www.arsanjan.blogfa.com

۱. دستگاههای متشکل از ذرات یکسان با اسپین نیم فرد (یعنی ۱/۲، ۳/۵، ۵/۲، ...) با توابع موج پادمتقارن توصیف می‌شوند. این نوع ذرات را فرمیون می‌نامند. فرمیونها از آمار فرمی-دیراک پیروی می‌کنند.

۲. دستگاههای متشکل از ذرات یکسان با اسپین درست (یعنی ۰، ۱، ۲، ...) با توابع موج پادمتقارن توصیف می‌شوند. این ذرات بوزون نامیده می‌شوند و از آمار بوز-اینشتین پیروی می‌کنند. ما بیشتر با الکترونها، پروتونها و نوترونها که اسپین ۱/۲ دارند و با بوزونهای اسپین ۰، که بدون نشان اسپینی هستند، سروکار داریم.

قانون بالا به حالتهای N ذره‌ای گسترش می‌یابد. برای دستگاهی متشکل از N فرمیون یکسان، تابع‌موج تحت تعویض هر جفت ذره پادمتقارن است. برای مثال، یک تابع‌موج سه ذره‌ای، که درست پادمتقارن شده است، به‌صورت زیر است

$$\psi^{(A)}(1,2,3) = \frac{1}{N_{3a}}[\psi(1,2,3) - \psi(2,1,3) + \psi(2,3,1) - \psi(3,2,1) + \psi(3,1,2) - \psi(1,3,2)] \qquad (۴۹\text{-}۸)$$

در حالی‌که تابع‌موج سه بوزون یکسان عبارت است از

$$\psi^{(S)}(1,2,3) = \frac{1}{N_{3S}}[\psi(1,2,3) + \psi(2,1,3) + \psi(2,3,1) + \psi(3,2,1) + \psi(3,1,2) + \psi(1,3,2] \qquad (۵۰\text{-}۸)$$

باید تأکید کنیم که برای بیشتر از دو ذرهٔ یکسان اصولاً می‌توان تقارن آمیخته داشت: به‌عنوان مثال، تابع‌موج تحت تبادلهای (۱,۲) و (۱,۳) پادمتقارن اما تحت تبادل (۲,۳) متقارن است. اما اصل پاؤلی این حالتهای متقارن آمیخته را رد می‌کند.

N فرمیون در یک چاه پتانسیل

اکنون یک مورد خاص بسیار جالب توجه را بررسی می‌کنیم که در آن N فرمیون با یکدیگر برهم‌کنش ندارند اما با یک پتانسیل مشترک برهم‌کنش می‌کنند. در این مورد داریم

$$H = \sum_{i=1}^{N} H_i \qquad (۵۱\text{-}۸)$$

که در آن

$$H_i = \frac{p_i^2}{2m} + V(x_i) \qquad (۵۲\text{-}۸)$$

www.arsanjan.blogfa.com

ویژه‌حالتهای هامیلتونی تک‌ذره‌ای را با $u_{E\sigma_k}(x_k)$ نشان می‌دهیم:

$$H_k u_{E\sigma_k}(x_k) = E_k u_{E\sigma_k}(x_k) \qquad (۵۳\text{ـ}۸)$$

واضح است که به‌ازای هر مقدار E_k دو مقدار ممکن برای نشان اسپینی σ_k داریم.
جواب معادلهٔ

$$Hu_E(۱, ۲, \dots, N) = Eu_E(۱, ۲, \dots, N) \qquad (۵۴\text{ـ}۸)$$

عبارت است از

$$u_E(۱, ۲, ۳, \dots, N) = u_{E_۱\sigma_۱}(x_۱)u_{E_۲\sigma_۲}(x_۲), \dots, u_{E_N\sigma_N}(x_N) \qquad (۵۵\text{ـ}۸)$$

که با حذف نشانهای σ_i که با E_i همراه هستند، آن‌را به‌صورت زیر می‌نویسیم

$$u_E(۱, ۲, ۳, \dots, N) = u_{E_۱}(x_۱)u_{E_۲}(x_۲), \dots, u_{E_N}(x_N) \qquad (۵۶\text{ـ}۸)$$

همچنین داریم

$$E = E_۱ + E_۲ + \cdots + E_N \qquad (۵۷\text{ـ}۸)$$

اکنون باید تابع موج ۸ـ۵۶ را پادمتقارن کنیم. اگر تنها دو ذره داشته باشیم، بدیهی است که

$$u^{(A)}(۱, ۲) = \frac{۱}{\sqrt{۲}}[u_{E_۱}(x_۱)u_{E_۲}(x_۲) - u_{E_۱}(x_۲)u_{E_۲}(x_۱)] \qquad (۵۸\text{ـ}۸)$$

با سه ذره، تابع‌موج پادمتقارن شده به‌صورت زیر است

$$\begin{aligned} u^{(A)}(۱, ۲, ۳) = \frac{۱}{\sqrt{۶}}[&u_{E_۱}(x_۱)u_{E_۲}(x_۲)u_{E_۳}(x_۳) - u_{E_۱}(x_۲)u_{E_۲}(x_۱)u_{E_۳}(x_۳) \\ &+ u_{E_۱}(x_۲)u_{E_۲}(x_۳)u_{E_۳}(x_۱) - u_{E_۱}(x_۳)u_{E_۲}(x_۲)u_{E_۳}(x_۱) \\ &+ u_{E_۱}(x_۳)u_{E_۲}(x_۱)u_{E_۳}(x_۲) - u_{E_۱}(x_۱)u_{E_۲}(x_۳)u_{E_۳}(x_۲)] \end{aligned} \qquad (۵۹\text{ـ}۸)$$

www.arsanjan.blogfa.com

برای N ذره، جواب را می‌توان در قالب یک دترمینان، که دترمینان اسلیتر نامیده می‌شود، نوشت:[۱]

$$u^{(A)}(۱,۲,\ldots,N)=\frac{۱}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} u_{E_۱}(x_۱) & u_{E_۱}(x_۲) & \cdots & u_{E_۱}(x_N) \\ u_{E_۲}(x_۱) & u_{E_۲}(x_۲) & \cdots & u_{E_۲}(x_N) \\ \vdots & & & \\ u_{E_N}(x_۱) & u_{E_N}(x_۲) & \cdots & u_{E_N}(x_N) \end{vmatrix} \qquad (۶۰_۸)$$

توجه کنید که در سه معادلهٔ بالا نشان σ_k را که با E_k همراه است حذف کرده‌ایم. بدیهی است که تعویض دو ذره به معنای تعویض دو ستون در این دترمینان است و این به‌نوبهٔ خود باعث تغییر علامت دترمینان می‌شود. اگر دو الکترون در ویژه‌حالت انرژی یکسانی باشند، به‌عنوان مثال $E_۱=E_۲$، و اگر در یک حالت اسپینی باشند، یعنی $\sigma_۱=\sigma_۲$، آنگاه دترمینان به‌ازای $x_۱=x_۲$ صفر می‌شود، یعنی این دو الکترون نمی‌توانند در یک مکان باشند. بدین‌ترتیب، شرط پادتقارن عامل ایجاد یک برهم‌کنش مؤثر بین دو فرمیون است: می‌بینیم که دو ذره از این نوع می‌خواهند از یکدیگر دور بمانند، زیرا وقتی فاصلهٔ بین آنها به صفر میل می‌کند تابع‌موج مشترک صفر می‌شود. بنابراین، حتی ذرات بدون برهم‌کنش به‌گونه‌ای رفتار می‌کنند که انگار یک برهم‌کنش دافعه میان آنها وجود دارد. خواهیم دید که مجموعهٔ کامل مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده برای الکترونها شامل یک مشاهده‌پذیر اضافی دومقداری وابسته به اسپین نیز هست. پس حالتی که در آن انرژی، تکانهٔ زاویه‌ای پاریته، و غیره معین هستند حداکثر با دو الکترون (با متغیر اسپینی مخالف) اشغال می‌شود. این مورد خاصی از اصل طرد پاؤلی است.

کی پادمتقارن‌سازی لازم است؟

این حکم که "دو الکترون نمی‌توانند در یک حالت کوانتومی باشند" ایجاب می‌کند که تابع‌موج دستگاه دو الکترونی نسبت به مختصات این دو الکترون پادمتقارن باشد. این سؤال پیش می‌آید که وقتی یک اتم هیدروژن را روی زمین و یک اتم هیدروژن دیگر را در ماه بررسی می‌کنیم باید نگران این موضوع باشیم؟ اگر این دو اتم در حالت پایه باشند آیا الزاماً باید حالتهای اسپینی مخالف داشته باشند؟ اگر یک اتم هیدروژن سوم درحالت پایه را در نظر بگیریم چه پیش می‌آید؟ درک شهودی به ما می‌گوید که نگرانی بی‌مورد است، و اشتباه نمی‌کند. برای مشاهدهٔ درستی این نتیجه‌گیری، تفاوت میان استفاده از تابع‌موج کاملاً ناهمبستهٔ دو الکترون

$$\psi_a(x_۱)\psi_b(x_۲) \qquad (۶۱_۸)$$

---

۱. برای N بوزون یکسان، تابع‌موج کاملاً متقارن است، و صورت کلی را می‌توان با بسط دترمینان ۸ـ۶۰ و تغییر تمام علامتهای منفی به مثبت به‌دست آورد.

www.arsanjan.blogfa.com

و تابع‌موج پادمتقارن شدهٔ

$$\frac{1}{N}(\psi_a(x_1)\,\psi_b(x_2) - \psi_a(x_2)\,\psi_b(x_1)) \qquad (۶۲\text{ـ}۸)$$

را بررسی می‌کنیم. ضریب بهنجارش N از شرط زیر تعیین می‌شود

$$\frac{1}{N^2}\int dx_1 \int dx_2\, |\psi_2(x_1)\psi_b(x_2) - \psi_a(x_2)\psi_b(x_1)|^2 = 1 \qquad (۶۳\text{ـ}۸)$$

که با

$$\int dx\, |\psi_a(x)|^2 = \int dx\, |\psi_b(x)|^2 = 1 \qquad (۶۴\text{ـ}۸)$$

به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\begin{aligned} N^2 &= 2\left(1 + \left|\int dx\, \psi_a^*(x)\psi_b(x)\right|^2\right) \\ &\equiv 2(1 + |S_{ab}|^2) \end{aligned} \qquad (۶۵\text{ـ}۸)$$

فرض کنید بخواهیم احتمال یافتن الکترون a را در یک ناحیهٔ فضایی R محاسبه کنیم. برای تابع‌موج ناهمبستهٔ ۸ـ۶۱ که آن‌را با $\Psi(x,y) = \psi_a(x)\psi_b(y)$ نشان می‌دهیم، چگالی احتمال از رابطهٔ زیر به‌دست می‌آید

$$P(R) = \int_R dx \int dy\, |\psi_a(x)^2\, |\psi_b(y)|^2 = \int_R dx\, |\psi_a(x)|^2 \qquad (۶۶\text{ـ}۸)$$

روی تمام گسترهٔ مختصات الکترون b انتگرال گرفته‌ایم زیرا جای آن برای ما مهم نیست.
برای تابع‌موج پادمتقارن داریم

$$|\Psi(x,y)|^2 = \frac{1}{N^2}[\psi_a^*(x)\psi_b^*(y) - \psi_b^*(x)\psi_a^*(y)][\psi_a(x)\psi_b(y) - \psi_b(x)\psi_a(y)]$$

که باید از آن روی متغیرهای وابسته به الکترون a در ناحیهٔ R و روی گسترهٔ کامل مختصات مربوط

www.arsanjan.blogfa.com

به الکترون b انتگرال بگیریم. به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned}P_a(R) =& \frac{1}{N^2}\int_R dx\ |\psi_a(x)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dy\ |\psi_b(y)|^2 \\ &+ \frac{1}{N^2}\int_R dy\ |\psi_a(y)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\ |\psi_b(x)|^2 \\ &- \frac{1}{N^2}\int_R dx \int_R dy\ [\psi_a^*(x)\psi_b(x)\psi_b^*(y)\psi_a(y) \\ &+ \psi_b^*(x)\psi_a(x)\ \psi_a^*(y)\psi_b(y)] \\ =& \frac{2}{N^2}\int_R dx\ |\psi_a(x)|^2 - \frac{2}{N^2}\int_R dx \int_R dy\ \psi_a^*(x)\psi_b(x)\psi_b^*(y)\psi_a(y)\end{aligned} \tag{۶۷_۸}$$

در جملهٔ تداخلی هر دو انتگرال روی ناحیهٔ R گرفته می‌شوند، زیرا در هر دو انتگرال تابع‌موجی با شاخص a وجود دارد. تفاوت میان دو چگالی احتمال وقتی حائز اهمیت می‌شود که انتگرال همپوشی $\int_R dx\ \psi_a^*(x)\psi_b(x)$ در ناحیهٔ R برای متغیر x قابل ملاحظه باشد. چون توابع موج برای حالتهای مقید به‌طور نمایی کاهش می‌یابند، واضح است که این انتگرال وقتی مهم است که اتمها به یکدیگر بسیار نزدیک باشند.

برای مثال، یک دستگاه دو الکترونی را در نظر بگیرید که دو الکترون آن با دو بستهٔ موج گاؤسی، یکی حول مبدأ و دیگری حول $x = L$، نمایش داده می‌شوند. در محاسبهٔ احتمال یافتن یک الکترون در یک ناحیهٔ R انتگرال همپوشی $Ce^{-\beta x^2}$ و $Ce^{-\beta(x-L)^2}$ به‌صورت زیر وارد می‌شود

$$C^2\int_R dx\ e^{-\beta(x^2+(x-L)^2)}$$

که به‌سادگی می‌توان دید که متناسب با $e^{-\beta L^2/2}$ است. بنابراین، اگر L بزرگ باشد انتگرال همپوشی به‌سرعت صفر می‌شود، و این درک شهودی که لازم نیست تابع‌موج الکترون مورد نظر با همهٔ یا با هر یک از الکترونهای دور پادمتقارن باشد درست از آب درمی‌آید

اصل طرد پاؤلی را باید در اتمها و مولکولها به‌حساب آورد نه در وضعیتهایی که فاصلهٔ اتمها از یکدیگر بسیار زیاد است. حتی در شبکه‌های بلوری، که در آنها فاصلهٔ بین اتمها چند آنگستروم است، همپوشی اغلب کوچک است، و پادمتقارن‌سازی ضرورت ندارد.

