند به صورت حاصل ضرب مستقیم

$$|\alpha\rangle = |\text{rad} + \text{part}\rangle = |\text{rad}\rangle \otimes |\text{part}\rangle = |\{v_{\mathbf{k}\lambda}\}\rangle \otimes |i\rangle \quad (12-41)$$

نوشته شود که در آن  $|i\rangle$  نمایانگر یک ویژه حالت سیستم ذره‌ای است، حالت ناپیریشیده وقتی معلوم می‌شود که هم حالت‌های تابشی و هم حالت‌های ذره‌ای هردو مشخص شده باشند. انرژی ناپیریشیده حالت (با صرف نظر کردن از انرژی خلاء) عبارت است از

$$\varepsilon_\alpha = \varepsilon_{\text{rad} + \text{part}} = \varepsilon_i(\text{part}) + \sum_{\mathbf{k}\lambda} v_{\mathbf{k}\lambda} \hbar \omega_{\mathbf{k}} \quad (12-42)$$

واضح است که عملگرهای تابشی و ذره‌ای فقط روی کتهای مربوط به خودشان در (۱۲-۴۱) اثر می‌کنند.

فرض خواهیم کرد که پیرشیدگی (۱۲-۴۰) گذارهایی را بین حالت‌های ناپیرشیده (۱۲-۴۱) القاء می‌کند. حالت اولیه را به صورت

$$|\alpha\rangle = |\{v_{k\lambda}\}\rangle|i\rangle$$

خواهیم گرفت که دنباله  $\{v_{k\lambda}\}$  نمایانگر تعداد اولیه فوتونهای موجود هر نوع و  $|i\rangle$  نمایانگر حالت اولیه سیستم ذره‌ای است. حالت نهائی به صورت

$$|\beta\rangle = |\{v'_{k\lambda}\}\rangle|f\rangle$$

نوشته می‌شود. حالت‌های تابشی اولیه و نهائی توزیعهای فوتونی متفاوتی دارند (یعنی،  $\{v_{k\lambda}\} \neq \{v'_{k\lambda}\}$ ). سیستم ذره‌ای یک گذار از حالت  $|i\rangle$  به یک حالت نهائی  $|f\rangle$  انجام داده است. آهنگ گذار مرتبه اول به وسیله قاعده طلایی فرمی (۷-۷۱)

$$R_{\alpha \rightarrow \beta} = \frac{2\pi}{\hbar} \lambda^2 \left[ \langle \alpha | \sum_i \frac{\hat{\mathbf{p}}^{(i)}}{m} \cdot \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}^{(i)}) | \beta \rangle \right]^2 \rho_\beta \Big|_{\epsilon_\alpha = \epsilon_\beta} \quad (12-43)$$

داده می‌شود که در آن  $\lambda = q/c$ .

رابطه (۱۲-۴۳) را به یک سیستم ذره‌ای مرکب از یک الکترون هیدروژنی اعمال می‌کنیم. محاسبه (۱۲-۴۳) با مشاهدات زیر ساده می‌شود:

(۱) چون عملگرهای

$$\hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i} \nabla$$

$$\hat{\mathbf{A}} = \frac{(4\pi c^2)^{1/2}}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \hat{q}_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$

به ترتیب فقط روی کتهای ذره‌ای و تابشی عمل می‌کنند، عناصر ماتریسی (۱۲-۴۳) می‌توانند به صورت زیر نوشته شوند

$$\left| \langle \alpha | \frac{\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})}{m} | \beta \rangle \right|^2 = \frac{4\pi c^2}{\mathcal{V}} \left| \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \langle \{v_{k\lambda}\} | \hat{q}_{\mathbf{k}\lambda} | \{v'_{k\lambda}\} \rangle \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \langle i | \frac{\hat{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{m} | f \rangle \right|^2 \quad (12-44)$$

(۲) قاعده طلایی فقط گذارهای بین حالت‌های با یک انرژی را در بر می‌گیرد و لازم است که داشته باشیم

$$\varepsilon_\alpha = \varepsilon_\beta$$

$$\varepsilon_i + \sum_{\mathbf{k}\lambda} v_{\mathbf{k}\lambda} \hbar \omega_k = \varepsilon_f + \sum_{\mathbf{k}\lambda} v'_{\mathbf{k}\lambda} \hbar \omega_k \quad (۱۲-۴۵)$$

بر طبق نتایج فصل ۴، رابطه (۴-۵۳)، می‌توان عناصر ماتریسی تابشهای نوسانگر گونه (۱۲-۴۴) را به صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned} \langle \{v_{\mathbf{k}\lambda}\} | \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hat{q}_{\mathbf{k}\lambda} | \{v'_{\mathbf{k}\lambda}\} \rangle &= \sum_{\mathbf{k}\lambda} \langle v_{\mathbf{k}\lambda} | \hat{q}_{\mathbf{k}\lambda} | v'_{\mathbf{k}\lambda} \rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}\lambda} \left[ \frac{(v_{\mathbf{k}\lambda} + 1) \hbar}{2\omega_k} \right]^{1/2} \delta_{v_{\mathbf{k}\lambda}+1, v'_{\mathbf{k}\lambda}} \\ &\quad + \left[ \frac{v_{\mathbf{k}\lambda} \hbar}{2\omega_k} \right]^{1/2} \delta_{v_{\mathbf{k}\lambda}-1, v'_{\mathbf{k}\lambda}} \end{aligned} \quad (۱۲-۴۶)$$

به طور معادل، تعداد فوتونهای هر نوع ممکن است فقط یکی افزایش (گسیل) یا کاهش (جذب) یابد و نه بیشتر. در نظریه پیرشیدگی مرتبه بالاتر فرایندهای چند فوتونی امکان پذیر هستند. فرض خواهیم کرد که سیستم ذره‌ای، در این مورد اتم هیدروژن، گذاری انجام دهد که در آن  $\varepsilon_i > \varepsilon_f$  باشد. برای برقراری اصل پایستگی انرژی، (۱۲-۴۵)، انرژی فوتون باید به اندازه  $\varepsilon_i - \varepsilon_f$  افزایش یابد. اما، قاعده تک فوتونی در صورتی می‌تواند برقرار بماند که فقط و فقط فوتونهای با فرکانس

$$\omega_{if} = |\mathbf{k}|c = \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_f}{\hbar}$$

گسیل شده باشند. این نکته پیشنهاد می‌کند که فقط دلتای اول کروکر در (۱۲-۴۶) باید نگهداری شود (برای فرایند گسیل) و اینکه جمع باید روی حالت‌های فوتونی با

$$|\mathbf{k}| = \frac{\omega_{if}}{c} = \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_f}{\hbar c}$$

انجام گیرد.

(۴) چگالی حالتها (با ظر نظر کردن از قطبش) برای یک فوتون با بردار موجی  $\mathbf{k}$  از روابط زیر به دست می‌آید

$$\frac{\mathcal{V} d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \rho(\omega) d\varepsilon = \rho(\omega) \hbar d\omega$$

$$\frac{\mathcal{V} k^2 dk}{(2\pi)^3} d\Omega_{\mathbf{k}} = \frac{\mathcal{V} \omega^2 d\omega}{(2\pi c)^3} d\Omega_{\mathbf{k}} = \rho(\omega) \hbar d\omega$$

یا

$$\rho(\omega) = \frac{\mathcal{V} \omega^2}{(2\pi c)^3 \hbar} d\Omega_{\mathbf{k}} \quad (۱۲-۴۷)$$

(۵) گذارهای نوری در هیدروژن شامل فوتون‌هایی هستند که طول موج آن‌ها خیلی بزرگتر از ابعاد اتم است. بنابراین می‌توانیم بنویسیم  $r \gg \lambda$  یا  $k \cdot r \ll 1$ ، به طوری که موج تخت عنصر ماتریسی ذره می‌تواند با  $e^{ik \cdot r} \simeq 1$  تقریب زده شود. عنصر مورد نظر خواهد شد

$$\langle f | \hat{\mathbf{p}} e^{ik \cdot r} | i \rangle \simeq \langle f | \hat{\mathbf{p}} | i \rangle \quad (۱۲-۴۸)$$

این رابطه، همان‌طور که خواهیم دید، همان تقریب دوقطبی است که در فصل ۷ به کار رفت. با قراردادن نتایج فوق در قاعده پلائی (۱۲-۴۳)، و جانشین کردن جمع بندی روی  $\mathbf{k}$  ها به وسیله انتگرال، آهنگ گسیل را به صورت زیر به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} R_{\alpha \rightarrow \beta} &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2}{c^2} \int \sum_{\lambda} \frac{4\pi c^2}{\mathcal{V}} \frac{\hbar(\nu_{\mathbf{k}\lambda} + 1)}{2\omega_{fi}} \left| \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \langle f | \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} | i \rangle \right|^2 \frac{\mathcal{V} \omega_{fi}^2}{(2\pi c)^3 \hbar} d\Omega_{\mathbf{k}} \\ &= \frac{e^2 \omega_{fi}}{2\pi c^3 \hbar} \int \sum_{\lambda} (\nu_{\mathbf{k}\lambda} + 1) \left| \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \langle f | \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} | i \rangle \right|^2 d\Omega_{\mathbf{k}} \end{aligned}$$

با استفاده از اتحاد

$$\frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} = \frac{[\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}]}{i\hbar}$$

می‌توان نوشت

$$\begin{aligned} \langle i | \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} | f \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \langle i | \hat{\mathbf{r}} \hat{H} - \hat{H} \hat{\mathbf{r}} | f \rangle \\ &= \frac{\epsilon_i - \epsilon_f}{i\hbar} \langle i | \hat{\mathbf{r}} | f \rangle = \frac{\omega_{if}}{i} \langle i | \hat{\mathbf{r}} | f \rangle \end{aligned}$$

در این صورت آهنگ گسیل خواهد شد

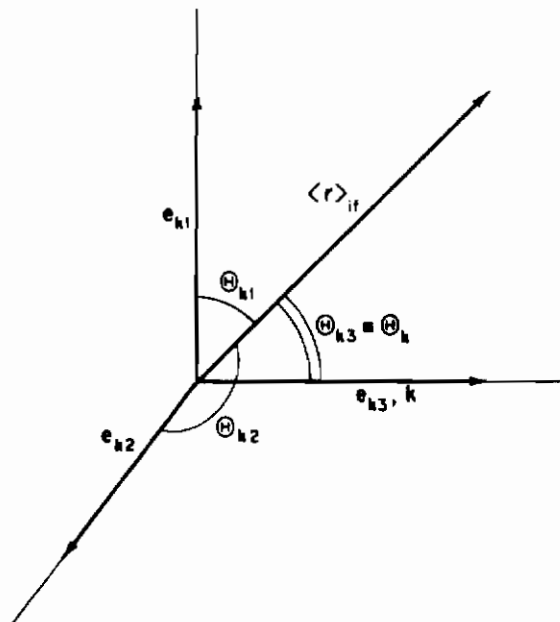
$$R_{\alpha \rightarrow \beta} = \frac{e^2 \omega_{if}^3}{2\pi \hbar c^3} \int d\Omega_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda} (\nu_{\mathbf{k}\lambda} + 1) |\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \langle i | \hat{\mathbf{r}} | f \rangle|^2 \quad (۱۲-۴۹)$$

آهنگ جذب شبیه به رابطه فوق است به استثنای اینکه دلتای دوم کرونکر در (۱۲-۴۶) را ننگه می‌داریم. به بیان دیگر، جمله  $(\nu_{k\lambda} + 1)$  در (۱۲-۴۹) را به وسیله  $\nu_{k\lambda}$  برای جذب جایگزین می‌کنیم. توجه کنیم که انتگرال (۱۲-۴۹) روی کره‌ای به شعاع  $k = \omega_{if}/c$  گرفته می‌شود. اگر حالت اولیه تابش ناقطبیده باشد، اعداد صحیح اشغال مستقل از  $\lambda$  هستند و قرار می‌دهیم  $\nu_{k\lambda} = \nu_k$ . حاصل جمع قطبشی در (۱۲-۴۹) خواهد شد

$$\sum_{\lambda} (\nu_{k\lambda} + 1) |\mathbf{e}_{k\lambda} \cdot \langle i | \hat{\mathbf{r}} | f \rangle|^2 = (\nu_k + 1) \sum_{\lambda=1,2} |\langle i | \hat{\mathbf{r}} | f \rangle|^2 \cos^2 \Theta_{k\lambda} \quad (12-50)$$

که در آن  $\Theta_{k\lambda}$  زاویه بین  $\langle \mathbf{r} \rangle_{if}$  و  $\mathbf{e}_{k\lambda}$  است (شکل ۱۲-۱). اما، چون حاصل جمع مربعهای سه‌کسینوس هادی برابر با یک است، داریم

$$\sum_{\lambda=1,2} \cos^2 \Theta_{k\lambda} = \cos^2 \Theta_{k1} + \cos^2 \Theta_{k2} = 1 - \cos^2 \Theta_{k3} = \sin^2 \Theta_k \quad (12-51)$$



شکل (۱۲-۱) زاویه‌های  $\Theta_{k1}$ ،  $\Theta_{k2}$  و  $\Theta_{k3}$ .