انرژی حالت پایه برای ذرات آزاد در یک جعبه

یک پیامد جالب اصل طرد پاؤلی این است که حالت پایه برای N الکترون در یک پتانسیل تفاوت بسیاری با حالت پایه برای N بوزون یا N ذرهٔ تمایزپذیر دارد. به‌عنوان مثال، جعبهٔ پتانسیل نامتناهی

www.arsanjan.blogfa.com

زیر را در نظر بگیرید

$$\begin{aligned} V(x) &= \infty & x &< 0 \\ &= 0 & 0 &< x < b \\ &= \infty & b &< x \end{aligned} \qquad (۶۸_۸)$$

جواب معادلهٔ شرودینگر که در $x = 0$ و $x = L$ صفر می‌شود به‌صورت زیر است

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{b}} \sin \frac{n\pi x}{b} \qquad (۶۹_۸)$$

که در آن $n = 1, 2, 3, \ldots$. ویژه‌مقدارهای انرژی عبارت‌اند از

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mb^2} \qquad (۷۰_۸)$$

برای N بوزون بدون برهم‌کنش، حالت پایه شامل تمام ذرات در حالت $n = 1$ است، و در نتیجه انرژی با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$E = N \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mb^2} \qquad (۷۱_۸)$$

و انرژی به‌ازای هر ذره عبارت است از

$$\frac{E}{N} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mb^2} \qquad (۷۲_۸)$$

برای N فرمیون بدون برهم‌کنش وضعیت کاملاً متفاوت است. در هر یک از حالتهای $n = 1$، ۲، ۳، ... تنها دو الکترون می‌توانند وجود داشته باشند، و در نتیجه تعداد حالتهای اشغال شده $N/2$ است. بنابراین، انرژی کل برابر است با

$$E = 2 \sum_{n=1}^{N/2} \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mb^2} = \frac{h^2 \pi^2}{mb^2} \frac{N^3}{24} \qquad (۷۳_۸)$$

در محاسبهٔ نتیجهٔ بالا، N را بزرگ گرفته‌ایم، و از این‌رو مهم نیست که آخرین تراز با یک الکترون اشغال شده است یا با دو الکترون، و از تقریب زیر استفاده کرده‌ایم

$$\sum_{n=1}^{N/2} n^2 \approx \int_1^{N/2} n^2 dx \simeq \frac{1}{3} \left(\frac{N}{2}\right)^3$$

www.arsanjan.blogfa.com

بنابراین، انرژی به‌ازای هر ذره عبارت است از

$$\frac{E}{N} = \frac{\hbar^2\pi^2}{24mb^2}N^2 \qquad (۷۴\text{ـ}۸)$$

که با N^2 افزایش می‌یابد. به‌عبارت دیگر، به‌ازای یک انرژی معین، تعداد بوزونهایی که چاه را اشغال می‌کنند متناسب با E است، در حالی‌که تعداد فرمیونهای اشغال‌کنندهٔ چاه با $E^{1/2}$ متناسب است. بالاترین ترازی که فرمیونها اشغال می‌کنند ترازی است که برای آن $n = N/2$، و انرژی آن برابر است با

$$E_F = \frac{\hbar^2\pi^2N^2}{8mb^2} \qquad (۷۵\text{ـ}۸)$$

شاخص پایین F را به این دلیل نوشته‌ایم که این انرژی را انرژی فرمی می‌نامند. انرژی فرمی را می‌توان برحسب چگالی فرمیونها، که در این مسئلهٔ یک‌بعدی برابر است با $\rho = N/b$، نوشت:

$$E_F = \frac{\hbar^2\pi^2}{8m}\rho^2 \qquad (۷۶\text{ـ}۸)$$

اهمیت این مطالب را در فصل ۹ خواهیم دید.

اصل طرد نقش فوق‌العاده مهمی در ساختار اتمها دارد. تنوع بسیار زیاد خواص شیمیایی عناصر مختلف مستقیماً ناشی از این واقعیت است که تعداد محدودی الکترون می‌توانند یک ویژه‌حالت انرژی معین را اشغال کنند. در این باره در فصل ۱۹ بحث خواهیم کرد.

مسائل

۱ـ۸ جرم کاهیدهٔ یک دستگاه الکترون-پروتون را به‌دست آورید و آن‌را با جرم کاهیدهٔ دستگاه الکترون-دوترون مقایسه کنید. جرم کاهیدهٔ دستگاهی متشکل از دو ذرهٔ یکسان را تعیین کنید.

۲ـ۸ ثابت کنید عملگر تبادل P_{12} هرمیتی است.

۳ـ۸ دو الکترون بدون برهم‌کنش را در یک چاه پتانسیل نامتناهی در نظر بگیرید. اگر این دو الکترون در حالت اسپینی یکسان باشند تابع‌موج حالت پایه را به‌دست آورید.

۴ـ۸ دو الکترون در یک حالت اسپینی یکسان را در نظر بگیرید که با پتانسیل زیر برهم‌کنش دارند

$$V(|x_1 - x_2|) = -V_0 \qquad |x_1 - x_2| \le a$$
$$= 0 \qquad \text{هر جای دیگر}$$

www.arsanjan.blogfa.com

کمترین انرژی این حالت دو الکترونی را با فرض اینکه تکانهٔ کل این الکترونها صفر است به‌دست آورید

[راهنمایی: معادله را به روشی که به ۸ـ۳۷ از آن حاصل شد جدا کنید و سپس اصل پاؤلی را به‌کار ببرید.]

۸ـ۵ دو ذرهٔ یکسان را که با عملگر انرژی زیر توصیف می‌شوند در نظر بگیرید

$$H = H(p_1, x_1) + H(p_2, x_2)$$

که در آن

$$H(p, x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

حرکت مرکز جرم را جدا کنید، و طیف انرژی این دستگاه را به‌دست آورید. نشان دهید این طیف با طیفی که از حل

$$H\psi(x_1, x_2) = E\psi(x_1, x_2)$$

با

$$\psi(x_1, x_2) = u_1(x_1)u_2(x_2)$$

به‌دست می‌آید توافق دارد. دربارهٔ واگنی طیف انرژی بحث کنید.

۸ـ۶ دو الکترون را که با هامیلتونی زیر توصیف می‌شوند در نظر بگیرید

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + V(x_1) + V(x_2)$$

که در آن به‌ازای $x < 0$ و $x > a$ داریم $V(x) = \infty$، و در بازهٔ $0 < x < a$ داریم $V(x) = 0$.

فرض کنید الکترونها در حالت اسپینی یکسانی باشند، یعنی $\sigma_1 = \sigma_2$.

(الف) کمترین انرژی این حالت دوالکترونی را تعیین کنید.

(ب) ویژه‌تابع انرژی را برای این حالت پایه به‌دست آورید.

(ج) انرژی و تابع‌موج اولین حالت برانگیخته را، باز هم با فرض $\sigma_1 = \sigma_2$، به‌دست آورید.

۸ـ۷ یک دستگاه دو الکترونی را در نظر بگیرید که برای آن $\sigma_1 = \sigma_2$، و از این‌رو لازم نیست اسپین را در نظر بگیریم. فرض کنید الکترونها به‌صورت بسته‌های موج گاؤسی حول $x = a$

www.arsanjan.blogfa.com

و $x = -a$ هستند، یعنی توابع موج آنها به‌ترتیب عبارت‌اند از $(\sqrt{\pi}/\mu)e^{-\mu^2(x-a)^2/2}$ و $(\sqrt{\pi}/\mu)e^{-\mu^2(x+a)^2/2}$. یک تابع‌موج دو الکترونی با بهنجارش مناسب بسازید. فرض کنید $1/\mu = 0.5$Å. براورد کنید که به‌ازای چه مقادیری از a می‌توان اثرات اصل پاؤلی را تا دقت ۱ روی ۱۰۰۰ نادیده گرفت.

۸ـ۸ با استفاده از تابع‌موج دستگاه دو الکترونی مسئلهٔ ۸ـ۷، احتمال این را محاسبه کنید که فاصلهٔ بین دو الکترون در بازهٔ $(x, x + dx)$ باشد. همچنین نشان دهید که مقدار انتظاری مرکز جرم این دستگاه دو الکترونی برابر است با $\langle(x_1 + x_2)/2\rangle = 0$.

[راهنمایی: x_1 و x_2 را برحسب مختصهٔ مرکز جرم $X = (x_1+x_2)/2$ و فاصلهٔ $x = x_1-x_2$ بنویسید، و تابع‌موج را برحسب این متغیرها بیان کنید.]

۸ـ۹ چگالی احتمال مربوط به مسئلهٔ ۸ـ۸ را برحسب x برای دو مورد (الف) $1/a = \mu/2$، و (ب) $1/a = 2\mu$ ترسیم کنید. مفهوم فیزیکی نتایج را بیان کنید.

۸ـ۱۰ فرض کنید در مسئله‌های ۸ـ۷ تا ۸ـ۹ به‌جای الکترون بوزون داریم. تغییر در فرمولها را بنویسید، چگالی احتمال را برحسب x برای دو فاصله ترسیم کنید، و تفاوت میان فرمیونها و بورونها را از لحاظ چگالی احتمال توضیح دهید.

مراجع

به هر یک از مراجع آخر فصل ۶ و همچنین دو کتاب زیر مراجعه کنید.

D S Saxon, *Elementary Quantum Mechanics*, Holden-Day, San Francisco, 1968.

D Park *Introduction to the Quantum Theory*, (3rd Ed) McGraw-Hill, New York, 1992.

www.arsanjan.blogfa.com

۹

معادلهٔ شرودینگر در سه‌بعد (۱)

هامیلتونی یک ذره که در فضای سه‌بعدی حرکت می‌کند عبارت است از

$$H = \frac{P_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(x, y, z) \qquad (۱_۹)$$

در این فصل پتانسیلی را در نظر می‌گیریم که به‌صورت زیر است

$$V(x, y, z) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z) \qquad (۲_۹)$$

به‌آسانی می‌توان دید که معادلهٔ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) u_E(x, y, z) + [V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)] u_E(x, y, z) = E u_E(x, y, z) \qquad (۳_۹)$$

با جداسازی زیر حل می‌شود

$$u_E(x, y, z) = u_{\epsilon_1}(x) v_{\epsilon_2}(y) w_{\epsilon_3}(z) \qquad (۴_۹)$$

www.arsanjan.blogfa.com

که در آن تابعهای سمت راست جوابهای معادله‌های زیر هستند

$$\left[-\frac{\hbar^۲}{۲m}\frac{d^۲}{dx^۲}+V_۱(x)\right]u_{\epsilon_۱}(x)=\epsilon_۱u_{\epsilon_۱}(x)$$
$$\left[-\frac{\hbar^۲}{۲m}\frac{d^۲}{dy^۲}+V_۲(y)\right]v_{\epsilon_۲}(y)=\epsilon_۲v_{\epsilon_۲}(y) \qquad (۵_۹)$$
$$\left[-\frac{\hbar^۲}{۲m}\frac{d^۲}{dz^۲}+V_۳(z)\right]w_{\epsilon_۳}(z)=\epsilon_۳w_{\epsilon_۳}(z)$$

و

$$E=\epsilon_۱+\epsilon_۲+\epsilon_۳$$

ذرهٔ آزاد در جعبه

یک مثال مخصوصاً جالب تعمیم سه‌بعدی چاه پتانسیل نامتناهی است. اگر جعبهٔ سه‌بعدی مکعبی به ضلع L باشد، آنگاه

$$\begin{aligned} V_۱(x) &= \infty & x &< ۰ \\ &= ۰ & ۰ &< x < L \\ &= \infty & L &< x \end{aligned} \qquad (۶_۹)$$

و غیره. بنابراین، جواب عمومی عبارت است از

$$u_E(x,y,z)=\left(\frac{۲}{L}\right)^{۳/۲}\sin\frac{n_۱\pi x}{L}\sin\frac{n_۲\pi y}{L}\sin\frac{n_۳\pi z}{L} \qquad (۷_۹)$$

و

$$E=\frac{\hbar^۲\pi^۲}{۲mL^۲}(n_۱^۲+n_۲^۲+n_۳^۲) \qquad (۸_۹)$$

توجه کنید که واگنی در این مسئله بسیار زیاد است: تعداد جوابها به‌ازای یک مقدار معین E برابر است با تعداد مجموعه‌های اعداد درست $\{n_۱,n_۲,n_۳\}$ که در ۹ـ۸ صدق می‌کنند. واگنی معمولاً

www.arsanjan.blogfa.com

ناشی از وجود عملگرهای جابه‌جاشونده است و این مثال نیز از این قاعده مستثنی نیست. در اینجا عملگرهای جابه‌جاشونده H_x، H_y و H_z هستند، که به‌صورت زیر تعریف می‌شوند

$$\begin{aligned} H_x &= \frac{p_x^2}{2m} + V_1(x) \\ H_y &= \frac{p_y^2}{2m} + V_2(y) \\ H_z &= \frac{p_z^2}{2m} + V_3(z) \end{aligned} \qquad (۹\text{ـ}۹)$$

و

$$H_x + H_y + H_z = H \qquad (۹\text{ـ}۱۰)$$

اثرات اصل طرد

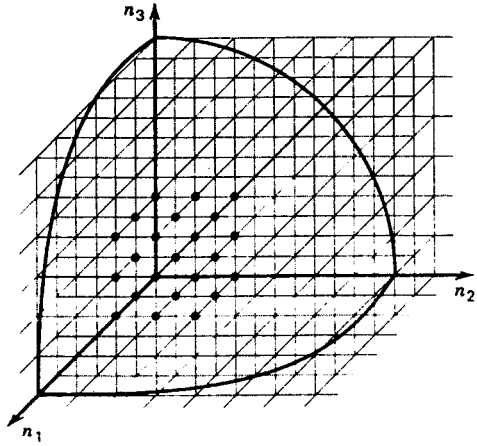
پتانسیلی که در بالا در نظر گرفتیم چنان ساده است که می‌توان از آن برای بحث دربارهٔ انرژیهای الکترونهای بدون برهم‌کنش (و سایر فرمیونهای یکسان) در جعبهٔ سه‌بعدی استفاده کرد. به‌عنوان اولین گام، بهتر است انرژی حالت پایهٔ N فرمیون یکسان بدون برهم‌کنش، مثلاً الکترون، را در جعبه‌ای به حجم L^3 به‌دست آوریم. برای هر سه‌تایی اعداد درست $(1,1,1)$، $(1,1,2)$، $(1,2,1)$، $(2,1,1)$، ...، می‌توان دو الکترون در نظر گرفت. مسئلهٔ یافتن انرژی را به‌صورت آسانتری مطرح می‌کنیم: چند سه‌تایی اعداد درست (n_1, n_2, n_3) وجود دارند که برای آنها E در ۹ـ۸ کمتر از انرژی E_F است؟ هر سه‌تایی یک نقطهٔ شبکه در یک فضای سه‌بعدی تشکیل می‌دهد، و اگر تعداد این نقاط بسیار زیاد باشد، با تقریب بسیار خوب می‌توان گفت که آنها باید در کره‌ای به شعاع R قرار داشته باشند که بنابه ۹ـ۸ با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = R^2 = \frac{2mE_F}{\hbar^2\pi^2}L^2 \qquad (۹\text{ـ}۱۱)$$

این تعداد برابر است با حجم یک هشتم کره که برای آن تمام n_iها مثبت‌اند (شکل ۹ـ۱). بنابراین، تعداد نقطه‌های شبکه برابر است با

$$\frac{1}{8}\cdot\frac{4\pi}{3}R^3 = \frac{1}{8}\,\frac{4\pi}{3}\left(\frac{2mE_F}{\hbar^2\pi^2}L^2\right)^{3/2} \qquad (۹\text{ـ}۱۲)$$

www.arsanjan.blogfa.com



شکل۹ـ۱ شمارش حالتها برای دستگاه ذرات مستقل.