که در آن  $\Theta_k$  زاویه بین  $\langle \mathbf{r} \rangle_{if}$  و  $\mathbf{k}$  (یعنی،  $\mathbf{e}_{k3}$ ) است، اگر تابش همسانگرد باشد (تعداد فوتونها برای تمام جهتهای  $\mathbf{k}$  یکسان‌اند)  $\nu_k$  می‌تواند برابر  $\nu_k$  قرار داده شود و از زیر انتگرال بیرون بیاید. آهنگ گذار سرانجام خواهد شد

$$R_{\alpha \rightarrow \beta} \left( \begin{array}{c} \text{گسیل} \\ \text{جذب} \end{array} \right) = \frac{e^2 \omega_{if}^3}{2\pi \hbar c^3} \left\{ \begin{array}{c} \nu_k + 1 \\ \nu_k \end{array} \right\} \left[ \int d\Omega_k \sin^2 \Theta_k = \frac{8\pi}{3} \right] |\langle \mathbf{r} \rangle_{if}|^2$$

$$\left( k = \frac{\omega_{if}}{c} \right) \quad (12-52)$$

آهنگ گسیل (جمله بالایی) از دو جمله تشکیل شده است. جمله اول شامل حالت تابش اولیه (یعنی،  $\nu_k$ ) است و متناظر با گسیل القایی است. این جمله، همانطور که از اصل برگشت پذیری میکروسکوپیکی انتظار می رود، با آهنگ جذب القایی یکسان است. جمله دوم در آهنگ گسیل مستقل از حالت تابش اولیه است و حتی در غیاب تابش نیز رخ می دهد. این آهنگ خود به خودی از (۱۲-۵۲) به صورت

$$R_{\alpha \rightarrow \beta}^{\text{spont}} = \frac{4e^2 \omega_{if}^3}{3\hbar c^3} |\langle i | \hat{\mathbf{r}} | f \rangle|^2 \quad (12-53)$$

نتیجه می شود و با ضریب "A" ی اینشتین که در (۷-۹۱) محاسبه شد یکی است. توجه کنیم که این نتیجه گیری کاملاً "مکانیک کوانتومی است و روی توازن دقیق آماری تکیه نمی کند. چگالی انرژی تابشی،  $\rho_{\text{rad}}(\omega)$ ، بر بازه فرکانس  $d\omega$  به وسیله رابطه زیر تعریف می شود

$$2\nu_k \hbar \omega \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \rho_{\text{rad}}(\omega) d\omega$$

با استفاده از  $\omega = ck$ ، این رابطه خواهد شد

$$2\nu_k \hbar \omega \frac{k^2 dk d\Omega_{\mathbf{k}}}{(2\pi)^3} = 2\nu_k \hbar \omega \frac{\omega^2 d\omega}{(2\pi c)^3} d\Omega_{\mathbf{k}} = \rho_{\text{rad}}(\omega) d\omega \quad (12-54)$$

ضریب دو از دو حالت قطبش نتیجه می شود. همسانگردی تابش جایگذاری  $d\Omega_{\mathbf{k}} \rightarrow 4\pi$  را مجاز می سازد. با حل معادله فوق برای  $\nu_k$ ، خواهیم یافت

$$\nu_k = \frac{\pi^2 c^3}{\omega^3 \hbar} \rho_{\text{rad}}(\omega) \quad \left(k = \frac{\omega}{c}\right) \quad (12-55)$$

با قراردادن (۱۲-۵۵) در (۱۲-۵۲) نتیجه می شود

$$R_{\alpha \rightarrow \beta}^{(\text{induced absorption or emission})} = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2} |\langle i | \hat{\mathbf{r}} | f \rangle|^2 \rho_{\text{rad}}(\omega_{if}) \quad (12-56)$$

که منجر به ضریب "B" ی اینشتین، در توافق با (۷-۸۳)، می شود. آهنگهای گذار در (۱۲-۵۳) و (۱۲-۵۶) به شرطی معتبرند که میدان تابشی خیلی شدید نباشد؛ در غیر این صورت، نظریه مرتبه اول نامناسب است. هم چنین، تقریب دو قطبی



برای گذارهایی که در آنها طول موج فوتونهای گسیل شده یا جذب شده در مقایسه با ابعاد سیستم اتمی بزرگ هستند معتبر است. در گذارهای نوری داریم  $\lambda \simeq 5000 \text{ \AA}$ ، در صورتی که ابعاد اتمی فقط  $d \sim 1 \text{ \AA}$  است. برای گسیل اشعه X ( $\lambda \sim 1 \text{ \AA}$ )، تقریباً دو قطبی به طور آشکاری نامناسب است.

کوانتش میدان مفهوم فوتون ذره مانند با انرژی  $\varepsilon = \hbar\omega$  و تکانه  $\mathbf{P} = \hbar\mathbf{k}$  را توجیه می‌کند. قطبش را می‌توان به حالت اسپینی فوتون ربط داد، فوتون یک بوزونی است با اسپین واحد که جهت‌های بالا و پایین آن با دو درجه قطبش عرضی متناظرند، جهت صفر اسپین وجود ندارد زیرا این جهت متناظر با قطبش طولی است، که در تابش آزاد وجود ندارد (پیمانه عرضی).

بالاخره، چون لازم نیست تعداد فوتونها پایسته باشد، توزیع حرارتی به وسیله فرمول بوز - اینشتین با پتانسیل شیمیایی مساوی با صفر، یعنی

$$\bar{v}_k = \frac{1}{e^{+(\hbar\omega_k/k_B T)} - 1}$$

داده می‌شود. با استفاده از (۱۲-۵۵)، انرژی موجود در این فوتونهای حرارتی با فرکانس  $\omega$  عبارت است از

$$\rho_{\text{rad}}(\omega) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}$$

که دقیقاً همان فرمول پلانک (۷-۹۰) است.

## ۸ - پهن شدن خطوط طیفی - رابطه عدم قطعیت انرژی - زمان

تمام بحثهای ما بر فرض وجود حالت‌های واقعاً مقید مانا و امکان مشاهده دقیق مشخصات آنها استوار بوده‌اند. یک رابطه عدم قطعیت دیگر علاوه بر رابطه عدم قطعیت مکان - تکانه که در فصل ۳ آمد و مستقل از آن است وجود دارد. این اصل جدید دقت اندازه‌گیری انرژی یک حالت مانا را، وقتی که این اندازه‌گیری در یک زمان محدودی انجام می‌گیرد، محدود می‌کند. باید در نظر داشت که مفهوم یک حالت مقید مانا به طور زیرکانه‌ای دلالت بر این دارد که از دیدگاه فیزیکی مشخصات حالت نسبت به انتقال در زمان تغییرناپذیر هستند. هر فرایند اندازه‌گیری که شامل کاوشی در انرژی وابسته به سیستم باشد، که در یک بازه

زمانی متناهی  $\tau$  صورت گیرد، این تغییرناپذیری را از بین می‌برد. نشان خواهیم داد که این امر منجر به عدم قطعیتی در اندازه‌گیری انرژی،  $\Delta\epsilon$ ، می‌شود که با

$$\Delta\epsilon \cdot \tau \simeq \hbar$$

داده می‌شود.

در استنتاج قاعده تلائی در فصل ۷ (رک ۷-۶۸) به احتمال گذار وابسته به زمان به صورت زیر رسیدیم

$$\mathcal{P}_{ij}(\tau) \propto \frac{(1 - \cos \omega_{ij}\tau)}{\tau \omega_{ij}^2} = \frac{\left(1 - \cos\left(\frac{\epsilon_j - \epsilon_i}{\hbar}\right)\tau\right)}{\tau \left[\frac{\epsilon_j - \epsilon_i}{\hbar}\right]^2}$$

این رابطه احتمال گذار بین ترازهای  $\epsilon_i$  و  $\epsilon_j$  را که به وسیله یک پیرشیدگی ایستا القاء شده است، به دست می‌دهد. این احتمال، وجود گذار به حالت‌های نهائی‌ای را ایجاب می‌کند که انرژی‌های آنها با انرژی حالت اولیه، به طور متوسط به اندازه

$$|\epsilon_j - \epsilon_i| = \Delta\epsilon \simeq \frac{\hbar}{\tau}$$

تفاوت دارند.

می‌توان این نتیجه را این گونه تعبیر کرد که بگوئیم پیرشیدگی ایستا مانند یک وسیله اندازه‌گیری انرژی سیستم ناپیرشیده عمل می‌کند. به علاوه، اگر وسیله برای یک مدت محدود  $\tau$  عمل کند، نتیجه اندازه‌گیری منجر به عدم قطعیت  $\Delta\epsilon$  در انرژی می‌شود. اگر  $\tau \rightarrow \infty$  اندازه‌گیری مؤثر انرژی دقیق می‌شود. لازم به تذکر است که این رابطه عدم قطعیت فقط به طول مدت  $\tau$  بستگی دارد و نه به شدت پیرشیدگی.

سیستمی مرکب از دو زیر سیستم که به طور ضعیفی برهم کنش می‌کنند، به عنوان مثال، جعبه‌ای شامل اتمها و تابش الکترومغناطیسی، در نظر بگیریم. فرض کنیم که انرژی سیستم اتمی به وسیله برهم کنش با تابش اندازه‌گیری شود. چون این تابش گذارهایی را در سیستم اتمی القاء می‌کند، اتمها به مدت زمان محدودی که طول عمر نامیده می‌شود و با

$$\tau_i = \frac{1}{\gamma_i}$$

داده می‌شود، درحالت‌های اولیه خود باقی می‌مانند.  $\gamma_i$  بیانگر آهنگ کل کاهش جمعیت تراز  $\varepsilon_i$  است که در اثر فوتونها القاء شده است. در واقع، همان‌طور که دیدیم، حتی در غیاب فوتونها (خلأ تابشی)، عمر محدودی که ناشی از گسیل خود به‌خودی است وجود دارد. بنابراین انرژی یک تراز یک سیستم اتمی نمی‌تواند با دقتی بیشتر از

$$\Delta\varepsilon_i \sim \frac{\hbar}{\tau_i}$$

که در آن  $\tau_i$  عمر مربوط به گسیل خود به‌خودی است، اندازه‌گیری شود. این عدم قطعیت منجر به یک پهنای طبیعی تراز می‌شود و معنی آن این است که یک تراز اتمی حداکثر شبه گسسته است.

گذارهای بین حالت‌هایی که به‌طور طبیعی پهن شده‌اند منجر به گسیل (یا جذب) فوتون‌هایی با پهنای طیفی

$$\Delta\omega_{ij} = \frac{\Delta\varepsilon_i + \Delta\varepsilon_j}{\hbar} = \frac{1}{\tau_i} + \frac{1}{\tau_j} = \gamma_i + \gamma_j$$

می‌شوند. بنابراین خطوط طیفی یک اتم به‌طور طبیعی پهن هستند، و پهنای هر خط به وسیله عمر حالت‌های اولیه و نهایی وابسته به گذار تعیین می‌شود. این پهن‌شدگی زیربنای واقعیتی است که بنا به آن تابش، وقتی در یک مدت محدودی از زمان اندازه‌گیری می‌شود، نمی‌تواند در یک حالت تکفام مشاهده شود.

### مسائل

۱-۱۲ چگالی لاگرانژی ارتعاشات یک سیال ایده‌آل را به صورت

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\rho_0\dot{\eta}^2 + P_0\nabla\cdot\eta - \frac{1}{2}\gamma P_0(\nabla\cdot\eta)^2$$

در نظر بگیرید که در آن  $\rho_0$  چگالی در حال تعادل،  $P_0$  فشار در حال تعادل و  $\gamma$  نسبت گرمای ویژه در فشار ثابت به گرمای ویژه در حجم ثابت سیال است.  $\eta(\mathbf{r}, t)$  را مختصه میدان‌ی بگیرید که جابه‌جایی یک نقطه در داخل سیال در نقطه  $\mathbf{r}$  و در زمان  $t$  را توصیف می‌کند.

(الف) چگالی تکانه مزدوج  $\pi_j$  را پیدا کنید.

( ب ) معادله حرکت برای  $\eta_j(\mathbf{r}, t)$  را پیدا کنید .

( ج ) نشان دهید که چگالی موضعی سیال به وسیله

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \rho_0(1 + \xi(\mathbf{r}, t))$$

داده می شود که در آن

$$\xi = -\nabla \cdot \boldsymbol{\eta}$$

( د ) قسمت ( ب ) را برحسب  $\xi(\mathbf{r}, t)$  بیان کنید .

( ه ) با به کار بردن یک تبدیل لوژاندر ، چگالی هامیلتونی سیال را پیدا کنید .

۱۲-۲ تحقیق کنید که لاگرانژی (۱۶-۱۲) منجر به هامیلتونی (۱۸-۱۲) می شود .

۱۲-۳ نشان دهید که تبدیل پیمانه ای  $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla \chi$  و  $\Phi \rightarrow \Phi - \dot{\chi}/c$  ، میدانهای  $\mathbf{E}$  و  $\mathbf{B}$  را تغییر نمی دهد .

۱۲-۴ اتحاد زیر را ثابت کنید

$$\frac{\hat{p}}{m} = \frac{[\hat{p}, \hat{H}]}{i\hbar} \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \mathcal{V}(\hat{r})$$

۱۲-۵ مقطع موثر یونش برای گسیل الکترون از حالت پایه هیدروژن را که در اثر اشعه  $X$  که به شکل یک موج الکترومغناطیسی تخت با فرکانس  $\omega$  که در جهت محور  $z$  منتشر می شود و در امتداد محور  $y$  قطبیده شده است القاء می شود ، پیدا کنید . فرض کنید  $\hbar\omega \gg 13.6 \text{ eV}$  و از اسپین الکترون صرف نظر کنید ، (راهنمایی : فرض کنید حالت اولیه مرکب است از یک الکترون هیدروژنی در حالت

$$\psi_i = \frac{1}{(\pi a^3)^{1/2}} e^{-r/a}$$

همراه با تعداد  $\nu_{\mathbf{k}}$  فوتون که بردار تکانه آنها  $\mathbf{k}$  در امتداد محور  $z$  و بردار قطبش آنها در امتداد محور  $y$  است ، حالت نهائی تشکیل شده است از یک فوتون کمتر (جذب) و یک الکترون آزاد در حالت

$$\psi_f = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$

که  $P = \hbar K$  تکانه الکترون است. چگالی حالت‌های نهایی الکترون (با صرف نظر کردن از اسپین) عبارت است از

$$\rho_K = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \frac{mK}{\hbar^2} d\Omega_K$$

به خاطر داشته باشید که  $\hbar\omega = p^2/2m + 13.6 \text{ eV}$  .

۱۲-۶ با استفاده از نتایج فوق، نشان دهید که اگر الکترون در آغاز آزاد باشد اثر فوتو-

الکتریکی (جذب فوتونی) نمی‌تواند صورت گیرد. (راهنمایی: قرار دهید  $\psi_i = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}/\sqrt{\mathcal{V}}$  )

۱۲-۷ عملگر (۱۲-۴۰) عبارت است از حاصل ضرب عملگرهای جابه‌جایی پذیر و بنابراین عموماً

هرمیتی نیست. نشان دهید که این مطلب تاثیری روی نتایج (۱۲-۴۴) نمی‌گذارد.

(راهنمایی: نشان دهید که در پیمانه عرضی، جملات (۱۲-۴۴) با عوض کردن  $\mathbf{p}$

با  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  دست نخورده باقی می‌مانند).

### مراجع پیشنهادی

- Berestetskii, V. B., Lifshitz, E. M., and Pitaevskii, L. P., "Relativistic Quantum Theory." Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1971.
- Bjorken, J. D., and Drell, S. D., "Relativistic Quantum Fields." McGraw-Hill, New York, 1965.
- Goldstein, H., "Classical Mechanics." Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1950.
- Heitler, W., "Quantum Theory of Radiation," 3rd ed. Oxford Univ. Press, London and New York, 1954.
- Messiah, A., "Quantum Mechanics," Vol. II. Wiley, New York, 1962.
- Schiff, L. I., "Quantum Mechanics," 3rd ed. McGraw-Hill, New York, 1968.
- Yourgrau, W., and Mandelstam, S., "Variational Principles in Dynamics and Quantum Theory," 3rd ed. Saunders, Philadelphia, 1968.



## پیوست الف

تقریب و نتزل - کرامرز - بریلوئن (WKB یا "انتگرال فاز")

معادله شرودینگر یک بعدی برای ذره‌ای در یک پتانسیل  $V(x)$  با انرژی  $\varepsilon > V(x)$  را در نظر بگیرید

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right\} \psi = \varepsilon \psi$$

یا

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} + k^2(x) \right\} \psi = 0 \quad (\text{الف} - ۱)$$

که در آن

$$k(x) = \left[ \frac{2m(\varepsilon - V(x))}{\hbar^2} \right]^{1/2}$$

اگر  $V(x)$  برابر با مقدار ثابتی، مثلاً  $V_0$ ، باشد، جواب (الف - ۱) عبارت است از  $\psi = e^{\pm i k_0 x}$  که در آن

$$k_0 = \left[ \frac{2m(\varepsilon - V_0)}{\hbar^2} \right]^{1/2}$$

موردی را در نظر بگیریم که در آن  $V(x)$  به آهستگی تغییر می‌کند و جوابی به شکل

$$\psi = e^{iu(x)} \quad (\text{الف} - ۲)$$

را آزمایش کنیم. با قراردادن این جواب در (الف - ۱) خواهیم داشت

$$iu'' - (u')^2 + k^2 = 0 \quad \text{یا} \quad u' = \pm (k^2 + iu'')^{1/2} \quad (\text{الف} - ۳)$$

اگر  $V$  ثابت باشد از (الف - ۲) انتظار داریم که  $u \rightarrow \pm k_0 x$ ،  $u' \rightarrow \pm k_0$  و  $u'' = 0$  باشد. این انتظار با (الف - ۳) سازگار است، اما اگر  $V$  به‌کندی تغییر کند، در (الف - ۳) با تقریب مرتبه اول قرار می‌دهیم  $u'' = 0$  و نتیجه می‌گیریم

$$u' = \pm k(x)$$

که پس از انتگرال‌گیری منجر می‌شود به

$$u = \pm \int k(x) dx + C$$

با قراردادن این نتیجه، یعنی  $u'' = \pm k'(x)$ ، در طرف راست (الف - ۳) نتیجه بهتری به دست می‌آوریم که عبارت است از

$$u' = \pm (k^2 \pm ik')^{1/2}$$

یا

$$u = \pm \int (k^2 \pm ik')^{1/2} dx + C$$

با استفاده از (الف - ۲)، جواب تقریبی معادله شرودینگر می‌شود

$$\psi \simeq \exp[\pm i \int (k^2 \pm ik')^{1/2} dx] \quad (\text{الف} - ۴)$$

ثابت  $C$  حذف شده است زیرا، حداکثر، در بهنجارش  $\psi$  تاثیر می‌گذارد. اکنون فرض کنیم که پتانسیل به‌کندی تغییر کند، به‌طوری که داشته باشیم

$$|k'| \ll k^2 \quad (\text{الف} - ۵)$$

در این مورد، رادیکال موجود در (الف - ۴) می‌تواند بسط داده شود و نتیجه دهد

$$\psi \simeq \exp \pm i \int \left( k \pm \frac{i}{2} \frac{k'}{k} \right) dx = \exp[-\frac{1}{2} \ln k] \exp[\pm i \int k dx]$$



یا

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{k}} \exp[\pm i \int k dx] \quad (\text{الف - ۶})$$

که در آن

$$k(x) = \left[ \frac{2m(\varepsilon - V)}{\hbar^2} \right]^{1/2}$$

معادله (الف - ۶) به تقریب  $WKB$  برای حل (الف - ۱) موسوم است. در موردی که  $V(x) > \varepsilon$  باشد، می‌توان نشان داد که تابع تقریبی به شکل

$$\psi \simeq \frac{1}{\sqrt{K}} \exp(\pm \int K dx) \quad (\text{الف - ۷})$$

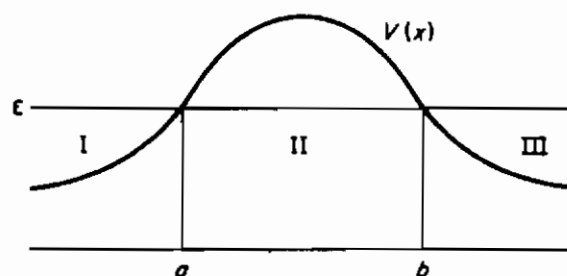
در می‌آید که در آن

$$K(x) = \left[ \frac{2m(V - \varepsilon)}{\hbar^2} \right]^{1/2}$$

هم (الف - ۶) و هم (الف - ۷) در آن نواحی‌ای معتبرند که داشته باشیم

$$|k'| \ll k^2 \quad \text{یا} \quad |K'| \ll K^2 \quad (\text{الف - ۸})$$

فرض کنیم با یک سد پتانسیل  $V(x)$  سروکار داریم که انرژی ذره کمتر از قله سد باشد (شکل الف - ۱). توجه کنیم که در نقاط بازگشت کلاسیکی ( $x = a$  و  $x = b$ )،  $k$  (یا  $K$ ) صفر می‌شود. در نتیجه (الف - ۵) نمی‌تواند برقرار باشد و تقریب  $WKB$  در این نقاط با شکست مواجه می‌شود.



شکل (الف - ۱)

فرض کنیم جواب عمومی معادله شرودینگر (الف - ۱) را که در شرایط پیوستگی در  $x = a$  و  $x = b$  صدق می‌کند، می‌دانیم. در ناحیه I به اندازه کافی دور از  $x = a$ ، این

جواب می‌تواند به‌طور تقریب به‌وسیله تابع WKB به‌صورت

$$\psi_I \simeq \frac{A}{\sqrt{k}} \exp\left(i \int_a^x k dx\right) + \frac{B}{\sqrt{k}} \exp\left(-i \int_a^x k dx\right)$$

$$\left(k = \left[\frac{2m(\varepsilon - V(x))}{\hbar^2}\right]^{1/2}\right) \quad (\text{الف - الف})$$

به‌دست آید، انتخاب حدهای پائین در انتگرالها مهم نیستند زیرا صرفاً در ضرایب  $A$  و  $B$  که در این نقطه اختیاری هستند، مؤثرند. برای نواحی II و III داریم

$$\psi_{II} \simeq \frac{C}{\sqrt{K}} \exp\left(\int_a^x K dx\right) + \frac{D}{\sqrt{K}} \exp\left(-\int_a^x K dx\right) \quad (\text{الف - ب})$$

و

$$\psi_{III} \simeq \frac{E}{\sqrt{K}} \exp\left(i \int_a^x k dx\right) + \frac{F}{\sqrt{K}} \exp\left(-i \int_a^x k dx\right) \quad (\text{الف - ج})$$

که در آنها

$$K = \left[\frac{2m(V(x) - \varepsilon)}{\hbar^2}\right]^{1/2}$$

این تقریبها تا وقتی قابل قبول اند که در نزدیکی  $x = a$  یا  $x = b$  نباشیم. می‌ماند ثابتهای  $A, B, C, D, E, F$  که باید تعیین شوند. به‌نظر جالب می‌آید که با تحمیل شرایط پیوستگی در  $x = a$  و  $x = b$  به (الف-۹) معادلاتی برای این ثابتها ایجاد کنیم. این اقدام کاملاً نادرست است زیرا جوابهای (الف-۹) فقط دور از نقاط بازگشت کلاسیکی معتبراند. از یک نظر، جوابهای WKB رفتار مجانبی جواب درست را در هر دو طرف، اما دور از نقاط بازگشت کلاسیکی، توصیف می‌کنند. در نزدیکی این نقاط یک تقریب کاملاً متفاوتی مورد نیاز است. آنچه که ما به‌دنبال آن هستیم فرمولهای رابطی هستند که جوابهای WKB را به‌طور آرام از طریق این توابع "مجاور" به یکدیگر ربط می‌دهند. ریاضیات لازم برای برقراری این فرمولها خارج از بحث این کتاب است. نتایج به‌صورت زیر هستند\*:

\* به‌عنوان مثال به‌کتابهای زیر مراجعه کنید

P. stehle, "Quantum Mechanics", Holden-Day, San Francisco, 1966.

S. Borowitz, "Fundamentals of Quantum Mechanics", Benjamin, New York, 1967.

مورد (الف) نقطه بازگشت در سمت چپ ناحیه‌ای که از نظر کلاسیکی ممنوع است ( $x = a$  در شکل الف - ۱) قرار دارد

$$\begin{aligned} x < a & \quad x > a \\ \frac{2}{\sqrt{k}} \cos \left[ \int_x^a k \, dx - \frac{1}{4} \pi \right] & \leftarrow \frac{1}{\sqrt{K}} \exp \left( - \int_a^x K \, dx \right) \quad (\text{الف - ۱۰ الف}) \\ \frac{1}{\sqrt{k}} \sin \left[ \int_x^a k \, dx - \frac{1}{4} \pi \right] & \rightarrow \frac{-1}{\sqrt{K}} \exp \left( \int_a^x K \, dx \right) \quad (\text{الف - ۱۰ ب}) \end{aligned}$$

مورد (ب) نقطه بازگشت در سمت راست ناحیه‌ای که از نظر کلاسیکی ممنوع است ( $x = b$  در شکل الف - ۱) قرار دارد

$$\begin{aligned} x < b & \quad x > b \\ \frac{1}{\sqrt{K}} \exp \left( - \int_x^b K \, dx \right) & \rightarrow \frac{2}{\sqrt{k}} \cos \left( \int_b^x k \, dx - \frac{1}{4} \pi \right) \quad (\text{الف - ۱۰ ج}) \\ \frac{-1}{\sqrt{K}} \exp \left( \int_x^b K \, dx \right) & \leftarrow \frac{1}{\sqrt{k}} \sin \left( \int_b^x k \, dx - \frac{1}{4} \pi \right) \quad (\text{الف - ۱۰ د}) \end{aligned}$$

این فرمولهای رابط جوابهای نمایی را به جوابهای نوسانی در نقاط بازگشت ربط می‌دهند. پیکانها جهت ارتباط را نشان می‌دهند، گرچه با جهت ارتباط کاری نخواهیم داشت.

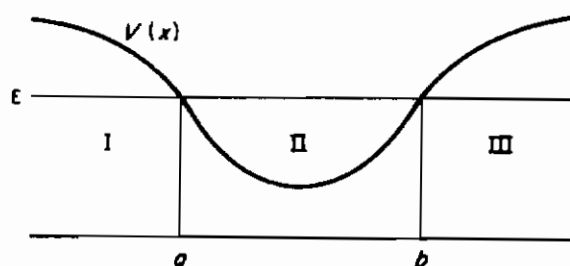
نسبتهای ثابتهای وابسته به جوابهای مربوط به سه ناحیه که به وسیله (الف - ۹) داده شده‌اند، اکنون می‌توانند با استفاده از فرمولهای رابط به عنوان شرایط "مرزی" به دست آیند. ریاضیات مربوطه سرراست ولی طولانی است، ضریب عبور در تقریب WKB به صورت زیر حاصل می‌شود

$$\mathcal{T} = \left| \frac{E}{A} \right|^2 = \left[ \exp \left( \int_a^b K \, dx \right) + \frac{1}{4} \exp \left( - \int_a^b K \, dx \right) \right]^{-2}$$

برای سدهای بلند و پهن، نمای منفی داخل کروشه می‌تواند نادیده گرفته شود و داریم

$$\mathcal{T} \simeq \exp \left( -2 \int_a^b K \, dx \right) \quad \left( K = \left[ \frac{2m(V(x) - E)}{\hbar^2} \right]^{1/2} \right) \quad (\text{الف - ۱۱})$$

تقریب WKB هم چنین می تواند به حالات مقید یک پتانسیل جاذبه ، شبیه آنچه که در شکل (الف-۲) نمایش داده شده است ، به کار رود . در اینجا نقطه بازگشت کلاسیکی  $x = a$



(شکل الف - ۲)

در سمت راست ناحیه I که از نظر کلاسیکی ممنوع است قرار دارد در صورتی که  $x = b$  در سمت چپ ناحیه III که از نظر کلاسیکی ممنوع است واقع شده است ، توابع قابل قبول (یعنی ، آنهایی که در  $x = \pm \infty$  صفر می شوند ) به شکل زیر هستند

$$\begin{aligned}\psi_I &\simeq \frac{A}{\sqrt{K}} \exp\left(\int_a^x K dx\right) \\ \psi_{II} &\simeq \frac{B}{\sqrt{k}} \exp\left(i \int_b^x k dx\right) + \frac{C}{\sqrt{k}} \exp\left(-i \int_b^x k dx\right) \\ \psi_{III} &\simeq \frac{D}{\sqrt{K}} \exp\left(-\int_b^x K dx\right)\end{aligned}$$

فرمول رابط (الف - ۱۰ ج) را به  $\psi_I$  و  $\psi_{II}$  در  $x = a$  اعمال می کنیم . با نوشتن

$$\psi_I = \frac{A}{\sqrt{K}} \exp\left(-\int_x^a K dx\right)$$

توجه کنیم که این تابع باید ، با استفاده از (الف - ۱۰ ج) ، به

$$\psi_{II} \simeq \frac{2A}{\sqrt{k}} \cos\left(\int_a^x k dx - \frac{1}{4}\pi\right)$$

متصل شود که می تواند ، با استفاده از  $\cos \theta = \sin(\theta + \frac{1}{2}\pi)$  ، به صورت زیر نیز نوشته شود

$$\begin{aligned}\psi_{II} &\simeq \frac{2A}{\sqrt{k}} \cos\left(\int_a^b k dx - \int_x^b k dx - \frac{1}{4}\pi\right) \\ &= \frac{2A}{\sqrt{k}} \sin\left(\int_a^b k dx - \int_x^b k dx + \frac{1}{4}\pi\right)\end{aligned}$$

با استفاده از اتحاد  $\sin(A - B) = \sin A \cos B - \cos A \sin B$  رابط فوق می‌تواند به شکل زیر درآید

$$\begin{aligned}\psi_{II} &\simeq \left[\sin \int_a^b k dx\right] \left[\frac{2A}{\sqrt{k}} \cos\left(\int_x^b k dx - \frac{1}{4}\pi\right)\right] \\ &\quad - \left[\cos \int_a^b k dx\right] \left[\frac{2A}{\sqrt{k}} \sin\left(\int_x^b k dx - \frac{1}{4}\pi\right)\right] \quad (\text{الف} - ۱۲)\end{aligned}$$

اما، در  $x = b$ ، جمله دوم (بنابر (الف - ۱۰ ب)) به یک نمایی صعودی در ناحیه III متصل می‌شود. چون حالت مقید است چنین جمله‌ای نباید وجود داشته باشد و تنها در صورتی جواب قابل قبولی داریم که ضریب جمله سینوسی در (الف - ۱۲) صفر شود، یعنی،

$$\cos \int_a^b k dx = 0 \quad \text{یا} \quad \int_a^b k_n dx = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi \quad (\text{الف} - ۱۳)$$

چون داریم

$$k_n = \left[\frac{2m(\epsilon_n - V)}{\hbar^2}\right]^{1/2}$$

(الف - ۱۳) در حقیقت یک شرط کوانتس برای انرژی است، شرط (الف - ۱۳) می‌تواند به صورت

$$\frac{2}{\hbar} \int_a^b [2m(\epsilon_n - V)]^{1/2} dx = (n + \frac{1}{2})2\pi$$

یا

$$2 \int_a^b p_n(x) dx = (n + \frac{1}{2})h$$

نوشته شود. انتگرال طرف چپ انتگرالی روی حرکت کلاسیکی از  $a$  به  $b$  و سپس به  $a$  است و می‌تواند به صورت

$$J_n = \oint p_n dx = (n + \frac{1}{2})h \quad (\text{الف} - ۱۴)$$

نوشته شود، که در آن  $J$  انتگرال فاز نامیده می‌شود. معادله (الف-۱۴) تعمیمی است از آنچه که تحت عنوان قواعد کوانتش ویلسون - سامرفلد خوانده می‌شود. با اعمال (الف-۱۳) به نوسانگر، قرار می‌دهیم  $V = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$  و نتیجه می‌گیریم

$$\int_a^b \left[ \frac{2m\varepsilon_n - m^2\omega^2 x^2}{\hbar^2} \right]^{1/2} dx = (n + \frac{1}{2})\pi$$

نقاط بازگشت کلاسیکی در  $a = -(2\varepsilon/m\omega^2)^{1/2}$  و  $b = (2\varepsilon/m\omega^2)^{1/2}$  هستند. از محاسبه انتگرال طرف چپ نتیجه می‌شود

$$\frac{\pi\varepsilon_n}{\hbar\omega} = (n + \frac{1}{2})\pi \quad \text{یا} \quad \varepsilon_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$$

که همان نتیجه شناخته شده برای نوسانگر است.

جواب WKBی (الف-۲) می‌تواند در سه بعدی (با قراردادن  $u(\mathbf{r}) = W(\mathbf{r})/\hbar$ ) به صورت

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{iW(\mathbf{r})/\hbar} \quad (\text{الف} - ۱۵)$$

نوشته شود. با قراردادن این جواب در معادله ویژه مقداری شرودینگر

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right\} \psi(\mathbf{r}) = \varepsilon \psi(\mathbf{r}) \quad (\text{الف} - ۱۶)$$

نتیجه می‌گیریم

$$\frac{1}{2m} (\nabla W)^2 - [\varepsilon - V(\mathbf{r})] - \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 W = 0 \quad (\text{الف} - ۱۷)$$

توجه کنیم که ثابت پلانک  $\hbar$  فقط در جمله آخر طرف چپ در (الف-۱۷) وارد می‌شود. در حد کلاسیکی،  $\hbar \rightarrow 0$ ، داریم

$$\frac{1}{2m} (\nabla W)^2 + V(\mathbf{r}) = \varepsilon \quad (\text{الف} - ۱۸)$$

معادله (الف-۱۸) به معادله هامیلتون - ژاکوبی مستقل از زمان برای تابع مشخصه هامیلتون

$W$  موسوم است. یک حل این معادله منجر به جواب مسئله کلاسیکی می‌شود\* . روش WKB تصحیحاتی در این نتیجه کلاسیکی برحسب توانهای  $\hbar$  فراهم می‌کند\*\* . یک شباهت جالب بین مکانیک کوانتومی و اپتیک وجود دارد. در اپتیک، جوابهای معادله

$$\nabla^2 \phi + k^2 \phi = 0 \quad (\text{الف} - ۱۹)$$

را جستجو می‌کنیم که در آن  $k(r)$  بردار موج و  $\phi(r)$  "تابع" موج است. بردار موج می‌تواند به صورت

$$k(r) = k_0 n(r)$$

که در آن

$$k_0 = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$$

و  $n(r)$  ضریب شکست موضعی است، بیان شود. معادله (الف - ۱۹) مشابه (الف - ۱۶) است به شرط اینکه "ضریب شکست" مکانیک کوانتومی را با

$$n_{\text{quant}}(r) = \sqrt{\frac{\epsilon - V(r)}{\epsilon}}$$

مشخص کنیم. با قراردادن یک جواب آزمایشی به شکل

$$\phi = e^{ik_0 L(r)} \quad (\text{الف} - ۲۰)$$

در (الف - ۱۹) به معادله‌ای به شکل زیر برای  $L$  هدایت می‌شویم

$$ik_0 \nabla^2 L - k_0^2 (\nabla L)^2 + n^2 k_0^2 = 0 \quad (\text{الف} - ۲۱)$$

\* به کتاب زیر مراجعه کنید

H. Goldstein, "classical Mechanics", Addison-wesley, Reading, Massachusetts, 1950.

\*\* به کتاب زیر مراجعه کنید

S. Borowitz, "Fundamentals of Quantum Mechanics", Benjamin, New York, 1967.

معادله (الف - ۲۱) مشابه با (الف - ۱۷) است. در حد نور هندسی ( $\lambda \rightarrow 0$ ) به این نتیجه می‌رسیم که  $k_0$  باید بزرگ باشد و جمله اول (الف - ۲۱) می‌تواند حذف شود و نتیجه می‌شود

$$(\nabla L)^2 = n^2 \quad (\text{الف - ۲۲})$$

معادله (الف - ۲۲) به معادله آیکونال موسوم است و معادله بنیادی نور هندسی است. این معادله مشابه با معادله هامیلتون - ژاکوبی (الف - ۱۸) است. تابع  $L$  طول مسیر نوری یا آیکونال نامیده می‌شود.