و تعداد الکترونها با انرژی کمتر از انرژی E_F دو برابر این است، یعنی

$$N = \frac{\pi}{3} L^3 \left(\frac{2mE_F}{\hbar^2 \pi^2} \right)^{3/2} \qquad (۱۳_۹)$$

تعداد الکترونها، چنانکه باید، متناسب با حجم جعبه است. برحسب چگالی الکترونها،

$$n = \frac{N}{L^3} \qquad (۱۴_۹)$$

داریم

$$E_F = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{3n}{\pi} \right)^{2/3} \qquad (۱۵_۹)$$

انرژی E_F متعلق به پرانرژی‌ترین الکترون در حالت پایهٔ یک گاز الکترونی به چگالی n است. این انرژی را انرژی فرمی می‌نامند، و نشان‌گذاری آن با F به همین دلیل است.

برای محاسبهٔ انرژی کل، می‌توان تعداد نقاط شبکه را به‌صورت

$$\frac{1}{8} \int_{|\mathbf{n}| \le R} d^3\mathbf{n} \qquad (۱۶_۹)$$

نوشت که در آن ضریب ۱/۸ از قید مثبت بودن اعداد درست در ۹ـ۸ ناشی می‌شود؛ در انتگرال ۹ـ۱۶ این قید برداشته شده است و ضریب جلو انتگرال به‌جای آن گذاشته شده است.

www.arsanjan.blogfa.com

این انرژی باید دو برابر شود، زیرا برای هر نقطهٔ شبکه دو الکترون با یک انرژی وجود دارند. بنابراین، انرژی کل برابر است با

$$\begin{aligned} E_{\text{کل}} &= \frac{\hbar^2\pi^2}{mL^2}\,\frac{1}{8}\int \mathbf{n}^2 d^3\mathbf{n} \\ &= \frac{\hbar^2\pi^2}{8mL^2}\,4\pi\int_0^R n^4\,dn \\ &= \frac{\hbar^2\pi^3}{10mL^2}R^5 \end{aligned} \qquad (۹\text{ـ}۱۷)$$

چون رابطهٔ R با تعداد الکترونها به‌صورت زیر است

$$N = 2\cdot\frac{1}{8}\cdot\frac{4\pi}{3}R^3 \qquad (۹\text{ـ}۱۸)$$

در نهایت به‌دست می‌آوریم

$$E_{\text{کل}} = \frac{\hbar^2\pi^3}{10mL^2}\left(\frac{3N}{\pi}\right)^{5/3} \qquad (۹\text{ـ}۱۹)$$

که برحسب چگالی $n = N/L^3$ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$E_{\text{کل}} = \frac{\hbar^2\pi^3}{10m}\left(\frac{3n}{\pi}\right)^{5/3} L^3 \qquad (۹\text{ـ}۲۰)$$

پیامدهای اصل طرد پاؤلی کاملاً گیج‌کننده هستند. تعدادی از آنها را پس از ملاحظات زیر بررسی می‌کنیم:

(الف) عدد موج که با $E = \hbar^2k^2/2m$ در سطح "دریای فرمی" تعریف می‌شود با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} \qquad (۹\text{ـ}۲۱)$$

چون $k = 2\pi/\lambda$، برای طول‌موج دوبروی به‌دست می‌آوریم

$$\lambda = 2{,}03\,n^{-1/3} \qquad (۹\text{ـ}۲۲)$$

www.arsanjan.blogfa.com
از آنجا که $n^{-1/3}$ تقریباً برابر با فاصلهٔ میان ذره‌ای d است، نتیجهٔ بالا را می‌توان به‌صورتی که به‌آسانی به‌خاطر سپرده می‌شود بیان کرد:

$$d = \frac{\lambda_F}{2} \qquad (۹_۲۳)$$

این رابطه چیزی با ارزشتر از یک وسیلهٔ یادسپاری است. چون اصل طرد نمی‌گذارد دو الکترون با اعداد کوانتومی یکسان کنار هم قرارگیرند رابطهٔ بالا به‌معنای این است که آنها باید دست‌کم به‌اندازهٔ یک نیم‌موج از هم فاصله داشته باشند.

(ب) اگر تعداد الکترونها را ثابت بگیریم، آنگاه ۹ـ۱۹ برحسب حجم حاوی الکترونها به‌صورت زیر درمی‌آید

$$E_{\text{کل}} = \frac{h^2\pi^2}{10m}\left(\frac{3N}{\pi}\right)^{5/3} V^{-2/3} \qquad (۹_۲۴)$$

اگر N بزرگ باشد، این نتیجه عملاً مستقل از شکل حجم است. در محاسبات بالا از مکعب استفاده کردیم زیرا این راه برای محاسبه از همه ساده‌تر است.

فشار واگنی و کاربردهای اخترفیزیکی

اگر گاز الکترونی را متراکم کنیم الکترونها به یکدیگر نزدیکتر می‌شوند، و در نتیجه طول‌موج دوبروی کاهش می‌یابد، یعنی انرژی زیاد می‌شود. بنابراین، مقاومتی در برابر تراکم ظاهر می‌شود؛ فشار مانع تراکم را فشار واگنی می‌نامند. این فشار با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$\begin{aligned} p_{\text{واگنی}} &= -\frac{\partial E_{\text{tot}}}{\partial V} \\ &= \frac{h^2\pi^2}{15m}\left(\frac{3n}{\pi}\right)^{5/3} \end{aligned} \qquad (۹_۲۵)$$

مدول کپه‌ای B (عکس تراکم‌پذیری) برای یک ماده به‌صورت زیر تعریف می‌شود

$$B = -V\frac{\partial p}{\partial V} \qquad (۹_۲۶)$$

و اگر به‌جای p فشار واگنی را قرار دهیم به‌دست می‌آوریم $B = 5p_{\text{واگنی}}/3$، و در نتیجه

$$B = \frac{h^2\pi^2}{9m}\left(\frac{3n}{\pi}\right)^{5/3} \qquad (۹_۲۷)$$

www.arsanjan.blogfa.com

استفاده از الگوی گاز الکترونی واگن برای ستاره مرتبه بزرگی درست مدول کپه‌ای B را به‌دست می‌دهد. به‌عنوان مثال، برای سدیم $n = ۲٫۶۵ \times ۱۰^{۲۲}\mathrm{cm}^{-۳}$، و در نتیجه $B = ۹٫۲ \times ۱۰^{۱۰}\mathrm{dyne/cm}^{۲}$. مقدار تجربی $۶٫۴ \times ۱۰^{۱۰}\mathrm{dyne/cm}^{۲}$ است.

مقاومت در برابر تراکم که منشأ آن در اصل طرد پاؤلی است نقش مهمی در تکامل ستاره‌ای دارد. ستاره‌ها با واکنشهای هسته‌ای متوالی "می‌سوزند". هیدروژن با واکنشهای زیر به هلیم تبدیل می‌شود

$$^{۱}\mathrm{H} + {}^{۱}\mathrm{H} \rightarrow {}^{۲}\mathrm{H} + e^{+} + \nu + ۱٫۴۴\mathrm{MeV}$$

$$^{۲}\mathrm{H} + {}^{۱}\mathrm{H} \rightarrow {}^{۳}\mathrm{He} + \gamma + ۵٫۴۹\mathrm{MeV}$$

$$^{۳}\mathrm{He} + {}^{۳}\mathrm{He} \rightarrow {}^{۴}\mathrm{He} + {}^{۱}\mathrm{H} + {}^{۱}\mathrm{H} + ۱۲٫۸۵\mathrm{MeV}$$

وقتی تمام هیدروژن به هلیم تبدیل شد این سوختن متوقف می‌شود. انقباض گرانشی هلیم را متراکم می‌کند تا اینکه هلیم با واکنش زیر شروع به سوختن می‌کند

$$^{۴}\mathrm{He} + {}^{۴}\mathrm{He} \rightarrow {}^{۸}\mathrm{Be} + \gamma - ۹۵\ \mathrm{keV}$$

$$^{۸}\mathrm{Be} + {}^{۴}\mathrm{He} \rightarrow {}^{۱۲}\mathrm{C} + \gamma + ۷٫۴\ \mathrm{MeV}$$

انواع فرایندهای هسته‌ای زیادتر می‌شوند، و فرایند ترکیب هسته‌ها را اکنون کاملاً می‌دانیم. در یک مرحله، وقتی که ستاره عمدتاً از آهن، سیلیسیم، و عنصرهای مجاور تشکیل شده است، سوختن متوقف می‌شود. آنگاه ماده انقباض گرانشی را از سر می‌گیرد، و تنها مانع در برابر رمبش گرانشی کامل اثر فشار واگنی است.

اگر فرض کنیم چگالی مادهٔ ρ مستقل از شعاع است و شکل ستاره کروی است، فشار گرانشی به‌آسانی محاسبه می‌شود. انرژی پتانسیل ماده در پوسته‌ای بین شعاعهای r و $r + dr$ برابر است با

$$dV_g = -G\frac{(۴\pi\rho r^{۳}/۳)(۴\pi\rho r^{۲}dr)}{r} = -\frac{(۴\pi)^{۲}G\rho^{۲}}{۳}r^{۴}dr \qquad (۲۸\text{-}۹)$$

و در نتیجه انرژی پتانسیل مادهٔ موجود در کره‌ای به‌شعاع R عبارت است از

$$V_g = -\frac{(۴\pi)^{۲}G\rho^{۲}}{۳}\int_{۰}^{R} r^{۴}\,dr = -\frac{(۴\pi)^{۲}}{۱۵}G\rho^{۲}R^{۵} \qquad (۲۹\text{-}۹)$$

رابطهٔ میان ρ، R و جرم ستارهٔ M را هم داریم. ستاره از N نوکلئون (به‌صورت آهن، سیلیسیم و

www.arsanjan.blogfa.com

غیره) هر یک به جرم m_n تشکیل شده است، و از این‌رو

$$\frac{۴\pi}{۳}\rho R^۳ = M = (NM_n) \qquad (۳۰_۹)$$

بنابراین، رابطهٔ انرژی پتانسیل گرانشی برحسب حجم ستاره به‌صورت زیر است

$$V_g = -\frac{۳}{۵}\left(\frac{۴\pi}{۳}\right)^{۱/۳} G(Nm_n)^۲ V^{-۱/۳} \qquad (۳۱_۹)$$

فشار گرانشی برابر است با

$$p_g = -\frac{\partial V_g}{\partial V} = -\frac{۱}{۵}\left(\frac{۴\pi}{۳}\right)^{۱/۳} G(Nm_n)^۲ V^{-۴/۳} \qquad (۳۲_۹)$$

این فشار با فشار واگنی، که بنابه ۹ـ۲۵ به‌صورت زیر است، مخالفت می‌کند

$$p_{\text{واگنی}} = \frac{\hbar^۲\pi^۳}{۱۵m_e}\left(\frac{۳n}{\pi}\right)^{۵/۳} = \frac{\hbar^۲\pi^۳}{۱۵m_e}\left(\frac{۳N_e}{\pi}\right)^{۵/۳} V^{-۵/۳} \qquad (۳۳_۹)$$

که در آن N_e تعداد الکترونهای ستاره است و با تعداد پروتونهای آن برابر است. با فرض مساوی بودن تعداد پروتونها و نوترونها، داریم $N_e = N/۲$.

این دو فشار، به‌ازای یک مقدار معین N، وقتی با هم موازنه می‌کنند که

$$\frac{۱}{۵}\left(\frac{۴\pi}{۳}\right)^{۱/۳} G(Nm_n)^۲ V^{-۴/۳} = \frac{\hbar^۲\pi^۳}{۱۵m_e}\left(\frac{۳N_e}{\pi}\right)^{۵/۳} V^{-۵/۳}$$

یعنی وقتی که شعاع ستاره برابر است با R^*:

$$R^* = \left(\frac{۳}{۴\pi}\right)^{۱/۳} V^{۱/۳} = \left(\frac{۸۱\pi^۲}{۱۲۸}\right)^{۱/۳} \frac{\hbar^۲}{Gm_e m_n^۲} N^{-۱/۳} \qquad (۳۴_۹)$$

برای ستاره‌ای با جرم خورشید داریم

$$N \approx \frac{۲ \times ۱۰^{۳۳}\text{g}}{۱٫۶۷ \times ۱۰^{-۲۴}\text{g}} = ۱٫۲ \times ۱۰^{۵۷}$$

www.arsanjan.blogfa.com

و شعاع ستارهٔ واگن برابر است با $R \approx ۱۰^{۴}\text{km} \times ۱۰^{-۱} \approx ۱۰^{۳}\text{km}$. شعاع یک ستارهٔ ناواگن مانند خورشید تقریباً $۷ \times ۱۰^{۸}\text{km}$ است.

اگر جرم ستاره اندکی بیشتر از جرم خورشید باشد انرژی میانگین الکترونها افزایش می‌یابد. وقتی الکترونها به انرژیهای نسبیتی می‌رسند رابطهٔ بالا برای فشار واگنی تغییر عمده‌ای پیدا می‌کند. در واقع، انرژی الکترون دیگر $p^{۲}/۲m_e$ نیست بلکه pc است. می‌توان نشان داد (مسئلهٔ ۹ـ۱) که در این وضعیت فشار واگنی با $V^{-۴/۳}$ تغییر می‌کند، و اگر مقدار N به‌اندازهٔ کافی بزرگ باشد فشارگرانشی بر فشار واگنی غالب می‌شود. یک نتیجهٔ این فشار خالص زیاد این است که واکنش زیر روی می‌دهد

$$e^- + p \rightarrow n + \nu$$

نوترینوها فرار می‌کنند زیرا ماده، حتی مادهٔ واگن، برای آنها شفاف است، و آنچه می‌ماند یک ستارهٔ نوترونی است. فشار واگنی نوترونها را، که فرمیون هستند و بنابراین از اصل طرد پیروی می‌کنند، می‌توان به همان روش مربوط به فشار الکترون محاسبه کرد و البته به‌جای N_e باید N و به‌جای m_e باید m_n گذاشت. در این مورد به‌دست می‌آوریم

$$R_n^* = \left(\frac{۸۱\pi^{۲}}{۱۶}\right)^{۱/۳} \frac{\hbar^{۲}}{Gm_n^{۳}} N^{-۱/۳} \qquad (۳۵\text{ـ}۹)$$

برای ستاره‌ای که جرمش دو برابر خورشید است سرانجام به نتیجهٔ $R_n^* \approx ۱۰\text{km}$ می‌رسیم. اگر جرم (یا معادل آن N) چنان بزرگ باشد که نوترونها نسبیتی شوند آنگاه موازنه‌ای در برابر فشار گرانشی بسیار زیاد وجود نخواهد داشت، و یک سیاهچاله شکل می‌گیرد.

مسائل

۹ـ۱ انرژی فرمی برای گازی از فرمیونها را با این فرض که فرمیونها بدون جرم هستند، و در نتیجه رابطهٔ انرژی‌ـتکانه به‌صورت $E = pc$ است، از نو محاسبه کنید.

۹ـ۲ واگنی حالتها در یک جعبهٔ مکعبی با حجم $L^{۳}$ را برحسب E محاسبه کنید، یعنی تعداد حالتها را در بازهٔ $(E, E + dE)$ به‌دست آورید و با استفاده از آن چگالی حالتهای یک گاز الکترونی را، با توجه به اینکه به‌ازای هر حالت انرژی دو الکترون داریم، تعیین کنید.

[راهنمایی: چند $(n_۱, n_۲, n_۳)$ وجود دارند که برای آنها $\sum_i n_i^{۲} = ۲mEL^{۲}/\hbar^{۲}\pi^{۲}$؟]

۹ـ۳ طیف انرژی الکترونهای آزاد را در جعبه‌ای به اضلاع a، a و L، با فرض $a \ll L$، به‌دست آورید. دربارهٔ فاصلهٔ الکترونها به‌ازای $a = ۱۰\text{Å}$ و $L = ۱۰^{-۴}\text{cm}$ بحث کنید.

۹ـ۴ چگالی انرژی یک گاز فوتونی را در یک جعبهٔ مکعبی با حجم $L^{۳}$، با توجه به اینکه به‌ازای

www.arsanjan.blogfa.com

هر حالت انرژی دو فوتون (دو حالت قطبش) وجود دارند، محاسبه کنید.

۹ـ۵ طیف انرژی یک گاز فوتونی را در جعبه‌ای به اضلاع a، a و L، با $a \ll L$، به‌دست آورید.

۹ـ۶ با توجه به اینکه چگالی تعداد الکترونهای آزاد در مس $۸٫۵ \times ۱۰^{۲۲}\text{cm}^{-۳}$ است، (۱) انرژی فرمی را برحسب الکترون ولت، و (۲) سرعت الکترونی را که انرژی جنبشی آن برابر با انرژی فرمی است محاسبه کنید.

۹ـ۷ یک هسته از N نوترون و Z پروتون، با $N + Z = A$، تشکیل شده است. اگر شعاع هسته با $R = r_۰ A^{۱/۳}$ داده شود، که در آن $r_۰ = ۱٫۱\text{fm} (۱\text{fm} = ۱۰^{-۱۳}\text{cm})$، و اگر جرمهای نوترون و پروتون تقریباً $۱٫۶ \times ۱۰^{-۲۴}\text{g}$ باشند، رابطهٔ انرژی فرمی را برای "گاز" پروتون و "گاز" نوترون، با فرض حرکت آزاد پروتونها و نوترونها، به‌دست آورید. این انرژیهای فرمی را به‌ازای $N = ۱۲۶$ و $Z = ۸۲$ تعیین کنید.

۹ـ۸ یک گاز نوترونی را در حالت پایه در نظر بگیرید که برای آن چگالی جرم ρ از $۱۰^{۱۱}$ تا $۱۰^{۱۶}$ گرم بر سانتیمترمکعب تغییر می‌کند. انرژی فرمی را برحسب ρ به‌دست آورید. توجه کنید که در یک نقطه این گاز نوترونی نسبیتی می‌شود. در چه گستره‌ای از چگالیها باید از فرمولهای نسبیتی استفاده کنیم؟

www.arsanjan.blogfa.com

۱۰

معادلهٔ شرودینگر در سه‌بعد (۲)

پتانسیل مرکزی

در این فصل مورد بسیار مهمی را در نظر می‌گیریم که در آن پتانسیل $V(x,y,z)$ تنها به $r=\sqrt{x^۲+y^۲+z^۲}$ بستگی دارد. برای یک دستگاه دوذره‌ای با پتانسیلی که تنها به‌فاصلهٔ بین دو ذره بستگی دارد، هامیلتونی به‌صورت زیر است

$$H=\frac{\mathbf{p}_۱^۲}{۲m_۱}+\frac{\mathbf{p}_۲^۲}{۲m^۲}+V(|\mathbf{r}_۱-\mathbf{r}_۲|) \qquad (۱\text{-}۱۰)$$

با تجزیهٔ متداول به مختصات مرکز جرم و نسبی

$$\mathbf{R}=\frac{m_۱\mathbf{r}_۱+m_۲\mathbf{r}_۲}{m_۱+m_۲} \qquad (۲\text{-}۱۰)$$

$$\mathbf{r}=\mathbf{r}_۱-\mathbf{r}_۲$$

www.arsanjan.blogfa.com

و با تکانه‌های کل و نسبی

$$\begin{aligned}\mathbf{P} &= \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 \\ \mathbf{p} &= \frac{m_2\mathbf{p}_1 - m_1\mathbf{p}_2}{m_1 + m_2}\end{aligned} \qquad (۳_۱۰)$$

هامیلتونی به‌صورت زیر درمی‌آید

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(|\mathbf{r}|) \qquad (۴_۱۰)$$

در اینجا M جرم کل دستگاه است که با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$M = m_1 + m_2 \qquad (۵_۱۰)$$

و جرم کاهیدهٔ μ عبارت است از

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{M} \qquad (۶_۱۰)$$

به‌سادگی می‌توان دید که

$$\begin{aligned}[P_i, R_j] &= \frac{h}{i}\delta_{ij} \\ [p_i, r_j] &= \frac{h}{i}\delta_{ij}\end{aligned} \qquad (۷_۱۰)$$

و تمام جابه‌جاگرهای دیگر صفر هستند. چون پتانسیل تابع مختصهٔ مرکز جرم $\mathbf{R}$ نیست، عملگر تکانهٔ کل $\mathbf{P}$ با H جابه‌جا می‌شود، و می‌توان ویژه‌تابعهای مشترکی برای $\mathbf{P}$ و H به‌دست آورد. ویژه‌تابعهای $\mathbf{P}$ عبارت‌اند از

$$U(\mathbf{P}, \mathbf{R}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{P}\cdot\mathbf{R}/h} \qquad (۸_۱۰)$$

بنابراین، ویژه‌تابع H به‌صورت زیر است

$$\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = U(\mathbf{P}, \mathbf{R}) u_E(\mathbf{r}) \qquad (۹_۱۰)$$

www.arsanjan.blogfa.com

به‌طوری که $u_E(\mathbf{r})$ در معادلهٔ

$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2\mu}+V(r)\right)u_E(\mathbf{r})=Eu_E(\mathbf{r}) \qquad (۱۰\text{ـ}۱۰)$$

که در آن E انرژی داخلی، یعنی انرژی کل منهای انرژی حرکت دستگاه دوذره‌ای $P^2/2M$، است. معادلهٔ ۱۰ـ۱۰ را به‌صورت زیر می‌نویسیم

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(r)\right)u_E(\mathbf{r})=Eu_E(\mathbf{r}) \qquad (۱۰\text{ـ}۱۱)$$

پیامدهای ناوردایی چرخشی

در این بخش نشان می‌دهیم که ۱۰ـ۱۱ را می‌توان به‌گونه‌ای جداسازی کرد که تنها مختصهٔ شعاعی r در معادلهٔ ویژه‌مقداری انرژی ظاهر شود. در مکانیک کلاسیک این جداسازی با استفاده از تکانهٔ زاویه‌ای انجام می‌شود. با

$$\mathbf{L}=\mathbf{r}\times\mathbf{p} \qquad (۱۰\text{ـ}۱۲)$$

به‌دست می‌آوریم

$$\mathbf{L}^2=(\mathbf{r}\times\mathbf{p})\cdot(\mathbf{r}\times\mathbf{p})=r^2p^2-(\mathbf{r}\cdot\mathbf{p})^2$$

و در نتیجه

$$\begin{aligned}\mathbf{p}^2&=\frac{1}{r^2}(\mathbf{r}\cdot\mathbf{p})^2+\frac{1}{r^2}\mathbf{L}^2\\&=p_r^2+\frac{1}{r^2}\mathbf{L}^2\end{aligned} \qquad (۱۰\text{ـ}۱۳)$$

برای پتانسیل مرکزی (وقتی V تنها به r بستگی دارد) نیرو شعاعی است و لنگری بر دستگاه وارد نمی‌شود. بنابراین، $\mathbf{L}$ یک ثابت حرکت است و $\mathbf{L}^2$ تنها یک عدد است. در نتیجه، معادلهٔ

$$E=\frac{1}{2\mu}\mathbf{p}^2+V(r)$$

تنها شامل مختصهٔ شعاعی است. همین نتیجه برای مکانیک کوانتومی صدق می‌کند. در بقیهٔ این بخش:

www.arsanjan.blogfa.com

۱. عملگر تکانهٔ زاویه‌ای را از شرط ناوردا بودن هامیلتونی تحت چرخش تعیین می‌کنیم؛ و
۲. معادلهٔ شعاعی را به‌دست می‌آوریم.

ناوردایی تحت چرخش حول محور z

مورد خاص چرخش حول محور z به‌اندازهٔ زاویهٔ θ را در نظر بگیرید: با

$$\begin{aligned} x' &= x\ \cos\ \theta - y\ \sin\ \theta \\ y' &= x\ \sin\ \theta + y\ \cos\ \theta \end{aligned} \qquad (۱۴_۱۰)$$

به‌آسانی می‌توان دید که

$$r' = (x'^{۲} + y'^{۲} + z'^{۲})^{۱/۲} = (x^{۲} + y^{۲} + z^{۲})^{۱/۲} = r$$

و

$$\left(\frac{\partial}{\partial x'}\right)^{۲} + \left(\frac{\partial}{\partial y'}\right)^{۲} = \left(\cos\ \theta\frac{\partial}{\partial x} - \sin\ \theta\frac{\partial}{\partial y}\right)^{۲} + \left(\sin\ \theta\frac{\partial}{\partial x} + \cos\ \theta\frac{\partial}{\partial y}\right)^{۲}$$
$$= \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^{۲} + \left(\frac{\partial}{\partial y}\right)^{۲}$$

چون هامیلتونی یک ویژگی ناوردایی دارد، انتظار داریم، همچنانکه در مورد پاریته و ناوردایی تحت جابه‌جایی دیدیم، یک قانون پایستگی به‌دست آوریم. برای تعیین عملگرهایی که با H جابه‌جا می‌شوند، یک چرخش بینهایت کوچک حول محور z در نظر می‌گیریم. با نگه داشتن جمله‌هایی که تنها تا مرتبهٔ θ هستند، یعنی

$$\begin{aligned} x' &= x - \theta y \\ y' &= y + \theta x \end{aligned} \qquad (۱۵_۱۰)$$

می‌نویسیم

$$Hu_E(x - \theta y, y + \theta x, z) = Eu_E(x - \theta y, y + \theta x, z) \qquad (۱۶_۱۰)$$

اگر این معادله را تا مرتبهٔ اول برحسب θ بسط دهیم و معادلهٔ

$$Hu_E(x, y, z) = Eu_E(x, y, z) \qquad (۱۷_۱۰)$$

www.arsanjan.blogfa.com

را از آن کم کنیم، به‌دست می‌آوریم

$$H\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)u_E(x,y,z)=E\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)u_E(x,y,z) \quad (۱۰\text{ـ}۱۸)$$

طرف راست این معادله را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)E\,u_E(x,y,z)=\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)H\,u_E(x,y,z) \quad (۱۰\text{ـ}۱۹)$$

اگر تعریف کنیم

$$L_z=\frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)=xp_y-yp_x \quad (۱۰\text{ـ}۲۰)$$

آنگاه از ترکیب ۱۰ـ۱۸ و ۱۰ـ۱۹ به‌دست می‌آوریم

$$(HL_z-L_zH)u_E(x,y,z)=۰$$

چون $u_E(\mathbf{r})$ها یک مجموعهٔ کامل تشکیل می‌دهند، این رابطه موجب رابطهٔ عملگری زیر می‌شود

$$[H,L_z]=۰ \quad (۱۰\text{ـ}۲۱)$$

L_z در اینجا مؤلفهٔ z عملگر تکانهٔ زاویه‌ای زیر است

$$\mathbf{L}=\mathbf{r}\times\mathbf{p} \quad (۱۰\text{ـ}۲۲)$$

اگر چرخش را حول محورهای x و y در نظر بگیریم به دو معادلهٔ زیر می‌رسیم

$$\begin{aligned}[H,L_x]&=۰\\ [H,L_y]&=۰\end{aligned} \quad (۱۰\text{ـ}۲۳)$$

بنابراین، سه مؤلفهٔ عملگر تکانهٔ زاویه‌ای با هامیلتونی جابه‌جا می‌شوند، یعنی تکانهٔ زاویه‌ای یک ثابت حرکت است. این نتیجه با این قانون کلاسیک که نیروهای مرکزی پایستگی تکانهٔ زاویه‌ای را ایجاب می‌کنند همسنگ است.

www.arsanjan.blogfa.com

رابطهٔ جابه‌جایی تکانهٔ زاویه‌ای

عملگرهای H، L_x، L_y و L_z یک مجموعهٔ کامل از مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده تشکیل نمی‌دهند و از این‌رو نمی‌توانند ویژه‌تابعهای همزمان داشته باشند. برای مثال،

$$\begin{aligned}[L_x, L_y] &= [yp_z - zp_{y'} zp_x - xp_z] \\ &= [yp_z, zp_x] - [zp_y, zp_x] - [yp_z, xp_z] + [zp_{y'}, xp_z] \\ &= y[p_z, z]p_x + x[z, p_z]p_y \\ &= \frac{\hbar}{i}(yp_x - zp_y) \qquad (۲۴\text{-}۱۰) \\ &= i\hbar L_z\end{aligned}$$

به‌همین ترتیب، به‌دست می‌آوریم

$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x \qquad (۲۵\text{-}۱۰)$$

$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y \qquad (۲۶\text{-}۱۰)$$

رابطه‌های جابه‌جایی ۱۰ـ۲۴ تا ۱۰ـ۲۷ را می‌توان در فرمول زیر خلاصه کرد

$$\mathbf{L} \times \mathbf{L} = i\hbar \mathbf{L}$$

یک پیامد این رابطه‌های جابه‌جایی این است که تنها یک مؤلفهٔ $\mathbf{L}$ را می‌توان با H برای تشکیل مجموعهٔ مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده برگزید. برای اثبات، فرض کنید ویژه‌تابعی از L_x با ویژه‌مقدار l_1 داریم که به‌طور همزمان ویژه‌تابع L_y با ویژه‌مقدار l_2 نیز هست:

$$L_x u = l_1 u$$
$$L_y u = l_2 u$$

بنابراین، باید $L_x L_y u = l_1 l_2 u$ و $L_y L_x u = l_2 l_1 u$. در نتیجه، با توجه به ۱۰ـ۲۴ به‌دست می‌آوریم $L_z u = 0$. اما آنگاه

$$L_y u = \frac{1}{i\hbar}(L_z L_x - L_x L_z)u = \frac{1}{i\hbar} L_z l_1 u = 0$$

www.arsanjan.blogfa.com

این نتیجه ایجاب می‌کند که $l_1 = 0$. بنابراین، تنها برای $\mathbf{L} = 0$ هر سه مؤلفهٔ $\mathbf{L}$ می‌توانند ویژه‌تابعهای همزمان داشته باشند.