این مشابهت می‌تواند این‌طور خلاصه شود که مکانیک کلاسیکی (معادله هامیلتون - ژاکوبی) نمایانگر حد هندسی مکانیک کوانتومی (معادله شرودینگر) در حد  $\hbar \rightarrow 0$  است.



## پیوست ب

تصویرهای هایزنبرگ و برهم کنش

در تصویر شرودینگر، عملگرها می‌توانند فقط طبق یک بستگی زمانی، تحول پیدا کنند، یعنی

$$\hat{A}_S = \hat{A}(t)$$

برای سهولت،  $t_0 = 0$  را به عنوان زمان اولیه در نظر می‌گیریم. بردارهای حالت در تصویر شرودینگر به صورت

$$|\beta, t\rangle_S = e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\beta, 0\rangle$$

تحول می‌یابند، که در آن فرض کرده‌ایم هامیلتونی  $\hat{H}$  مستقل از زمان است. بستگی زمانی مقادیر قابل انتظار به وسیله رابطه زیر داده می‌شود

$$\langle A(t) \rangle = \langle \beta, t | \hat{A}_S | \beta, t \rangle_S = \langle \beta, 0 | e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{A}(t) e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \beta, 0 \rangle \quad (\text{ب} - ۱)$$

اگر بردارهای حالت را در همان مقادیرشان در  $t = 0$  ثابت نگه داریم و اجازه دهیم که عملگرها به صورت

$$\hat{A}_H = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{A}_S e^{-i\hat{H}t/\hbar} \quad (\text{ب} - ۲)$$

تحول یابند به همان بستگی زمانی (ب - ۱) می‌رسیم. این دستورالعمل به تصویر هایزنبرگ موسوم است.

فرض می‌کنیم که  $\mathcal{H}$  صریحا "به زمان بستگی نداشته باشد". توجه کنیم که (ب-۲) ایجاب می‌کند که  $\mathcal{H}_H = \mathcal{H}_S$ . بنابراین شاخص پائینی هامیلتونی لازم نیست، هم چنین در  $t = 0$  بردارها و عملگرهای دو تصویر بریکدیگر منطبق‌اند.

در تصویر شرودینگر یک بردار حالت می‌چرخد، در نتیجه تصاویر آن روی ویژه-بردارهای عملگرهای منتسب به مشاهده پذیرها با زمان تغییر می‌کنند و برای مقادیر قابل انتظار یک بستگی زمانی به شکل (ب-۱) ایجاد می‌کنند. در تصویر هایزنبرگ بردار حالت ثابت می‌ماند ولی ویژه بردارهای عملگرهای هایزنبرگ می‌چرخند، نتیجه آن ایجاد یک بستگی زمانی است که با آنچه که توسط (ب-۱) داده شده است یکسان است. در تصویر شرودینگر بردارهای حالت در معادله حرکت شرودینگر، یعنی،

$$\mathcal{H}|\beta, t\rangle_S = i\hbar \frac{d}{dt}|\beta, t\rangle_S \quad (\text{ب-۳ الف})$$

صدق می‌کنند، در حالی که در تصویر هایزنبرگ، عملگرها در معادله حرکت هایزنبرگ، یعنی،

$$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{[\hat{A}_H, \mathcal{H}]}{i\hbar} + \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} \quad (\text{ب-۳ ب})$$

صدق می‌کنند. معادله (ب-۳ ب) از مشتق‌گیری از (ب-۲) به دست می‌آید، جمله آخر طرف راست (ب-۳ ب) شامل هر نوع بستگی صریح زمانی است و به وسیله

$$\frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} = e^{i\mathcal{H}t/\hbar} \frac{\partial \hat{A}_S}{\partial t} e^{-i\mathcal{H}t/\hbar}$$

تعریف می‌شود. دو تصویر فوق به صورت زیر خلاصه می‌شوند

تصویر شرودینگر	تصویر هایزنبرگ
$ \beta, t\rangle_S = e^{-i\mathcal{H}t/\hbar} \beta, 0\rangle$	$ \beta, t\rangle_H =  \beta, 0\rangle$
$\hat{A}_S = \hat{A}(t)$	$\hat{A}_H = e^{i\mathcal{H}t/\hbar}\hat{A}_S e^{-i\mathcal{H}t/\hbar}$
$\mathcal{H} \beta, t\rangle_S = i\hbar \frac{d}{dt} \beta, t\rangle_S$	$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{[\hat{A}_H, \mathcal{H}]}{i\hbar} + \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t}$

تصاویر واسطی بین تصاویر شرودینگر و هایزنبرگ نیز می‌توانند ایجاد شوند. یک

هامیلتونی به شکل  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{V}$  در نظر بگیریم. در عمل،  $\mathcal{H}_0$  معمولاً "نمایانگر هامیلتونی برای سیستمهای چندجسمی ایده‌آل است در صورتی که  $\mathcal{V}$  مربوط به برهم‌کنش بین ذرات است. در نتیجه تصویری که باید گسترش داده شود به تصویر برهم‌کنشی موسوم است. تصویری در نظر بگیرید که در آن عملگرهای منتسب به مشاهده‌پذیرها به‌طریقی شبیه به عملگرهای هایزنبرگ تحول می‌یابند، یعنی،

$$\hat{A}_1 = e^{i\mathcal{H}_0 t/\hbar} \hat{A}_S e^{-i\mathcal{H}_0 t/\hbar} \quad (\text{ب - ۴ الف})$$

این تصویر تصویر هایزنبرگ نیست زیرا در این رابطه  $\mathcal{H}_0$  وارد شده است و نه  $\mathcal{H}$ . اکنون می‌پرسیم، تحول بردار حالت چگونه باید باشد تا این نتایج با (ب-۱) سازگار باشند؟ تحقیق اینکه رفتار آن باید به صورت

$$|\beta, t\rangle_1 = e^{i\mathcal{H}_0 t/\hbar} e^{-i\mathcal{H} t/\hbar} |\beta, 0\rangle \quad (\text{ب - ۴ ب})$$

باشد ساده است، در این مورد داریم

$$\langle A \rangle = \langle \beta, t |_1 \hat{A}_1 | \beta, t \rangle_1$$

که با (ب-۱) سازگار است. توجه کنیم که (ب-۴ ب) می‌تواند به صورت زیر نوشته شود

$$|\beta, t\rangle_1 = e^{i\mathcal{H}_0 t/\hbar} |\beta, t\rangle_S \quad (\text{ب - ۴ ج})$$

معادله حرکت برای عملگرها در تصویر برهم‌کنشی از شکل هایزنبرگ پیروی می‌کند، یعنی

$$\frac{d\hat{A}_1}{dt} = \frac{[\hat{A}_1, \mathcal{H}_0]}{i\hbar} + \frac{\partial \hat{A}_1}{\partial t} \quad (\text{ب - ۵})$$

این رابطه می‌تواند با مشتق‌گیری از (ب-۴ الف) به دست آید.

معادله حرکت برای بردارهای حالت در این تصویر با مشتق‌گیری از (ب-۴ ج) و با

استفاده از (ب-۳ الف) به دست می‌آید. از این نتیجه می‌شود

$$\mathcal{V}_1 |\beta, t\rangle_1 = i\hbar \frac{d}{dt} |\beta, t\rangle_1 \quad (\text{ب - ۶ الف})$$

که در آن

$$\mathcal{V}_1 = e^{i\mathcal{H}_0 t/\hbar} \mathcal{V}_S e^{-i\mathcal{H}_0 t/\hbar} \quad (\text{ب - ۶ ب})$$

در تصویر برهم کنشی، عملگرها برطبق  $\mathcal{H}_0$  تحول می یابند در صورتی که بردارها بر طبق  $\mathcal{P}_1$  تحول می یابند. با این وجود، جواب (ب - ۶ الف) نمی تواند به راحتی پیدا شود زیرا  $\mathcal{P}_1$  در (ب - ۶ ب)، حتی وقتی که  $\mathcal{P}_S$  مستقل از زمان باشد، به زمان بستگی دارد. وقتی برهم کنشها صفر می شوند، تصویر برهم کنشی به تصویر هایزنبرگ تقلیل می یابد. تصویر برهم کنشی، حتی وقتی که  $\mathcal{P}_S$  به طور صریح تابع زمان باشد، نیز معتبر است. گرچه (ب - ۶ الف) نمی تواند به راحتی حل شود، ولی با ضرب کردن هر دو طرف آن در  $dt/i\hbar$ ، انتگرال گیری و اضافه کردن یک مقدار ثابت اولیه، می تواند به یک معادله انتگرالی تبدیل شود. با انجام این عملیات، خواهیم داشت

$$|\beta, t\rangle_1 = |\beta, 0\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \mathcal{P}_1(t') |\beta, t'\rangle_1 dt' \quad (\text{ب} - ۷)$$

در این مرحله، بهتر است که (ب - ۷) را، با استفاده از (ب - ۴ ج) و (ب - ۴ الف)، در تصویر شرودینگر بیان کنیم؛ بدین ترتیب خواهیم داشت

$$e^{i\mathcal{H}_0 t/\hbar} |\beta, t\rangle_S = |\beta, 0\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\mathcal{H}_0 t'/\hbar} \mathcal{P}_S e^{-i\mathcal{H}_0 t'/\hbar} e^{i\mathcal{H}_0 t'/\hbar} |\beta, t'\rangle_S dt'$$

یا، پس از ساده کردن،

$$|\beta, t\rangle_S = e^{-i\mathcal{H}_0 t/\hbar} |\beta, 0\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{-i\mathcal{H}_0(t-t')/\hbar} \mathcal{P}_S(t') |\beta, t'\rangle_S dt' \quad (\text{ب} - ۸)$$

از این به بعد، شاخص پائینی S در تصویر شرودینگر را حذف می کنیم، نماد  $\mathcal{P}(t)$  هر نوع بستگی صریح زمانی در پتانسیل برهم کنشی را شامل می شود. اگر  $\mathcal{P}$  کوچک باشد، یعنی،  $\mathcal{P} \rightarrow \lambda \mathcal{P}$ ، معادله (ب - ۸) می تواند با تکرارهای متوالی حل شود، تقریب مرتبه اول با قراردادن نتیجه مرتبه صفر،  $|\beta, t\rangle = e^{-i\mathcal{H}_0 t/\hbar} |\beta, 0\rangle$ ، در انتگرال به دست می آید که عبارت است از

$$|\beta, t\rangle \simeq e^{-i\mathcal{H}_0 t/\hbar} |\beta, 0\rangle + \frac{\lambda}{i\hbar} \int_0^t e^{-i\mathcal{H}_0(t-t')/\hbar} \mathcal{P}(t') e^{-i\mathcal{H}_0 t'/\hbar} |\beta, 0\rangle dt'$$

یا

$$|\beta, t\rangle = [U^{(0)}(t, 0) + U^{(1)}(t, 0)] |\beta, 0\rangle$$

که در آن

$$O^{(0)}(t, 0) = e^{-i\mathcal{H}_0 t/\hbar}$$

و

$$O^{(1)}(t, 0) = \frac{\lambda}{i\hbar} \int_0^t e^{-i\mathcal{H}_0(t-t')/\hbar} \mathcal{V}(t') e^{-i\mathcal{H}_0 t'/\hbar} dt'$$

این درست همان نتیجه برای تصحیح مرتبه اول عملگر تحول است، که در فصل ۷ مد به استثنای اینکه در اینجا  $t_0$  مساوی با صفر گذاشته شده است. تکرارهای متوالی بالاتر از (ب - ۸) تصحیحات مرتبه بالاتر  $O^{(n)}$  را برای عملگر تحول ایجاد می‌کند.