بدین‌ترتیب، برای تشکیل مجموعهٔ مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده تنها یک مؤلفهٔ $\mathbf{L}$ را می‌توان با H برگزید. اما می‌توان وضعیت را تا حدی بهتر کرد، زیرا، چنانکه ۱۰ـ۲۴ تا ۱۰ـ۲۶ ایجاب می‌کنند، $\mathbf{L}^2$ با هر سه مؤلفهٔ $\mathbf{L}$ جابه‌جا می‌شود:

$$\begin{aligned}[L_z, \mathbf{L}^2] &= [L_z, L_x^2 + L_y^2 + L_z^2] = [L_z, L_x^2] + [L_z, L_y^2] \\ &= L_x[L_z, L_x] + [L_z, L_x]L_x + L_y[L_z, L_y] + [L_z, L_y]L_y \\ &= i\hbar L_x L_y + i\hbar L_y L_x - i\hbar L_y L_x - i\hbar L_x L_y \qquad (۱۰\text{ـ}۲۷) \\ &= 0\end{aligned}$$

و غیره. بنابراین، عملگرهای H، $\mathbf{L}^2$ و L_z (که این یکی صرفاً قراردادی است) را به‌عنوان مجموعهٔ کامل مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده انتخاب می‌کنیم. می‌توانستیم پاریته را هم اضافه کنیم زیرا واضح است که هامیلتونی تحت $x \to -x$، $y \to -y$ و $z \to -z$ ناوردا است، اما چنانکه بعداً خواهیم دید با تعیین $\mathbf{L}^2$ پاریته نیز تعیین می‌شود.

جداسازی متغیرها برای معادلهٔ شرودینگر

در فصل ۱۱ ویژه‌مقدارها و ویژه‌تابعهای L_z و $\mathbf{L}^2$ را به‌دست می‌آوریم؛ در اینجا تنها متذکر می‌شویم که با استفاده از آنها حل معادلهٔ شرودینگر بسیار ساده‌تر می‌شود. این وضعیت پیامد رابطه‌ای است که در زیر به‌دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned}\mathbf{L}^2 = (\mathbf{r} \times \mathbf{p})^2 =& [(\mathbf{r} \times \mathbf{p})_x]^2 + [(\mathbf{r} \times \mathbf{p})_y]^2 + [(\mathbf{r} \times \mathbf{p})_z]^2 \\ =& -\hbar^2 \left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \\ & -\hbar^2 \left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \\ & -\hbar^2 \left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \\ =& -\hbar^2 \left[x^2\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + y^2\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\right.\end{aligned}$$

www.arsanjan.blogfa.com

$$+z^{۲}\left(\frac{\partial^{۲}}{\partial x^{۲}}+\frac{\partial^{۲}}{\partial y^{۲}}\right)-۲xy\frac{\partial^{۲}}{\partial x\partial y}-۲yz\frac{\partial^{۲}}{\partial y\partial z}$$

$$-۲zx\frac{\partial^{۲}}{\partial z\partial x}-۲x\frac{\partial}{\partial x}-۲y\frac{\partial}{\partial y}-۲z\frac{\partial}{\partial z}\Bigg]$$

و همچنین داریم

$$\begin{aligned}(\mathbf{r}\cdot\mathbf{p})^{۲} &= -\hbar^{۲}\left(x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z}\right)\left(x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z}\right)\\ &= -\hbar^{۲}\left(x^{۲}\frac{\partial^{۲}}{\partial x^{۲}}+y^{۲}\frac{\partial^{۲}}{\partial y^{۲}}+z^{۲}\frac{\partial^{۲}}{\partial z^{۲}}+۲xy\frac{\partial^{۲}}{\partial x\partial y}+۲yz\frac{\partial^{۲}}{\partial y\partial z}\right.\\ &\quad\left.+۲zx\frac{\partial^{۲}}{\partial z\partial x}+x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z}\right)\end{aligned}\tag{۲۸_۱۰}$$

مجموع این دو برابر است با

$$-\hbar^{۲}(x^{۲}+y^{۲}+z^{۲})\left(\frac{\partial^{۲}}{\partial x^{۲}}+\frac{\partial^{۲}}{\partial y^{۲}}+\frac{\partial^{۲}}{\partial z^{۲}}\right)+\hbar^{۲}\left(x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z}\right)\tag{۲۹_۱۰}$$

بنابراین، اتحاد زیر را به‌دست می‌آوریم

$$\mathbf{L}^{۲}+(\mathbf{r}\cdot\mathbf{p})^{۲}=r^{۲}\mathbf{p}^{۲}+i\hbar\mathbf{r}\cdot\mathbf{p}\tag{۳۰_۱۰}$$

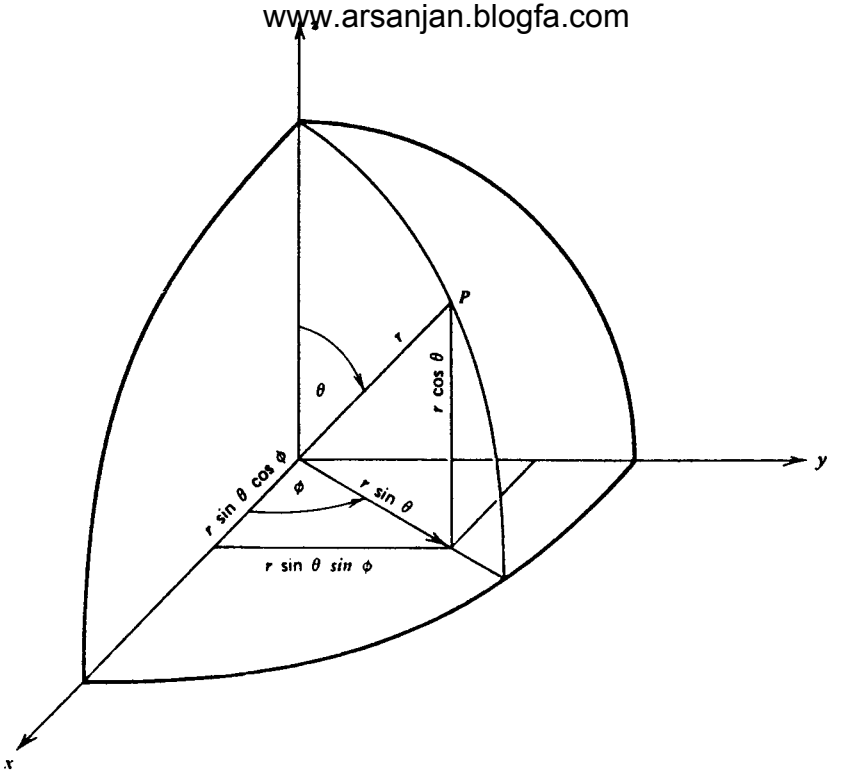
چون با عملگرها سروکار داریم، رعایت ترتیب عوامل ضروری است. از اتحاد بالا نتیجه می‌گیریم که

$$\mathbf{p}^{۲}=\frac{۱}{r^{۲}}\left[\mathbf{L}^{۲}+(\mathbf{r}\cdot\mathbf{p})^{۲}-i\hbar\mathbf{r}\cdot\mathbf{p}\right]\tag{۳۱_۱۰}$$

این رابطه به این دلیل با نتیجهٔ کلاسیک ۱۰ـ۱۳ تفاوت دارد که $\mathbf{r}$ و $\mathbf{p}$ جابه‌جا نمی‌شوند. با

$$\mathbf{p}^{۲}=\frac{۱}{r^{۲}}\mathbf{L}^{۲}-\hbar^{۲}\frac{۱}{r^{۲}}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)^{۲}-\hbar^{۲}\frac{۱}{r}\frac{\partial}{\partial r}\tag{۳۲_۱۰}$$

www.arsanjan.blogfa.com



شکل ۱۰ـ۱ تعریف مختصات کروی (r, θ, ϕ) و رابطهٔ آنها با مختصات دکارتی (x, y, z).

معادلهٔ شرودینگر به‌صورت زیر درمی‌آید

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{\hbar^2 r^2}\mathbf{L}^2\right]u_E(\mathbf{r})+V(r)u_E(\mathbf{r})=Eu_E(\mathbf{r}) \qquad (۳۳\text{ـ}۱۰)$$

اگر در مختصات کروی کار کنیم (شکل ۱۰ـ۱)، که طبعاً باید چنین باشد، آنگاه تنها عملگری که زاویه‌های قطبی θ و ϕ در آن دخالت دارند $\mathbf{L}^2$ است. بنابراین، اگر ویژه‌تابعها را به‌صورت زیر بنویسیم

$$u_E(\mathbf{r}) = Y_\lambda(\theta,\phi)R_{E\lambda}(r) \qquad (۳۴\text{ـ}۱۰)$$

که در آن Y_λ ویژه‌تابع عملگر $\mathbf{L}^2$ است:

$$\mathbf{L}^2 Y_\lambda(\theta,\phi) = \lambda\, Y_\lambda(\theta,\phi) \qquad (۳۵\text{ـ}۱۰)$$

www.arsanjan.blogfa.com

آنگاه معادلهٔ ۱۰ـ۳۴ به معادلهٔ ویژه‌مقداری $\mathbf{L}^2$ (معادلهٔ ۱۰ـ۱۵) و یک معادلهٔ صرفاً شعاعی (معادلهٔ ۱۰ـ۳۹) تفکیک می‌شود. روش بالا واقعاً تفاوتی با روش مرسوم جداسازی متغیرها ندارد، اما در آن بر نقش تقارن در تعیین مجموعهٔ کامل عملگرهای جابه‌جاشونده تأکید شده است.

λ چنانکه باید دارای ابعاد $\hbar^2$ است، و آن‌را به‌صورت زیر می‌نویسیم

$$\lambda = l(l+1)\hbar^2 \qquad (۱۰ـ۳۶)$$

در فصل بعد ثابت می‌کنیم که $l = 0, 1, 2, 3, \ldots$، و در تحلیل زیر از این نتیجه استفاده خواهیم کرد. ویژه‌تابعهای عملگر $\mathbf{L}^2$ را در واقع به‌صورت $Y_{lm}(\theta,\phi)$ می‌نویسیم که در آن شاخص پایین m نشان می‌دهد که $Y_{lm}(\theta,\phi)$ ویژه‌تابع همزمان $\mathbf{L}^2$ و L_z است:

$$L_z Y_{lm}(\theta,\phi) = m\hbar Y_{lm}(\theta,\phi) \qquad (۱۰ـ۳۷)$$

قبلاً گفتیم که l یک عدد درست است، و خواهیم دید که m نیز یک عدد درست است که در $-l \le m \le l$ صدق می‌کند. چون Y_{lm} ویژه‌تابع عملگرهای هرمیتی است، Y_{lm}های متناظر با ویژه‌مقدارهای مختلف متعامد هستند. در فصل بعد ثابت می‌کنیم که وقتی این ویژه‌تابعها به‌طور مناسب بهنجار شده باشند، داریم

$$\int d\Omega\, Y_{l_1 m_1}(\theta,\phi)^* Y_{l_2 m_2}(\theta,\phi) \equiv \int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\, Y_{l_1 m_1}(\theta,\phi)^* Y_{l_2 m_2}(\theta,\phi) = \delta_{l_1 l_2}\,\delta_{m_1 m_2} \qquad (۱۰ـ۳۸)$$

معادلهٔ شعاعی

اگر ۱۰ـ۳۴، ۱۰ـ۳۵ و ۱۰ـ۳۶ را در ۱۰ـ۳۳ بگذاریم، معادلهٔ شرودینگر شعاعی زیر را به‌دست می‌آوریم

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{d}{dr}\right)+\frac{1}{r}\frac{d}{dr}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_{Elm}(r)+V(r)R_{Elm}(r)=ER_{Elm} \qquad (۱۰ـ۳۹)$$

توجه کنید که در این معادله وابستگی به m وجود ندارد. بنابراین، به‌ازای یک مقدار معین l همیشه یک واگنی $(2l+1)$تایی داریم، زیرا تمام مقادیر ممکن m دارای یک انرژی هستند. معادلهٔ ۱۰ـ۳۹

www.arsanjan.blogfa.com

را، با حذف شاخص زائد m، می‌نویسیم. با جایگذاری توابع شعاعی، می‌توان به‌صورت زیر درآورد

$$\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)R_{nl}(r)-\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right]R_{nl}(r)+\frac{2\mu E}{\hbar^2}R_{nl}(r)=0 \qquad (۴۰_۱۰)$$

جوابهای این معادله را برای انواعی از پتانسیل بررسی می‌کنیم که در بینهایت سریعتر از $1/r$ به صفر میل می‌کنند، به‌استثنای مورد مهم پتانسیل کولنی که در فصل ۱۲ بیان خواهیم کرد. همچنین فرض می‌کنیم این پتانسیلها در مبدأ به اندازهٔ $1/r^2$ تکین نیستند، و در نتیجه

$$\lim_{r\to 0} r^2V(r)=0 \qquad (۴۱_۱۰)$$

گاهی بهتر است تابع زیر را وارد کنیم

$$u_{nl}(r)=rR_{nl}(r) \qquad (۴۲_۱۰)$$

از آنجا که

$$\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)\frac{u_{nl}(r)}{r}=\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}u_{nl}(r) \qquad (۴۳_۱۰)$$

به‌دست می‌آوریم

$$\frac{d^2u_{nl}(r)}{dr^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E-V(r)-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u_{nl}(r)=0 \qquad (۴۴_۱۰)$$

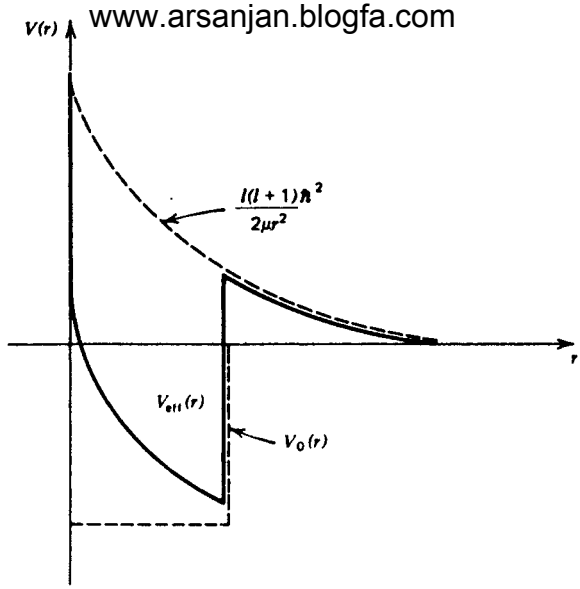
این معادله شباهت بسیار زیادی با معادلهٔ یک‌بعدی دارد، بجز اینکه
(الف) به پتانسیل $V(r)$ یک سد دافعهٔ مرکزگریزی اضافه شده است:

$$V(r)\to V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \qquad (۴۵_۱۰)$$

(ب) تعریف $u_{nl}(r)$ و متناهی بودن تابع‌موج در مبدأ ایجاب می‌کنند که

$$u_{nl}(0)=0 \qquad (۴۶_۱۰)$$

www.arsanjan.blogfa.com



شکل ۱۰ـ۲ پتانسیل مؤثر در معادلهٔ شعاعی برای $u = rR(r)$ وقتی پتانسیل واقعی یک چاه مستطیلی است.