### مراجع پیشنهادی

- Berestetskii, V. B., Lifshitz, E. M., and Pitaevskii, L. P., "Relativistic Quantum Theory." Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1971.
- Bjorken, J. D., and Drell, S. D., "Relativistic Quantum Fields." McGraw-Hill, New York, 1965.
- Goldstein, H., "Classical Mechanics." Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1950.
- Heitler, W., "Quantum Theory of Radiation," 3rd ed. Oxford Univ. Press, London and New York, 1954.
- Messiah, A., "Quantum Mechanics," Vol. II. Wiley, New York, 1962.
- Schiff, L. I., "Quantum Mechanics," 3rd ed. McGraw-Hill, New York, 1968.
- Yourgrau, W., and Mandelstam, S., "Variational Principles in Dynamics and Quantum Theory," 3rd ed. Saunders, Philadelphia, 1968.



واژه‌نامه  
انگلیسی - فارسی

Adiabatic approximation	تقریب بی‌دررو
Adjoint	الحاقی
Angular momentum	تکانه زاویه‌ای
Canonical transformation	تبدیل بندادی
Closure relation	رابطه بستاری
Commutable	جابه‌جاپذیر
Correspondence principle	اصل تناظر
Covariant formulation	فرمولبندی هموردا
Degeneracy	تبه‌گنی
Dispersion relation	رابطه پاشندگی
Ehrenfest,s theorem	قضیه اهرنفت
Electric dipole approximation	تقریب دو قطبی الکتریکی
Fermi Sea	دریای فرمی
Fermi,s Golden rule	قاعده طلایی فرمی
Feynman diagrams	نمودارهای فاینمن
Gauge transformation	تبدیل پیمانه‌ای
Invariant	ناوردا

Isotropic	همسانگرد
Ladder method	روش نردبانی
Lagrangian formalism	صورتبندی لاگرانژی
Lamb shift	جاب‌جایی لمب
Lowering operator	عملگر پائین‌آورنده
Multiplicity	چندگانگی
observable	مشاهده‌پذیر
Pair Production	آفرینش جفت
Permutation operator	عملگر جایگشت
Perturbation	پیریشیدگی
Phonon	فونون
Poisson, s braket	کروشه پواسن
Projecting operator	عملگر تصویرگر
Quantization	کوانتتش
Quantum defects	نقایص کوانتومی
Quantum Postulate	اصل موضوع کوانتومی
Quasiparticle	شبه ذره
Raising operator	عملگر بالا‌برنده
Secular equation	معادله سده‌ای
Selection rules	قواعد گزینش
Self-consistant field	میدان خودسازگار
Spinor	اسپینور
Stationary state	حالت مانا
Trace of operator	رد عملگر
Transition	گذار
Tunneling	تونل‌زنی
Ultraviolet Catastrophe	فاجعه فرابنفش
Variational method	روش وردشی
Wave - particle duality	دوگانگی موجی - ذره‌ای
W.K.B. approximation	تقریب W.K.B.



واژه‌نامه  
فارسی - انگلیسی

Spinor	اسپینور
Correspondence principle	اصل تناظر
Quantum postulate	اصل موضوع کوانتومی
Pair production	آفرینش جفت
Adjoint	الحاقی
Perturbation	پریشیدگی
Canonical transformation	تبدیل بندادی
Gauge transformation	تبدیل پیمانه‌ای
Degeneracy	تبهگنی
Adiabatic approximation	تقریب بی‌دررو
Electric dipole approximation	تقریب دوقطبی الکتریکی
W.K.B. approximation	تقریب W.K.B.
Angular momentum	تکانه زاویه‌ای
Tunneling	تونل زنی
Commutable	جاب‌جاپذیر
Lamb shift	جاب‌جایی لمب
Multiplicity	چندگانگی
Stationary state	حالت مانا

Fermi sea	دریای فرمی
Wave-particle duality	دوگانگی موجی - ذره‌ای
Closure relation	رابطه بستاری
Dispersion reation	رابطه پاشندگی
Trace of operator	رد عملگر
Ladder methad	روش نردبانی
Variational method	روش وردشی
Quasiparticle	شبه ذره
Lagrangian formalism	صورتبندی لاگرانژی
Raising operator	عملگر بالا برنده
Lowering operator	عملگر پائین آورنده
Projecting oporator	عملگر تصویرگر
Permutation operator	عملگر جایگشت
Ultraviolet catastrophe	فاجعه فرابنفش
Covariant formulation	فرمولبندی هموردا
Phonon	فونون
Fermi,s Golden Rule	قاعده طلایی فرمی
Ehrenfest,s theorem	قضیه اهرنفت
Selection rules	قواعد گزینش
Poisson braket	کروشه پواسن
Quantization	کوانتش
Transition	گذار
observable	مشاهده‌پذیر
Secular equation	معادله سده‌ای
Self-consistent field	میدان خود سازگار
Invariant	ناوردا
Quantum defects	نقایص کوانتومی
Feynman diagrams	نمودارهای فاینمن
Isotropic	همسانگرد
Dispersion relation	

## فهرست راهنما

### (الف)

۱۸۴	نماد گذاریهای طیف نمایی ...	۳۸۱	انرژی ...
۱۸۸	قضیه ویریال برای ...	۳۸۲	برانگیختگی نوری ...
۳۳۴-۳۲۶	آرایش	۳۸۵	خواص ...
۳۶۷	ارتوهلیوم	۳۸۱	نقایص کوانتومی ...
۳۸۸	ارتو هیدروژن	۲۳۶	اثر استارک در هیدروژن
۱۸	آزمایش داویسن - جرمر	۲۱۸	اثر پاشن - پاک
۲۵۴	آزمایش اشترن - گرلاخ	۲۲۵	مدل کلاسیکی برای ...
۴۱۳-۲۱۵	اسپینور	۲۱۹	ویژه تابعها و ویژه مقادیرها برای ...
۱۶	اشعه X و اثر کامپتون	۳۶۶	در ... هلیوم
۲۲	اصل تناظر		اثر زمین
۳۲۹-۳۲۳	اصل پاولی	۳۶۶-۲۴۵-۲۱۷	... غیر عادی
	اصل عدم قطعیت	۱۹۳	... عادی
۷۷	... مختصه - تگانه	۲۴۶-۱۹۳	مدل کلاسیکی برای ...
۴۴۹	... انرژی - زمان	۲۹۹-۱۱۵	اثر رامسور - تاونزند
۷۵	اثبات ...	۱۳	اثر فوتو الکتریکی
۱۳۷	نوسانگر و ...	۱۶	اثر کامپتون
۱۲۵	ذره در یک چاه و ...		اتم هیدروژن
۷۵	اصول موضوع مکانیک کوانتومی	۱۸۶	چگالی احتمال زاویه‌ای برای ...
۳۲۹-۳۲۳	اصل طرد	۱۸۴	تبهگنی در ...
۱۹	اصول موضوع بوهر	۱۸۷	چگالی احتمال شعاعی برای ...
۳۴۳	اعداد اشغال	۴۲۱	حل نسبیتی برای ...
۳۳۷	الکترونها هم ارز	۱۸۵	مدارهای نیمه کلاسیکی برای ...
۴۱۶	آفرینش جفت		

الکترو دینامیک کلاسیکی	امواج جزئی		
تبدیل پیمانه‌ای در ...	تحلیل ...	۴۳۶	۲۹۳
هامیلتونی در ...	تقریب ...	۴۳۹-۴۳۲	۲۹۷
لاگرانژی در ...	دامنه برحسب ...	۴۳۱	۲۹۶
قانون لورنتس در ...	قضیه نوری برای ...	۴۳۴	۲۹۷
معادلات ماکسول در ...	مقطع مؤثر ...	۴۳۶	۲۹۶
پتانسیل نرده‌ای در ...	آیکونال	۴۳۵	۴۶۴
پتانسیل برداری در ...	( ب )	۴۳۵	
الکترو دینامیک کوانتومی	بردار برا		۵۴
تقریب دو قطبی در ...	بردار کت	۴۴۶	۵۴
پهن‌شدگی طبیعی و ...	بردار انتقال تگانه	۴۵۱	۲۳۸
پهنای طبیعی تراز و ...	بردار جریان احتمال	۴۵۱	۲۷۸-۱۰۹-۹۶
جذب و گسیل در ...	بردار حالت	۴۴۷	۷۲
چگالی حالتها در ...	برگشت پذیری میکروسکوپیکی	۴۴۵	۲۵۷-۲۵۰
فوتونها	برهمکنش اسپین - مدار	۴۴۹	۴۲۱-۲۳۹-۲۱۵
گذارهای تابشی و قاعده طلایی در ...	بهنجارش احتمال	۴۴۵	۷۲
الحاقی	( پ )		
... یک عملگر	پاد جابه‌جاگر	۵۸	۱۲۳
... یک نرده‌ای	پایه کامل	۵۵	۶۸
... یک بردار	پتانسیل شیمیایی	۵۵	۳۴۵
آمار	پتانسیل الکترومغناطیسی		۳۹
... بوز - اینشتین	پتانسیل گریز از مرکز	۳۱۶	۳۸۶
... فرمی - دیراک	پتانسیل مرس	۳۱۶	۳۸۵
... ماکسول - بولتزمن	پتانسیل مختلط	۳۱۶-۱۰	۹۷
... کوانتومی	پتانسیلهای وابسته به سرعت	۳۴۴	۳۸
انرژی	پاراهیدروژن		۳۸۸
... تبدالی	پاراهلیوم	۳۹۲	۳۶۷
... حالت پایه هیدروژن	پایه راست هنجار	۱۸۴-۲۱	۵۱
... ساختار ریز	پارینه	۴۲۳-۴۱۱-۲۴۳	
... سکون	رابطه جابه‌جایی برای ...	۴۷	۱۲۳
... پتانسیل	مسئله نیروی مرکزی و ...	۲۸	۱۸۸
... نقطه صفر	مشخصه‌های انعکاسی ...	۱۳۷-۱۳۴	۱۲۳
انتشاردهنده و تحول یک حالت	ویژه تابعهای ...	۹۵	۱۲۴
انتگرال تبدالی	پراکندگی راترفورد	۳۹۲	۲۸۰-۲۷۶
انتگرال فاز	پراکندگی تامسون	۴۶۲	۱۶

۲۴۷	پیشیدگی وابسته به زمان	۳۵۵	پراکندگی S - موج
۴۴۳	الکترو دینامیک کوانتومی و ...		پراکندگی در یک بعد
۲۵۰	آهنگ گذار	۱۱۵	اثر رامسور برای ...
۲۵۴	چگالی حالتها	۱۴۴	تونل زنی در ...
۲۵۳	حالتهای پیوستار و ...	۱۱۳	حد کلاسیکی برای ...
۲۴۷	عملگر تحول و ...	۲۷۳-۲۹۰	پراکندگی کشان
۲۵۶	... هماهنگ	۳۵۶	پراکندگی ناکشان
۲۵۴-۲۵۱	قاعده طلایی فرمی	۲۷۶-۲۸۱	پراکندگی کولنی
۲۴۹	گذارهای القاء شده به وسیله ...	۳۶۲	پراکندگی مات
۲۵۷	گذارهای تابشی در هیدروژن	۲۷۳	پراکندگی در سه بعد (کلاسیکی)
۴۱۶-۳۲۳	پوزیترون ...	۲۷۶	... راترفورد
۳۲۳	پوزیترونیم	۲۷۴	مقطع مؤثر ...
۴۵۱	پهن شدگی طبیعی	۲۷۸	پراکندگی در سه بعد (کوانتومی)
۴۵۱	پهن شدگی خط	۲۸۸	تقریب بورن برای ...
۴۵۱	پهنای طبیعی تراز	۲۸۶	تابع گرین برای ...
	پیمانه	۳۵۶	جذب در ...
۴۳۶	تبدیل پیمانه‌ای	۲۸۵	... راترفورد
۴۳۷	... تابشی	۲۷۹	دامنه ...
۴۳۷	... عرضی	۲۷۷	روش مانای ...
۴۳۷	... کولنی	۲۷۸	(شرط) مجانبی در ...
۴۳۶	... لورنتسی	۳۶۱	ذرات تمیز ناپذیر و ...
۳۹۳-۳۸۹	پیوند کووالانت	۳۵۷	... ناکشان
	( ت )	۲۷۷	... مانا
۱۵ - ۶ - ۳	تابش جسم سیاه	۳۵۳	... و گذارها
۲۵۳-۸۶	تابع دلتا	۳۵۳	قاعده طلایی فرمی
۲۸۳	تابع گاما	۲۷۹	مقطع مؤثر ...
	تابع مولد	۲۲۳	پیشیدگی مستقل از زمان
۱۳۴	... چند جمله‌ایهای هرمیت	۲۴۴	اثر غیر عادی زمین و ...
۱۷۲	... چند جمله‌ایهای لوزاندر	۲۳۶	اثر استارک در هیدروژن
۱۸۱	... چند جمله‌ایهای لاگر	۲۳۹	برهم کنش اسپین - مدار و ساختار ریز
۲۸۶	تابع گرین برای پراکندگی	۲۲۳	... تبهگن
۴۴۷	تابش همسانگرد	۲۲۴	... نا تبهگن
۷۵	تابع عملگری	۲۲۴	روش رالی - شرو دینگر
۴۳۹	تابش	۲۳۵	نظریه مرتبه دوم
۳	... جسم سیاه	۲۲۸-۲۳۱	نوسانگر ناهماهنگ و ...

کاواک و ...	۶	... میدان مرکزی	۳۷۶
فوتونها	۴۲۲	خاصیت اتم در ...	۳۷۸
قطبش ...	۴۴۰	معادله شرودینگر برای ...	۳۷۳
کوانتش ...	۴۴۱	تقریب W.K.B.	
گسترش موج تخت برای ...	۴۳۹	حالت‌های مقید و ...	۴۶۰
ماهیت عرضی ...	۴۴۱	انتگرال فاز	۳۸۴
نوسانگرها و ...	۴۳۹	فرمولهای رابط برای ...	۴۵۹
ویژه حالت‌های ...	۴۳۹	معادله هامیلتون - ژاکوبی	۴۶۲
تابع حالت	۸۷ - ۹۱ - ۳۱۸	تکانه تعمیم یافته	۳۵
تابع حرارتی	۷	تکانه زاویه‌ای	
تار مرتعش		جمع ...	۱۷۴
هامیلتونی ...	۴۳۲	تعریف کلاسیکی ...	۳۰
لاگرانژی ...	۴۳۰	تبهگنی در ...	۱۷۴
تابع کار	۱۳	روش نردبانی برای ...	۱۹۵
تبهگنی	۱۱۶ - ۱۵۳ - ۳۴۱	جابه‌جاگر برای ...	۱۷۳
تبهگنی تصادفی	۱۷۷ - ۱۷۹	کوانتش ...	۱۶۹
تبهگنی مد	۷	... اسپینی	۲۰۳
تبدیلات لورنتس	۴۰۷	... کلی	۲۰۹
تراز فرمی	۳۴۴ - ۳۴۸ - ۳۷۰	مدل برداری ...	۲۱۳
تراکم بوز - اینشتین	۳۴۸	ویژه تابعها و ویژه مقدارهای ...	۱۷۰
تراکم اینشتینی	۳۴۸	مسئله نیروی مرکزی و ...	۱۷۳
تبدیل بندادی	۴۳ - ۴۵	تکانه خطی	۲۹
تبدیلات لوژاندر	۴۱ - ۴۳۶	تکانه نسبیتی	۴۶
تبدیل به مختصات بهنجار		تکانه شعاعی	۱۶۹
... مختصات و تکانه‌ها	۳۹۵	تکانه زاویه‌ای اسپینی	
... و رابطه پاشندگی	۳۹۷	تجربه اشترن - گرلاخ	۲۰۴
... و انرژیهای کوانتیده	۳۹۸	فرضیه گود شمیت و اوهلنیک	۲۰۴
... و فرکانسهای بهنجار	۳۹۶	ماتریسهای پاولی برای ...	۲۰۷
تحول یک حالت	۸۰ - ۸۳	مسئله نیروی مرکزی و ...	۲۱۱ - ۲۰۸
ترکیب L-S	۳۳۷	ویژه مقدارها و ویژه بردارهای ...	۲۰۸
تشدید	۳۰۰	ویژگیهای تبدیلی ...	۲۰۹
تقریب بی‌دررو	۳۸۲	تصویر برهم‌کنشی	۴۶۷ - ۸۰
تقریب بورن	۲۸۸	تصویر شرودینگر	۴۶۶ - ۷۹
تقریب دوقطبی الکتریکی	۲۵۸ - ۴۶۶	تصویر هایزنبرگ	۴۶۵ - ۸۰
تقریب هارتری - فوک - اسلاتر		توابع وابسته لوژاندر	۱۷۰

۱۸۱-۱۷۷	چند جمله‌ایهای لاگر	۲۸۷	تکرار یک معادله انتگرالی
۱۷۱	چند جمله‌ایهای لوژاندر	۳۲۷	تمیزناپذیری
۳۳۹	چند گانگی (تعدد)	۲۶۱	توازن دقیق
	چند جمله‌ایهای هرمیت	۳۴۷	توزیع فرمی - دیراک
۱۱	خواص ...		(ث)
۱۳۲	فرمول بازگشتی برای ...	۵	ثابت استفان - بولتزمن
۸۷	چگالی احتمال	۳۴۵-۱۰	ثابت بولتزمن
۹-۴	چگالی طیفی	۱۱	ثابت پلانک
۴۴۹-۲۶۲-۱۲	چگالی طیفی پلانک	۲۲-۱۸	ثابت ریدبرگ
۹	چگالی مد	۳۰	ثابت حرکت
	چگالی حالتها	۴۲۳-۴۱۰	ثابت ساختار ریز
۱۶۱	ذره آزاد و ...		(ج)
۲۵۴	قاعده طلایی و ...	۶۶-۶۰	جابه‌جاگر
	(ح)	۲۹۵	جابه‌جایی فاز
۳۴۵	حالت خالص	۴۲۴-۲۴۳	جابه‌جایی لمب
۸۳	حالت مانا	۴۱۲-۴۶	جایگذاری کمینه‌ای
۳۴۵	حالت مخلوط	۱۰۷-۹۶	جریان احتمال
۲۷۷-۱۰۷	حالت‌های پراکندگی	۳۷۶-۳۶۲	جمله تبدیلی
۱۱۶	حالت‌های مقید در یک بعد	۴۲۵-۴۲۱-۲۴۳	جمله داروین
۱۱۵- ۲۳-۱۹	حد کلاسیکی		جذب
۲۱۶	حرکت تقدیمی توماس	۳۰۶	ذرات ...
۱۹۴	حرکت تقدیمی لارمور	۴۴۸-۲۵۷	... القایی
	(د)	۴۴۸-۲۶۱	ضریب اینشتین برای ...
۲۸۹	دامنه بورن		(چ)
۳۳۲-۳۲۹	دترمینان اسلاتر		چاه منتهای
۵۹	دترمینان یک عملگر	۱۲۹	بستگی با چاه نامتناهی
۳۳	درجه آزادی	۱۲۶	ویژه تابعها و ویژه مقادیر ...
۴۱۶	دریای فرمی	۱۲۷	ویژگیهای تقارنی ...
۴۵	دلتای کرونکر		چاه نامتناهی
۳۵۰	دمای تبه‌گنی بوز - اینشتین	۱۲۰	اصل عدم قطعیت برای ...
	دوقطبی مغناطیسی	۱۲۰	ویژه توابع و ویژه مقادیر ...
۱۹۱	... مداری		چاه متقارن
۲۱۵-۲۰۳	... اسپینی	۱۲۰	ویژه بردارها و ویژه مقدارهای ...
۱۹	دوگانگی موجی - ذره‌ای	۱۲۲	مشخصه‌های ...
۷۸	دینامیک کوانتومی	۵	چرخه کارنو

۱۱۱	سد مستطیلی	۴۶	دینامیک نسبیتی
۲۲	سری هاشن		( ذ )
۲۲	سری بالمر		ذره آزاد
۲۸۷	سری بورن	۱۵۵	بهنجارش برای ...
۲۲	سری لیمن	۱۷۶-۱۵۶	تبهگنی برای ...
	ساختار ریز	۱۵۷-۱۰۹	جریان احتمال ...
۲۴۳	معادله دیراک و ...	۱۰۸	... در یک بعد
۴۱۰	معادله کلاین - گوردون و ...	۱۷۵-۱۵۴	... در سه بعد
۲۴۳	فرمول دیراک برای ...	۴۱۳	... نسبیتی
	( ش )	۱۵۷	موج دو بروی و ...
۳۵۵	شبه ذرات	۱۷۵-۱۵۵	ویژه تابعها و ویژه مقدارهای ...
۳۹۳	شبکه خطی		ذره در یک جعبه
۴۴۰-۷	شرایط مرزی برای E و B	۱۶۰	ارتباط با ذره آزاد و بهنجارش جعبه‌ای
۳۹۷	شرایط مرزی دوره‌ای	۱۵۹	تبهگنی برای ...
۲۹۴-۲۸۵-۲۷۸	شرط مجانبی برای پراکندگی	۱۶۱	چگالی حالتها برای ...
۱۸۳-۲۱	شعاع بوهمر	۱۵۸	ویژه تابعها و ویژه مقدارهای ...
	( ض )		( ر )
۳۴۲-۳۳۸-۲۱۳	ضرایب کلبش - گوردان	۸۷-۷۰	رابطه بستاری (کامل بودن)
۵۴-۵۲	ضرب داخلی	۳۹۷	رابطه پاشندگی
۶۸	ضرب دیادیک	۱۱۷	رنسکین
۳۴۳-۳۱۸-۲۰۷	ضرب مستقیم دیراک		روابط جابه‌جایی
۸۹	ضرب داخلی بردارهای حالت	۲۰۵-۱۹۴-۱۷۳	... تکانه‌های زاویه‌ای
۱۱۱	ضریب بازتاب	۲۷۱-۶۱	... مختصات و تکانه‌ها
۱۱۱	ضریب عبور	۴۴۱-۴۳۳	... میدانها
۲۴۶	ضریب لانده " g "	۲۱۶	روش رالی - ریتس
	( ط )		روش میدان خود - سازگار
	طیف	۳۷۳	انرژی همبستگی در ...
۶۰	... یک عملگر	۳۷۴	پتانسیل مؤثر برای ...
۱۰۶	... یک هامیلتونی		رد
۱۰۶-۸۶	طیف پیوسته	۵۹	... یک عملگر
۴۵۰	طول عمر	۸۴	... یک جابه‌جاگر
۱۷	طول موج کامپتون		روش نردبانی
	( ع )	۱۵۹	تکانه زاویه‌ای و ...
۱۱۰	عبور از سد	۱۴۰	نوسانگر هماهنگ و ...
۷۴	عدم قطعیت		( س )



۱۷	فرمول کامیتون فرمیونها	۳۲۸	عملگر یاد متقارن ساز عملگر بالابرنده
۳۲۲	تمیزناپذیری ...	۱۹۷	... تکانه زاویه‌ای
۳۲۹-۳۲۳	اصل پاولی برای ...	۱۴۳	... نوسانگر
۳۲۳	اسپین ...		عملگر پائین آورنده
۳۲۹	دترمینان اسلاتر برای ...	۱۹۷	... تکانه زاویه‌ای
۳۲۳	تقارن حالت‌های ...	۱۴۳	... نوسانگر
	( ق )	۶۳	عملگر تبه‌گن
۲۴۲	قاعده بازه لانده		عملگر تحول
۲۶۰-۱۱-۱۰	قانون بولتزمن	۸۰	تعریف ...
۱۲-۵	قانون جابه‌جایی	۴۶۹-۲۴۸	بسط به سری ...
۴۴۴-۳۰۳-۲۵۴-۲۵۱	قاعده طلایی فرمی	۲۴۷-۸۱	معادله انتگرالی برای ...
۶۵	قطری کردن	۳۲۰	عملگر جایگشت
۳۶۵-۳۵۲	قواعد هاند	۳۲۱	ویژه حالت‌های ...
	قانون دوم نیوتن	۳۲۰	ویژگی‌های تقارنی ...
۲۹	... برای یک ذره	۳۲۱	ویژگی‌های جابه‌جاپذیری ...
۳۱۴	... برای چند ذره	۳۴۵	عملگر چگالی
۴۶	... نسبیته	۵۶	عملگر خطی
۱۲-۵	قانون استفان - بولتزمن	۶۷	عملگر تصویرگر
۱۲-۵	قانون وین	۳۲۸	عملگر متقارن ساز
۴۰۲	قاعده جمع نوسانگر	۶۳	عملگر ناتبهن
۲۷۰	قطبش پذیری	۵۷	عملگر همانی
۴۴۰-۸	قطبش نور	۵۸	عملگر هرمیتی
۷۸	قضیه اهرنفتست برای نوسانگر	۵۸	عملگر یکانی و چرخش
۲۹۷	قضیه نوری		( ف )
	قضیه وبریال	۱۱	فاجعه فرابنفش
۴۸	... کلاسیکی	۴۴۹-۱۴	فوتونها
۱۳۷	... نوسانگر و ...	۳۹۸	فونونها
۱۴۹	... کوانتومی	۸	فضای اعداد صحیح برای مدهای تابشی
۳۶۶-۲۵۸	قواعد گزینش	۸۵	فضای هیلبرت
۴۶۲	قواعد کوانتتش ویلسون - سومرفلد	۴۵۸	فرمولهای رابط
	( ک )	۱۳۵	فرمول رودریگز
۳۸۷	کشیدگی مرکز گریزی	۱۸	فرمول رید برگ
	کروشه پواسن	۱۷	فرمول کلاین نیشینا
۴۵	تکانه زاویه‌ای و ...	۴۰۷	فرمولبندی هموردا