که در نتیجه معادله بیشتر شبیه مسئلهٔ یک‌بعدی می‌شود که برای آن در ناحیهٔ سمت چپ مبدأ $V = +\infty$ (شکل ۱۰ـ۲).

ابتدا معادلهٔ شعاعی را، با حذف تمام شاخصهای پایین برای سادگی، در نزدیکی مبدأ در نظر می‌گیریم. وقتی $r \to 0$، با نگه داشتن جمله‌های مهم، معادلهٔ شعاعی به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\frac{d^2u}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}u \simeq 0 \qquad (۴۷_۱۰)$$

زیرا پتانسیل به‌ازای مقادیر به‌اندازهٔ کافی کوچک r وقتی شرط ۴۱ـ۱۰ برقرار باشد سهمی ندارد. اگر حدس زیر را به‌کار ببریم

$$u(r) \sim r^s \qquad (۴۸_۱۰)$$

می‌بینیم که معادله به‌شرطی صادق است که

$$s(s-1) - l(l+1) = 0 \qquad (۴۹_۱۰)$$

یعنی $s = l + 1$ یا $s = -l$. جوابی که در شرط $u(0) = 0$ صدق می‌کند، یعنی جوابی که مانند r^{l+1} رفتار می‌کند، جواب منظم نامیده می‌شود. جوابی که مانند r^{-l} رفتار می‌کند جواب

نامنظم است. برای تابع‌موج شعاعی $R(r)$ داریم r^l و جواب نامنظم به‌صورت r^{-l-1} است.

www.ariamjan.blogfa.com

به‌ازای مقادیر بزرگ r می‌توان جمله‌های پتانسیل را حذف کرد، و معادله به‌صورت زیر در می‌آید

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2}u \simeq 0 \qquad (۵۰_۱۰)$$

شرط انتگرال‌پذیری مجذوری ایجاب می‌کند که

$$1 = \int d^3r|\psi(\mathbf{r})|^2 = \int_0^\infty r^2\, dr \int d\Omega|R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi)|^2$$
$$= \int_0^\infty r^2\, dr|R_{nl}(r)|^2 \qquad (۵۱_۱۰)$$

یعنی

$$\int_0^\infty dr|u_{nl}(r)|^2 = 1 \qquad (۵۲_۱۰)$$

بنابراین، تابع‌موج باید در بینهایت صفر شود. اگر $E < 0$، و در نتیجه

$$\frac{2\mu E}{\hbar^2} = -\alpha^2 \qquad (۵۳_۱۰)$$

جواب مجانبی به‌صورت زیر است

$$u(r) \sim e^{-\alpha r} \qquad (۵۴_۱۰)$$

اگر $E > 0$، جوابهایی که به‌دست می‌آوریم تنها در جعبه هنجارپذیر هستند (به‌بحث مربوط در فصل ۴ مراجعه کنید). با

$$\frac{2\mu E}{\hbar^2} = k^2 \qquad (۵۵_۱۰)$$

جواب به‌ازای مقادیر به اندازهٔ کافی بزرگ r به‌طوری که $V(r)$ قابل چشمپوشی باشد به‌صورت ترکیبی خطی از e^{ikr} و e^{-ikr} است، و ترکیب مناسب از این شرط تعیین می‌شود که جواب مجانبی به‌طور پیوسته به جوابی که در مبدأ منظم است متصل شود. اکنون به بررسی چند مثال می‌پردازیم.

www.arsanjan.blogfa.com

ذرهٔ آزاد

در این مثال $V(r) = ۰$، اما هنوز هم یک سد مرکزگریزی وجود دارد. معادلهٔ شعاعی ۱۰ـ۴۰ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\left[\frac{d^۲}{dr^۲} + \frac{۲}{r}\frac{d}{dr} - \frac{l(l+۱)}{r^۲}\right] R(r) + k^۲ R(r) = ۰ \qquad (۵۶\text{ـ}۱۰)$$

با معرفی متغیر $\rho = kr$ به‌دست می‌آوریم

$$\frac{d^۲R}{d\rho^۲} + \frac{۲}{\rho}\frac{dR}{d\rho} - \frac{l(l+۱)}{\rho^۲}R + R = ۰ \qquad (۵۷\text{ـ}۱۰)$$

یا

$$\frac{d^۲u}{d\rho^۲} - \frac{l(l+۱)}{\rho^۲}u + u = ۰$$

این معادله به‌ازای $l = ۰$ به‌صورت $d^۲u/d\rho^۲ + u = ۰$ درمی‌آید که جوابهای آن $\sin\rho$ و $\cos\rho$ هستند، یعنی جواب منظم عبارت است از

$$R_۰(\rho) = \frac{\sin\rho}{\rho} \qquad (۵۸\text{ـ}۱۰)$$

و جواب نامنظم به‌صورت زیر است

$$R_۰(\rho) = \frac{\cos\rho}{\rho} \qquad (۵۹\text{ـ}۱۰)$$

به‌ازای مقادیر دیگر l، جوابها را می‌توان برحسب توابع ساده‌ای بیان کرد. جواب منظم تابع بسل کروی است که با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$j_l(\rho) = (-\rho)^l \left(\frac{۱}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^l \left(\frac{\sin\rho}{\rho}\right) \qquad (۶۰\text{ـ}۱۰)$$

و جواب نامنظم که تابع نویمان کروی نامیده می‌شود به‌صورت زیر است

$$n_l(\rho) = -(-\rho)^l \left(\frac{۱}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^l \left(\frac{\cos\rho}{\rho}\right) \qquad (۶۱\text{ـ}۱۰)$$

www.arsanjan.blogfa.com

از این توابع چند تای اول را می‌توان به‌صورت

$$
\begin{aligned}
j_0(\rho) &= \frac{\sin\ \rho}{\rho} \qquad n_0(\rho) = -\frac{\cos\ \rho}{\rho} \\
j_1(\rho) &= \frac{\sin\ \rho}{\rho^2} - \frac{\cos\ \rho}{\rho} \qquad n_1(\rho) = -\frac{\cos\ \rho}{\rho^2} - \frac{\sin\ \rho}{\rho} \\
j_2(\rho) &= \left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho}\right)\sin\ \rho - \frac{3}{\rho^2}\cos\ \rho \\
n_2(\rho) &= -\left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho}\right)\cos\ \rho - \frac{3}{\rho^2}\sin\ \rho
\end{aligned}
\qquad (۶۲_۱۰)
$$

ترکیبهای مناسب برای مقادیر بزرگ ρ عبارت‌اند از توابع هنکل کروی

$$h_l^{(1)}(\rho) = j_l(\rho) + i n_l(\rho) \qquad (۶۳_۱۰)$$

و

$$h_l^{(2)}(\rho) = [h_l^{(1)}(\rho)]^* \qquad (۶۴_۱۰)$$

چند تابع هنکل کروی را هم در زیر می‌نویسیم

$$
\begin{aligned}
h_0^{(1)}(\rho) &= \frac{e^{i\rho}}{i\rho} \\
h_1^{(1)}(\rho) &= -\frac{e^{i\rho}}{\rho}\left(1 + \frac{i}{\rho}\right) \\
h_2^{(1)}(\rho) &= \frac{i\ e^{i\rho}}{\rho}\left(1 + \frac{3i}{\rho} - \frac{3}{\rho^2}\right)
\end{aligned}
\qquad (۶۵_۱۰)
$$

موارد زیر مخصوصاً قابل توجه‌اند.

(الف) رفتار در نزدیکی مبدأ: به‌ازای $\rho \ll l$ به‌دست می‌آوریم

$$j_l(\rho) \approx \frac{\rho^l}{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot \cdots \cdot (2l+1)} \qquad (۶۶_۱۰)$$

و

$$n_l(\rho) \simeq -\frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \cdots \cdot (2l-1)}{\rho^{l+1}} \qquad (۶۷_۱۰)$$

www.arsanjan.blogfa.com

(ب) به‌ازای $\rho \ll l$ رابطه‌های مجانبی زیر را به‌دست می‌آوریم

$$j_l(\rho) \simeq \frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right) \qquad (۶۸_۱۰)$$

و

$$n_l(\rho) \simeq -\frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right) \qquad (۶۹_۱۰)$$

و در نتیجه

$$h_l^{(1)}(\rho) \simeq -\frac{i}{\rho} e^{i(\rho - l\pi/2)} \qquad (۷۰_۱۰)$$

جوابی که در مبدأ منظم است به‌صورت زیر است

$$R_l(r) = j_l(kr) \qquad (۷۱_۱۰)$$

و صورت مجانبی آن، با استفاده از ۱۰ـ۶۸، عبارت است از

$$R_l(r) \simeq -\frac{1}{2ikr}[e^{-i(kr - l\pi/2)} - e^{i(kr - l\pi/2)}] \qquad (۷۲_۱۰)$$

چاه پتانسیل نامتناهی

چاه پتانسیل نامتناهی سه‌بعدی زیر را در نظر بگیرید

$$\begin{aligned} V(r) &= 0 \qquad r < a \\ &= \infty \qquad r > a \end{aligned} \qquad (۷۳_۱۰)$$

در این مورد، با

$$\frac{2\mu E}{\hbar^2} = k^2 \qquad (۷۴_۱۰)$$

جوابی که در $r = 0$ منظم است عبارت است از

$$R(r) = A j_l(kr) \qquad (۷۵_۱۰)$$

www.arsanjan.blogfa.com

و ویژه‌مقدارها از شرط صفر شدن تابع موج در $r = a$ به‌دست می‌آیند، یعنی از

$$j_l(ka) = 0 \qquad (۷۶_۱۰)$$

ریشه‌های این معادله به‌ازای چند مقدار l در جدول زیر نوشته شده‌اند

$l = 0$	۱	۲	۳	۴	۵
۳٫۱۴	۴٫۴۹	۵٫۷۶	۶٫۹۹	۸٫۱۸	۹٫۳۶
۶٫۲۸	۷٫۷۳	۹٫۱۰	۱۰٫۲۴		
۹٫۴۲					

از ۱۰ـ۶۸ نتیجه می‌گیریم که به‌ازای مقادیر بزرگ ka (در واقع $ka \gg l$) این ریشه‌ها از $ka \approx n\pi + l\pi/2$ به‌دست می‌آیند.

مجموعهٔ کامل ویژه‌تابعهای همزمان H، $\mathbf{L}^2$ و L_z عبارت‌اند از

$$u_{nl}(r) = Aj_l(k_{ln}r)Y_{lm}(\theta, \phi) \qquad (۷۷_۱۰)$$

که در آن k_{nl}ها از $j_l(k_{nl}a) = 0$ به‌دست می‌آیند، و A ضریب بهنجارش است. توجه کنید که به‌ازای هر یک از نامساویهای $n \neq n'$ و $l \neq l'$ داریم

$$\int d^3r\, u_{n'l'}(\mathbf{r})u_{nl}(\mathbf{r}) = 0 \qquad (۷۸_۱۰)$$

تعامد نسبت به اعداد کوانتومی l و m به Y_{lm}ها مربوط می‌شود. تعامد نسبت به عدد n، که ویژه‌مقدارهای مختلف انرژی را به‌ازای مقادیر ثابت l و m متمایز می‌کند، نیز مسلماً باید وجود داشته باشد، و در واقع در بحث توابع بسل داریم

$$\int_0^1 dt\, j_l(\alpha_m t)j_l(\alpha_n t) = 0 \qquad m \neq n \qquad (۷۹_۱۰)$$

که در آن $j_l(\alpha_n) = 0$. این رابطه هم‌ارز رابطهٔ تعامد توابع شعاعی مربوط به مقادیر مختلف عدد کوانتومی شعاعی n است.

طیف چاه مستطیلی نامتناهی را می‌توان به‌صورت زیر توصیف کرد: اگر به‌ازای یک مقدار معین l، اولین ریشه را با $n = 1$ نشانگذاری کنیم، دومین ریشه را با $n = 2$، و غیره، و اگر از

www.arsanjan.blogfa.com

نمادنگاری مرسوم طیف نمایی برای مقادیر مختلف l استفاده کنیم.

$$S:\ l=۰$$
$$P:\ l=۱$$
$$D:\ l=۲$$
$$F:\ l=۳$$
$$G:\ l=۴$$

آنگاه ترتیب ترازها به‌صورت زیر خواهد بود

$$۱S;\ ۱P;\ ۱D;\ ۲S;\ ۱F;\ ۲P;\ ۱G;\ ۲D;\ ۱H;\ ۳S;\ \cdots$$

به‌عنوان یک الگو، هسته را متشکل از نوترونها و پروتونها در یک چاه نامتناهی می‌گیریم. چون نوترونها و پروتونها ذراتی با اسپین ۱/۲ یعنی فرمیون هستند، بیشتر از دو نوترون و بیشتر از دو پروتون نمی‌توانند یک حالت معین را اشغال کنند. اگر تنها پروتونها را در نظر بگیریم، می‌بینیم که در حالت $۱S$ تنها دو پروتون می‌توانند وجود داشته باشند. برای تراز بعدی $(۱D)$ داریم $l=۱$، و در نتیجه سه حالت (متناظر با سه مقدار ممکن m) وجود دارند، و از این‌رو این تراز با شش پروتون پر می‌شود. برای تراز $۱D$، با پنج مقدار ممکن m (زیرا $l=۲$)، ده پروتون برای پر کردن این "پوسته" لازم‌اند. بدین‌ترتیب، ترازها وقتی پر می‌شوند که تعداد پروتونها برابر باشد با ۲، ۸(= ۲ + ۶)، ۱۸(= ۲ + ۶ + ۱۰)، ۲۰(= ۱۸ + ۲)، ۳۲(= ۲۰ + ۱۴)، ۴۰، ۵۸، ۹۰، ۹۲، ۱۰۶، ...، و همچنین است برای نوترونها. بررسی هسته‌های واقعی نشان می‌دهد که برای اعداد "جادویی" ۲، ۸، ۲۰، ۲۸، ۵۰، ۸۲، ۱۲۶، ... هسته‌ها ویژگیهای خاصی از خود نشان می‌دهند که می‌توان آنها را به ترازهای پر، یعنی پوسته‌های بسته، نسبت داد. تفاوت میان اعداد "جادویی" واقعی و آنهایی که از الگوی ابتدایی بالا به‌دست می‌آیند ناشی از آن است که یک پتانسیل اضافی وابسته به اسپین وجود دارد و این پتانسیل ترازها را کم‌وبیش جابه‌جا می‌کند و از این‌رو ترتیب اعداد تغییر می‌کند. الگوی پوسته‌ای هسته، اگر به‌طور مناسب ساخته شود، بسیاری از خواص هسته‌ها را توضیح می‌دهد.

شاید اینکه در نظر گرفتن هسته‌ها به‌صورت ذرات مستقل در یک چاه تقریب خوبی به‌دست می‌دهد کمی اسرارآمیز به‌نظر برسد، چون می‌دانیم نیروهای بین نوکلئونها بسیار قوی هستند. توضیح در اصل طرد نهفته است. هسته‌ها در یک چاه از طریق برخورد با یکدیگر برهم‌کنش می‌کنند. یک برخورد به‌طور کلی باعث می‌شود که نوکلئون به‌حالت کوانتومی دیگری پراکنده شود. در حالت پایه،

www.arsanjan.blogfa.com

پراکندگی صورت نمی‌گیرد زیرا حالتهای [illegible] در نتیجه نمی‌توانند به‌عنوان حالتهای نهایی قابل دسترسی به‌کار آیند.

در زیر مثال دیگری را بررسی می‌کنیم که مانستهٔ سه‌بعدی تراگسیل و بازتاب از چاهها یا سدهای یک‌بعدی است.

جوابهای پیوستار برای چاه مربعی

پتانسیل زیر را در نظر بگیرید

$$\begin{aligned} V(r) &= -V_\circ & r < a \\ &= \circ & r > a \end{aligned} \qquad (۸۰_۱۰)$$

بنابراین، معادلهٔ شعاعی به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\frac{d^۲R}{dr^۲} + \frac{۲}{r}\frac{dR}{dr} - \frac{l(l+۱)}{r^۲}R + \frac{۲\mu}{\hbar^۲}(V_\circ + E)R = \circ \qquad r < a$$

$$\frac{d^۲R}{dr^۲} + \frac{۲}{r}\frac{dR}{dr} - \frac{l(l+۱)}{r^۲}R + \frac{۲\mu E}{\hbar^۲}R = \circ \qquad r > a \qquad (۸۱_۱۰)$$

جواب برای $r > a$ ترکیبی از جوابهای منظم و نامنظم معادلهٔ بدون میدان است:

$$R_l(r) = Bj_l(kr) + Cn_l(kr) \qquad (۸۲_۱۰)$$

در حالی‌که جواب برای $r < a$ باید جواب منظم باشد، یعنی

$$R_l(r) = Aj_l(\kappa r) \qquad (۸۳_۱۰)$$

که در آن، مانند سابق،

$$\kappa^۲ = \frac{۲\mu(E + V_\circ)}{\hbar^۲} \qquad (۸۴_۱۰)$$

از جورکردن $(۱/R_l)dR_l/dr$ در $r = a$ داریم

$$\kappa\left[\frac{dj_l(\rho)/d\rho}{j_l(\rho)}\right]_{\rho=\kappa a} = k\left[\frac{Bdj_l/d\rho + Cdn_l/d\rho}{Bj_l(\rho) + Cn_l(\rho)}\right]_{\rho=ka} \qquad (۸۵_۱۰)$$

www.arsanjan.blogfa.com

که از آن می‌توان C/B را به‌دست آورد. جواب مجانبی عبارت است از

$$\begin{aligned} R_{nl}(r) \approx & \frac{B}{2ikr}(e^{i(kr-l\pi/2)} - e^{-i(kr-l\pi/2)} \\ & - \frac{C}{2kr}(e^{i(kr-l\pi/2)} + e^{-i(kr-l\pi/2)} \\ \approx & \frac{-C+iB}{2kr}\left[e^{-i(kr-l\pi/2)} + \frac{C+iB}{C-iB}e^{i(kr-l\pi/2)}\right] \end{aligned} \qquad (۸۶_۱۰)$$

ضریب جلوکروشه، غیر از وابستگی لازم $1/r$، اهمیتی ندارد زیرا دامنه را شرط بهنجارش تعیین می‌کند. رابطهٔ میان دو تابع نمایی دارای اهمیت فیزیکی است. قبل از هر چیز، متذکر می‌شویم که این دو جمله امواج کروی را نشان می‌دهند که یکی ورودی و دیگری خروجی است. در غیاب پتانسیل داریم $C = 0$، و ضریب موج کروی خروجی -1 می‌شود. در حضور پتانسیل، این ضریب دارای قدرمطلق ۱ است، زیرا از ۱۰ـ۸۵ می‌توان دید که B/C حقیقی است. بنابراین،

$$\left|\frac{C+iB}{C-iB}\right|^2 = \frac{1+iB/C}{1-iB/C} \times \frac{1-iB/C}{1+iB/C} = 1 \qquad (۸۷_۱۰)$$

این ضریب را بنابه قرارداد به‌صورت زیر می‌نویسیم

$$\frac{C+iB}{C-iB} \equiv -e^{2i\delta_l(k)} \qquad (۸۸_۱۰)$$

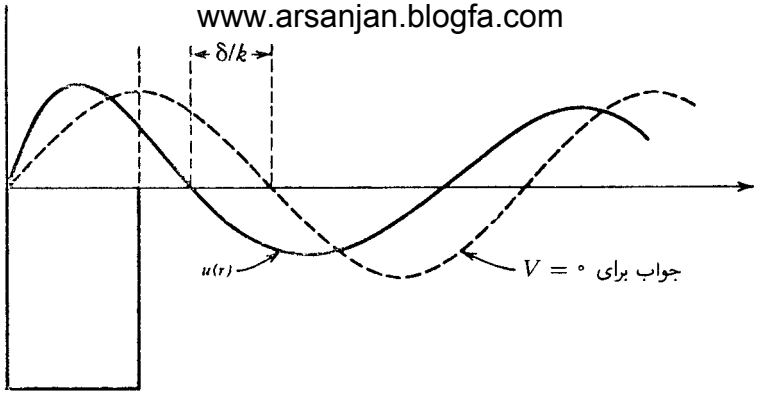
(که معادل است با $C/B = -\tan\delta_l(k)$)، و در نتیجه صورت مجانبی جواب شعاعی $R_{nl}(r)$ عبارت است از

$$R_{nl}(r) \approx \frac{\text{const.}}{r}\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l(k)\right) \qquad (۸۹_۱۰)$$

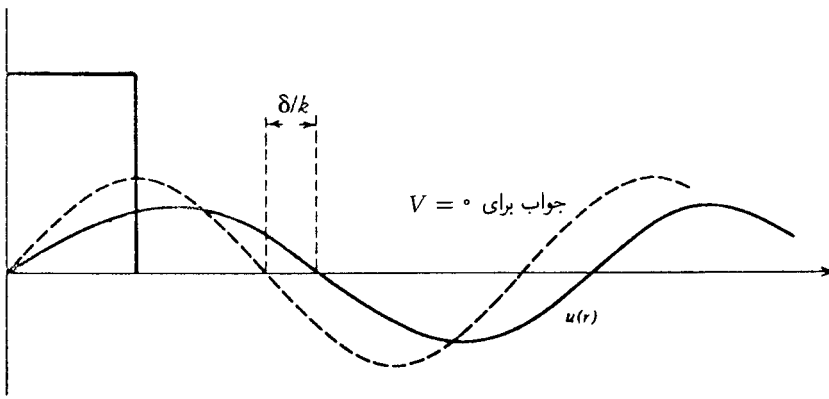
کمیت $\delta_l(k)$ را به‌همین دلیل انتقال فاز می‌نامند. در واقع، ۱۰ـ۸۹ صورت مجانبی به‌ازای هر پتانسیل حقیقی است، زیرا مجذور قدرمطلق ضریب موج کروی ورودی باید با مجذور قدرمطلق ضریب موج خروجی برابر باشد. این همان بیان پایستگی شار است: برای یک پتانسیل حقیقی، ذرات نه به وجود می‌آیند و نه پتانسیل آنها را جذب می‌کند.

محاسبهٔ C/B از ۱۰ـ۸۵ بجز برای $l = 0$ عملاً پرزحمت است. همچون در مسئلهٔ حالت مقید، استفاده از $u(r) = rR(r)$ محاسبه را تا حد زیادی ساده می‌کند. تنها کافی است $A\sin kr$ را با $B\sin kr + C$ در $r = a$ جور کنیم تا رابطه‌ای برای $\tan\delta_0$ به‌دست آید.

www.arsanjan.blogfa.com



شکل ۱۰ـ۳ جواب پیوستار $u(r) = rR(r)$ برای پتانسیل جاذبه (با $l = 0$).



شکل ۱۰ـ۴ جواب پیوستار $u(r) = rR(r)$ برای پتانسیل دافعه (با $l = 0$).

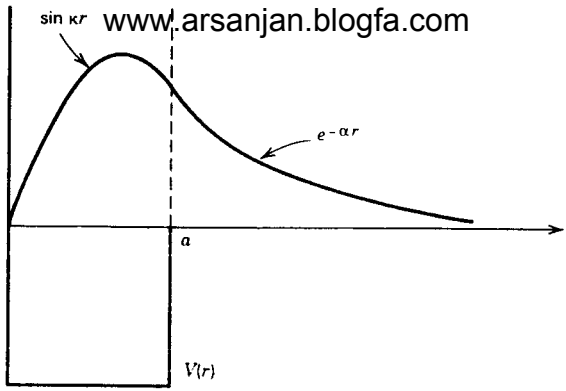
برای این مورد، نمودار کلی نتایج را در شکلهای ۱۰ـ۳ و ۱۰ـ۴ ترسیم کرده‌ایم. این شکلها نشان می‌دهند که پتانسیل جاذبه تمایل دارد تابع‌موج را "به‌درون بکشد"، در حالی‌که پتانسیل دافعه می‌خواهد آن‌را "به بیرون براند". در فصل ۴، در بحث نظریهٔ برخورد، به این مطالب باز می‌گردیم.

چاه مربعی، حالتهای مقید

می‌خواهیم جوابهای حالت مقید را، که برای آنها $E < 0$، به‌دست آوریم. می‌نویسیم

$$\frac{2\mu}{\hbar^2}(V_0 + E) = \kappa^2$$
$$\frac{2\mu}{\hbar^2}E = -\alpha^2 \qquad (۹۰_۱۰)$$

www.arsanjan.blogfa.com



شکل ۱۰ـ۵ نمودار کلی تابع‌موج $u(r) = rR(r)$ برای چاه مربعی جاذبه وقتی تنها یک حالت مقید وجود دارد (با $l = 0$).

جواب در $r < a$، که باید در مبدأ منظم باشد، عبارت است از

$$R(r) = Aj_l(\kappa r) \qquad (۹۱_۱۰)$$

جواب در $r > a$ باید به‌ازای $r \to \infty$ صفر شود. معادلهٔ دوم ۱۰ـ۸۱ درست معادلهٔ مربوط به این تابع بسل کروی است بجز اینکه $i\alpha$ به‌جای k می‌نشیند. جوابی که مانند e^{ikr} رفتار می‌کند اکنون نمایی نزولی می‌شود، یعنی برای $r > a$ داریم

$$R(r) = Bh_l^{(1)}(i\alpha r) \qquad (۹۲_۱۰)$$

این دو جواب، و همچنین مشتقهای آنها، باید در $r = a$ جور شوند. بنابراین، شرط زیر را به‌دست می‌آوریم

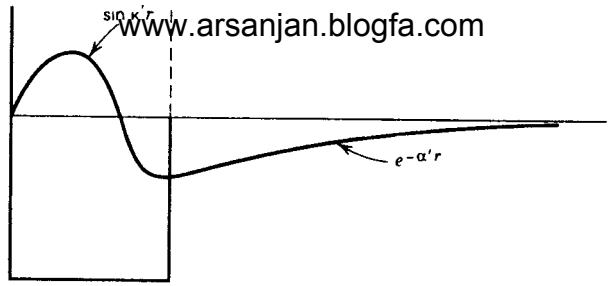
$$\kappa \left[\frac{dj_l(\rho)/d\rho}{j_l(\rho)}\right]_{\rho=\kappa a} = i\alpha \left[\frac{dh_l^{(1)}(\rho)/d\rho}{h_1^{(1)}(\rho)}\right]_{\rho=i\alpha a} \qquad (۹۳_۱۰)$$

این یک معادلهٔ غیرجبری بسیار پیچیده است که در آن l، V_0 و E دخیل‌اند. به‌ازای $l = 0$ مسئله بسیار ساده می‌شود. برحسب $u(r) = rR(r)$، باز هم به وضعیتی می‌رسیم که با پتانسیل یک‌بعدی با $V(x) = \infty$ در $x < 0$ یکسان است. از فصل ۵ (رابطهٔ ۵ـ۶۹) می‌دانیم که در این مورد تنها به شرطی یک یا چند حالت مقید داریم که

$$\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} > \frac{\pi^2}{4}$$

شکلهای ۱۰ـ۵ و ۱۰ـ۶ توابع موج مربوط به دو حالت مقید اول را به‌ازای $l = 0$ نشان می‌دهند.

www.arsanjan.blogfa.com



شکل ۱۰ـ۶ نمودار کلی تابع‌موج $u(r) = rR(r)$ برای چاه مربعی جاذبه وقتی دو حالت مقید وجود دارند (با $l = 0$). در اینجا تنها تابع‌موج مربوط به دومین حالت مقید ترسیم شده است.