مختصات استوانه‌ای	۴۵	... مختصات و تکانها
عنصر حجم در ...	۱۶۴	( گ )
لاپلاسی در ...	۱۶۴	گاز ایده‌آل
مختصات کروی	۳۴۴	... بوز - اینشتین
عنصر حجم در ...	۳۴۴	... فرمی - دیراک
لاپلاسی در ...	۳۴۴	اعداد اشغال در ...
مختصات سهموی	۳۴۴	نمایش برای ...
عنصر حجم در ...	۲۸۱	گاز بی‌اثر
لاپلاسی در ...	۲۸۰	گذارها
مختصات مرکز جرمی	۳۵۶	دامنه ...
پراکندگی در ...	۳۵۹	... تابشی
تبدیل به ...	۳۵۶	... پراکندگی
جرم کاهش یافته برای ...	۳۵۷	گذارهای تابشی
مختصات منحنی‌الخط	۴۴۳	الکترودینامیک کوانتومی و ...
ضرایب متریک در ...	۱۶۳	تقریب دوقطبی الکتریکی برای ...
عنصر حجم در ...	۱۶۳	قواعد گزینش برای ...
لاپلاسی در ...	۱۶۳	... ممنوع
مدل برداری	۳۳۷	گسیل تابش
مدل توماس - فرمی	۴۴۸-۲۶۱	ضرایب اینشتین در ...
اتمهای پیچیده و ...	۳۶۹	... القایی
تابع ...	۳۷۱	... خود به‌خودی
شرایط مرزی برای ...	۳۷۱	گشتاور دوقطبی الکتریکی
متغیر ...	۳۷۱	( ل )
معادله ...	۳۷۱	لاگرانژی
مدهای مشخصه	۴۴۱-۶	الکترودینامیک کوانتومی و ...
مسئله کولنی	۴۵	... الکترو مغناطیسی
پراکندگی در ...	۲۷۹-۲۷۶	میدانها و ...
چند جمله‌ایهای لاگدر در ...	۱۸۱-۱۷۷	... یک ذره‌ای
کوانتش ...	۱۷۹	... چند ذره‌ای
معادله لاگدر در ...	۱۸۱	... نسبیتی
ویژه مقدارها و ویژه بردارها در ...	۱۸۳	( م )
مسئله دو جسمی	۳۵۶	ماگنتون بوهر
مسئله کهلر	۳۷-۳۲	مجموعه بندادی بزرگ
مشاهده‌پذیرهای عملگری سازگار	۷۵	متوسط مجموعه‌ای
مشاهده‌پذیر معین (خوش تعریف)	۷۴	مختصات چرخه‌ای (قابل اغماض)

۷۹	معادله شرودینگر برای حرکت		معادله ابر هندسی
۹۳	معادله موج شرودینگر	۲۸۴	پراکندگی راتر فورد و ...
۹۶	معادله پیوستگی در احتمال	۲۸۲	حل مجانبی ...
۶۱	معادله سده‌ای	۱۸۵	مسئله کولنی و ...
۷۳	مقدار قابل انتظار	۱۸۱	معادله لاگر و ...
۲۸۹	معیار بورن	۱۷۷	نوسانگر همسانگرد و ...
۳۸	مقاطع مخروطی برای مسئله کپلر		معادله دیراک
۲۷۴	مقطع مؤثر	۴۱۵	انرژیهای منفی برای ...
۲۸۸	مقطع مؤثر بورن	۴۱۳	ذرات آزاد و ...
	مولد	۴۲۳	ساختار ریز و ...
۲۰۹	... دورانها	۴۱۲	ماتریسهای ...
۹۵	... انتقالها	۴۱۹	مغناطیس اسپینی و ...
	مکانیک موجی	۴۲۱	هیدرژن و ...
۹۳	عناصر ماتریسی در ...	۴۱۴	ویژه مقدار انرژی در ...
۳۱۷-۹۲	عملگر تکانه در ...	۴۱۲	... وابسته به زمان
۲۵	مکانیک نیوتنی	۲۸۷	معادله انتگرالی بورن
	مولکول هیدرژن	۴۶۴	معادله آیکونال
۳۹۱	پتانسیل مولکولی برای ...	۷	معادلات موج الکترومغناطیسی
۳۹۵	معادله شرودینگر برای ...		معادلات هامیلتون
۳۸۹	نظریه لندن - هایتلر در مورد ...	۴۲	سیستم یک ذره‌ای و ...
۳۹۵	ویژه تابعها و ویژه مقدارهای ...	۴۳۵	سیستم چند ذره‌ای و ...
	مولکولهای دو اتمی	۴۳۲	میدانها و ...
۳۸۸	تقارن و هم هسته‌ای ...	۱۳۱	معادله دیفرانسیل هرمیت
۳۸۴	تقریب بی‌دررو برای ...		معادله کلاین - گوردون
۳۸۶	پتانسیل مولکولی ...	۴۵۹	معادله شرودینگر و ...
۳۸۴	معادله الکترونی برای ...	۴۱۵	ویژه توابع و ویژه مقادیر ...
۳۸۳	معادله شرودینگر برای ...	۴۱۵	ویژه مقدار انرژی ...
۳۸۶	معادله هسته‌ای برای ...		معادلات لاگرانژ
۳۸۷	ویژه تابعها و ویژه مقدارهای ...	۳۴	سیستم یک ذره‌ای و ...
۳۸۸	مولکولهای هم هسته	۳۱۴	سیستم چند ذره‌ای و ...
	میدانهای کلاسیکی	۴۳۱	میدانها و ...
۴۳۴	الکترودینامیک و ...	۱۸۱-۱۷۷	معادله لاگر
۴۳۲	لاگرانژی برای ...	۱۷۵	معادله وابسته لوژاندر
۴۳۱	معادلات لاگرانژ برای ...	۴۳۴	معادلات ماکسول
۴۳۲	معادلات هامیلتون برای ...	۱۵	معادله فوتوالکتریکی

۴۳۲	هامیلتونی برای	عناصر ماتریسی برای ...	۱۳۵-۱۳۶
	میدانهای کوانتومی	ویژه تابعها و ویژه مقدارهای ...	۱۳۵
۴۳۳	قواعد جابه‌جایی برای ...	نوسانگر همسانگرد	
۴۳۴	مسئله ویژه مقداری برای ...	تپه‌گنی تصادفی و ...	۱۷۷
	( ن )	کوانتش ...	۱۳۳-۱۷۸
۷۷	ناسازگاری مکان و تکانه	معادله ابر هندسی برای ...	۱۷۷
۴۱۷	نابودی زوج	ویژه تابعها و ویژه مقدارهای ...	۱۶۲-۱۷۸
۷۵	نامساوی شوارتز	نوسانگر ناهمسانگرد	
۳۸۱	نقایص کوانتومی	تقارن و تپه‌گنی در ...	۱۶۲
۴۵۷	نقاط بازگشت	ویژه تابعها و ویژه مقدارهای ...	۱۶۲
۱۹۱	نسبت ژیرو-مغناطیسی	نیروهای پایستار	۳۵
۱۹	نظریه بوهر برای هیدروژن	نیروی تعمیم یافته	۳۵
۲۳۲	نظریه پریشیدگی تپه‌گن	نیروی لختی	۳۲
۴۱۶	نظریه دیراک در مورد الکترون‌ها و حفره‌ها	نیروهای وابسته به سرعت	۲۸
۱۴	نظریه کوانتومی اینشتین از نور	نیروهای مرکزی	
۱۱	نظریه پلانک	اثر عادی‌زیمن و حرکت تقدیمی لارمور در ...	۱۹۳
۱۵	نظریه رالی جینز	اثر غیرعادی زیمن در ...	۲۱۸-۲۴۴
۴۳۵	نظریه کلاسیکی میدانها	اثر پاشن - پاک برای ...	۲۱۸
۴۴	نظریه هامیلتون ژاکوبی	پارپته و ...	۱۸۸
۸۸	نمایش تکانه‌ای	تکانه زاویه‌ای اسپینی و ...	۲۵۸-۲۱۵
۳۴۴	نمایش N	جابه‌جاییهای انرژی در یک میدان	
	نمایش ماتریسی	مغناطیسی غیر یکنواخت	۱۹۵-۲۴۴
	عملگرها و ...	جدایی متغیرها برای ...	۱۶۵
	بردارها و ...	معادله شرودینگر برای ...	۱۶۵
۳۱۸-۸۷	نمایش مختصای	ویژه تابعها و ویژه مقدارها برای ...	۱۶۸-۱۷۵-۲۴۴
۳۵۶	نمودارهای فاینمن	( و )	
	نوسانگر هماهنگ	وارون یک عملگر	۵۸
۱۳۸	انتشاردهنده برای ...	ویژه پایه یک عملگر	۶۵
۳۱۷	اصل عدم قطعیت برای ...	ویژه اسپینور	۲۵۸
۱۳۷-۱۳۴	انرژی نقطه صفر ...	ویژه مقدارها	۶۵
۱۳۸	تناظر کلاسیکی در ...	عملگرهای هرمیتی و ...	۶۲
۱۳۸	حالت‌های غیرمانای ...	مشاهده پذیرها و ...	۷۱
۱۴۵	روش نردبانی در ...	ویژه تابعها	۸۹
۱۳۵	خواص ویژه حالت‌های ...	ویژه بردارها	
۱۴۳	عملگر بالابرنده و پائین آورنده در ...		

۳۳۹	چندگانگی در ...	۶۶	جابه‌جاگر و ...
۳۳۸	ضرایب کلیش - گوردان در ...	۶۲	عملگرهای هرمیتی و ...
۳۳۹	طبقه‌بندی حالتها در ...		( ه )
۳۳۲	ویژه تابعها و ویژه مقدارهای ...	۳۱۶	هالوژنها
	هلیوم واقعی		هامیلتونی
۳۶۳	انرژی و ویژه تابعهای ...	۴۳۹-۴۳۶	الکترو دینامیک کلاسیکی و ...
۳۶۵	چندگانگی در ...	۴۳۳	میدانها و ...
۳۶۷	روش وردشی برای ...	۴۱	... یک ذره‌ای
۳۶۵	قاعده هاند برای ...	۳۱۶	... چند ذره‌ای
۳۶۴	طبقه‌بندی حالتها در ...	۴۶	... نسبیتی
۳۶۶	گذارهای تابشی در ...		هامیلتونی الکترومغناطیسی
۳۶۳	نظریه پیرشیدگی برای ...	۴۲	... غیرنسبیتی
۱۷۲	هماهنگ‌کروی	۴۶	... نسبیتی
	همبستگی		هلیوم ایده‌آل
۳۷۳-۳۱۵	... دینامیکی	۳۳۵	آرایش در ...
۳۲۹-۳۱۵	... آمار	۳۳۷	ترکیب S - L برای ...
۵۵	هنجاریک بردار	۳۴۱	تهنگنی در ...



*Ferdowsi University of Mashhad*

*Publication No: 107*

# THE FOUNDATIONS OF QUANTUM THEORY

**SOL WIEDER**

*Fairleigh Dickinson University*

Translated

by

**JAAFAR GOODARZI**

*Ferdowsi University Press*

*1989*