مسائل

۱۰ـ۱ تحقیق کنید که P_i، R_i، p_i و r_i در روابط جابه‌جایی ۱۰ـ۷ صدق می‌کنند.

۱۰ـ۲ فرض کنید دوترون (متشکل از یک نوترون و یک پروتون، با جرم مساوی) یک حالت مقید با $l = 0$ است، و پتانسیل یک چاه مربعی به گسترهٔ $r_0 = 2{,}8 \times 10^{-13}\text{cm}$ است. اگر انرژی بستگی $-2{,}18\text{MeV}$ باشد، عمق پتانسیل را به‌دست آورید.

[راهنمایی: حول انرژی بستگی صفر که برای آن V_0 با ۴۱ـ۵ داده می‌شود بسط دهید.]

۱۰ـ۳ انتقال فاز $l = 0$ را برای چاه پتانسیل مربعی محاسبه کنید. با استفاده از روشی که در ۱۰ـ۸۵ خلاصه شده است، مورد پتانسیل جاذبه و دافعه را به‌تفصیل بررسی کنید. دربارهٔ حدهای مختلف، مانند مقادیر بزرگ و کوچک E، و مقادیر بزرگ و کوچک V_0، بحث کنید.

۱۰ـ۴ نشان دهید برای پراکندگی $l = 0$ از یک چاه مستطیلی با گسترهٔ اختیاری و عمق V_0 همواره می‌توان انتقال فاز را به‌صورت زیر نوشت

$$k \cot \delta_0 = -\frac{1}{a} + \frac{r_{\text{eff}} k^2}{2} + 0(k^4)$$

رابطه‌ای برای a و r_{eff} برحسب پارامترهای چاه به‌دست آورید.

۱۰ـ۵ یک پتانسیل با صورت اختیاری که به‌ازای $r \geq a$ صفر می‌شود در نظر بگیرید. فرض کنید مشتق لگاریتمی تابع شعاعی در داخل چاه، یعنی

$$\frac{1}{R} \frac{dR(r)}{dr}\bigg|_{r=a} = f_l(E)$$

برحسب انرژی به کندی تغییر می‌کند. برای $l = 0$:

(الف) اگر پتانسیل دارای حالت مقیدی با انرژی E_B باشد، مقدار $f_0(E_B)$ را محاسبه کنید.

www.arsanjan.blogfa.com

(ب) اگر $f_0(E)$ مستقل از E باشد، انتقال فاز را برحسب انرژی به‌دست آورید.
(ج) اگر $f_0(E) = f_0(E_B) + (E - E_B)f_0'$، f_0' چگونه در انتقال فاز وارد می‌شود؟ ساده‌تر این است که (ب) و (ج) را برحسب $k \cot \delta_0(k)$ حل کنید، و این راه بهتری برای ارائهٔ نتایج است.

۱۰ـ۶ پتانسیل زیر را در نظر بگیرید

$$V(r) = \infty \qquad r < a$$
$$V(r) = 0 \qquad r > a$$

انتقال فاز $l = 0$ را محاسبه کنید، و آن‌را در حد مقادیر بسیار کوچک ka و همچنین در حد مقادیر بسیار بزرگ ka به‌دست آورید. توجه کنید که این پتانسیل الگویی برای کرهٔ نفوذناپذیر است.

۱۰ـ۷ شرط ویژه‌مقدار مربوط به یک چاه پتانسیل مربعی به گسترهٔ a و عمق V_0 را به‌ازای $l = 1$ در نظر بگیرید. رابطه‌ای به‌دست آورید که از آن بتوانید مقدار V_0 را برای انرژی بستگی صفر تعیین کنید.

۱۰ـ۸ نشان دهید که برای چاه مربعی وقتی $k \to 0$، داریم

$$k^{2l+1} \cot \delta_l(k) \to \text{const.}$$

۱۰ـ۹ شار سه‌بعدی با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$\mathbf{j} = \frac{h}{2i\mu}[\psi^*(\mathbf{r})\nabla\psi(\mathbf{r}) - \nabla\psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})]$$

انتگرال شار شعاعی روی تمام زاویه‌ها، یعنی $\int d\Omega \mathbf{i}_r \cdot \mathbf{j}$، را برای توابع موج

$$\psi(\mathbf{r}) = C\frac{e^{\pm ikr}}{r}Y_{lm}(\theta, \phi)$$

با

$$\int d\Omega |Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 = 1$$

محاسبه کنید، و نشان دهید این توابع به امواج کروی ورودی و یا خروجی مربوط می‌شوند.

۱۰ـ۱۰ نشان دهید شار در راستای سمتی، $\mathbf{i}_\theta \cdot \mathbf{j}$، در مقایسه با j_r به‌ازای مقادیر بسیار بزرگ r قابل چشمپوشی است.

۱۰ـ۱۱ معادلهٔ شعاعی $u'' + [k^2 - U(r) - l(l+1)/r^2]u = 0$ (که معادلهٔ شرودینگر نامیده می‌شود) در نظر بگیرید

www.farsanjan.blogfa.com

$$V(r) = V_0 [e^{-2(r-r_0)/a} - 2e^{-(r-r_0)/a}]$$

ویژه‌مقدارهای انرژی را با ساده کردن معادلهٔ دیفرانسیل به‌دست آورید. این کار را با وارد کردن متغیر جدید $x = Ce^{-r/a}$ انجام دهید که در آن C چنان انتخاب می‌شود که معادله تا حد امکان ساده شود. سپس معادله را به روشی که برای مسئلهٔ نوسانگر هماهنگ ساده در فصل ۵ به‌کار برده شد بررسی کنید.

پتانسیل را ترسیم کنید. نشان دهید برای پتانسیل عریض و عمیق حالتهای مقید پایین تقریباً همان حالتهای نوسانگر هماهنگ هستند، و علت را توضیح دهید.

مراجع

خواص عمومی معادلات دیفرانسیل مرتبهٔ دوم در زمینهٔ مکانیک کوانتومی در کتاب زیر بررسی شده‌اند.

پاول جی ل و ب کریسمن، مکانیک کوانتومی، ترجمهٔ پاشایی راد و سعادت، تهران، مرکز نشر دانشگاهی، ۱۳۶۸.

بحث جامعی دربارهٔ این معادله‌ها را می‌توان در کتاب زیر ملاحظه کرد

P M Morse and H Feshbach, *Methods of Theoretical Physics*, McGraw-Hill, New York, 1953.

www.arsanjan.blogfa.com

۱۱

تکانهٔ زاویه‌ای

عملگرهای تکانهٔ زاویه‌ای در مختصات کروی

در این فصل ویژه‌مقدارها و ویژه‌تابعهای عملگرهای L_z و $\mathbf{L}^2$ را به‌دست می‌آوریم. چون تکانهٔ زاویه‌ای دارای ابعاد h است، می‌توان معادله‌های ویژه‌مقداری را به‌صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned} L_z Y_{lm} &= m\hbar Y_{lm} \\ \mathbf{L}^2 Y_{lm} &= l(l+1)\hbar^2 Y_{lm} \end{aligned} \qquad (۱\text{-}۱۱)$$

که در آن m و $l(l+1)$ اعداد حقیقی هستند. مناسبت نوشتن ویژه‌مقدار $\mathbf{L}^2$ به‌این صورت خاص بعداً معلوم خواهد شد. چند روش برای محاسبه وجود دارند. روش مرسوم این است که مؤلفه‌های $\mathbf{L}$ را در مختصات کروی بنویسیم. داریم

$$\begin{aligned} x &= r \sin\theta \cos\phi \\ y &= r \sin\theta \sin\phi \\ z &= r \cos\theta \end{aligned} \qquad (۲\text{-}۱۱)$$

www.arsanjan.blogfa.com

در نتیجه

$$\begin{aligned} dx &= \sin\theta\cos\phi\,dr + r\cos\theta\cos\phi\,d\theta - r\sin\theta\sin\phi\,d\phi \\ dy &= \sin\theta\sin\phi dr + r\cos\theta\sin\phi\,d\theta + r\sin\theta\cos\phi\,d\phi \\ dz &= \cos\theta\,dr - r\sin\theta\,d\theta \end{aligned} \qquad (۳_۱۱)$$

که از حل آنها به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} dr &= \sin\theta\cos\phi\,dx + \sin\theta\sin\phi\,dy + \cos\theta\,dz \\ d\theta &= \frac{1}{r}(\cos\theta\cos\phi\,dx + \cos\theta\sin\phi\,dy - \sin\theta\,dz) \\ d\phi &= \frac{1}{r\sin\theta}(-\sin\phi\,dx + \cos\phi\,dy) \end{aligned} \qquad (۴_۱۱)$$

با استفاده از این معادله‌ها نتیجه می‌گیریم که

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial\phi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\phi} \\ &= \sin\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \sin\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} \\ \frac{\partial}{\partial z} &= \cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} \end{aligned} \qquad (۵_۱۱)$$

بنابراین،

$$L_z = \frac{h}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = \frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial\phi} \qquad (۶_۱۱)$$

با معرفی عملگرهای زیر می‌توان دو مؤلفهٔ دیگر تکانهٔ زاویه‌ای را فشرده‌تر بیان کرد

$$L_\pm = L_x \pm iL_y \qquad (۷_۱۱)$$

www.arsanjan.blogfa.com

در مختصات دکارتی و کروی داریم

$$
\begin{aligned}
L_{\pm} &= \frac{h}{i}\left[y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y} \pm i\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\right] \\
&= \frac{h}{i}\left[\pm iz\left(\frac{\partial}{\partial x} \pm i\frac{\partial}{\partial y}\right) \mp i(x \pm iy)\frac{\partial}{\partial z}\right] \\
&= \pm hr\ \cos\ \theta\ \left(\sin\ \theta\ e^{\pm i\phi}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\ \theta\ e^{\pm i\phi}\frac{\partial}{\partial \theta} \pm \frac{i\ e^{\pm i\phi}}{r\ \sin\ \theta}\ \frac{\partial}{\partial \phi}\right) \\
&\quad \mp hr\ \sin\ \theta\ e^{\pm i\phi}\left(\cos\ \theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\ \theta}{r}\ \frac{\partial}{\partial \theta}\right)
\end{aligned}
\tag{۸ـ۱۱}
$$

بنابراین،

$$
L_{\pm} = h\ e^{\pm i\phi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial \theta} + i\ \cot\ \theta\frac{\partial}{\partial \phi}\right) \tag{۹ـ۱۱}
$$

اکنون با استفاده از رابطهٔ

$$
\begin{aligned}
L_+L_- &= (L_x + iL_y)(L_x - iL_y) \\
&= L_x^2 + L_y^2 - i[L_x, L_y]
\end{aligned}
\tag{۱۰ـ۱۱}
$$

عملگر $\mathbf{L}^2$ را به‌صورت زیر به‌دست می‌آوریم

$$
\begin{aligned}
\mathbf{L}^2 &= L_z^2 + L_+L_- + i[L_x, L_y] \\
&= L_+L_- + L_z^2 - hL_z
\end{aligned}
\tag{۱۱ـ۱۱}
$$

در سطر دوم از ۱۰ـ۲۴ استفاده کرده‌ایم. بدین‌ترتیب، یک عملگر دیفرانسیلی مرتبهٔ دوم شامل θ و ϕ به‌دست می‌آید، و اکنون می‌توانیم به حل معادله‌های دیفرانسیلی مربوط به ۱۱ـ۱ بپردازیم. حل این معادله‌ها در بسیاری از کتابهای درسی مکانیک کوانتومی یا الکترودینامیک کلاسیک بیان می‌شود. در اینجا معادلهٔ دوم ۱۱ـ۱ را به‌روش جبری حل می‌کنیم، اما قبل از آن ویژه‌تابعهای L_z را به‌دست می‌آوریم.

www.arsanjan.blogfa.com

ویژه‌تابعها و ویژه‌مقدارهای L_z

معادلهٔ ویژه‌مقداری

$$L_z Y_{lm} = mhY_{lm} \qquad (۱۲_۱۱)$$

با استفاده از ۱۱ـ۶ به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\frac{\partial}{\partial\phi} Y_{lm}(\theta,\phi) = imY_{lm}(\theta,\phi) \qquad (۱۳_۱۱)$$

و در نتیجه جواب به‌صورت $Y_{lm}(\theta,\phi) = \Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\phi)$ است، که در آن $\Phi_m(\phi)$ جواب معادلهٔ زیر است

$$\frac{d\Phi_m(\phi)}{d\phi} = im\Phi_m(\phi) \qquad (۱۴_۱۱)$$

این جواب با شرط بهنجارش

$$\int_0^{2\pi} d\phi |\Phi_m|^2 = 1 \qquad (۱۵_۱۱)$$

عبارت است از

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \qquad (۱۶_۱۱)$$

گاهی گفته می‌شود که چون چرخش ۳۶۰ درجه‌ای، یعنی تبدیل $\phi \to \phi + 2\pi$، نباید تغییری در دستگاه ایجاد کند لازم است که

$$e^{2\pi im} = 1 \qquad (۱۷_۱۱)$$

و در نتیجه m یک عدد درست است. این استدلال کاملاً صحیح نیست، زیرا کمیتهایی که در مشاهده‌پذیرهای فیزیکی وارد می‌شوند از نوع $\int_0^{2\pi} d\phi\ \psi_1^*(\phi)\ A\psi_2(\phi)$ هستند که در آن توابع موج $\psi(\phi)$ به‌صورت زیر بیان می‌شوند

$$\psi(\phi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} C_m \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}} \qquad (۱۸_۱۱)$$

www.arsanjan.blogfa.com

اگر بخواهیم این توابع موج اختیاری تحت تبدیل $\phi \to \phi + 2\pi$ تغییر نکنند (بجز برای یک عامل فازکلی) به این نتیجه می‌رسیم که کلی‌ترین مقادیر مجاز m عبارت‌اند از $m = \text{عددِدرست} + c$، که c در اینجا یک مقدار ثابت است. تنها اگر عملگر L_z را بخشی از کل مجموعهٔ (L_x, L_y, L_z) در نظر بگیریم می‌توان چیزی دربارهٔ ثابت c گفت. بعداً استدلال خواهیم کرد که ویژه‌مقدارها حول صفر به‌صورت متقارن توزیع شده‌اند، و در نتیجه $c = 0$ یا $c = 1/2$، و برای عملگرهای این فصل تنها مقدار $c = 0$، یعنی این شرط که m یک عدد درست است، را می‌پذیریم.

معادلهٔ ویژه‌مقداری L_z در زمینهٔ دیگری نیز ظاهر می‌شود. یک چرخندهٔ کلاسیک را در نظر بگیرید که در صفحهٔ xy می‌چرخد. اگر گشتاور لختی I باشد، انرژی آن برابر است با

$$E = \frac{L_z^2}{2I} \qquad (۱۹_۱۱)$$

و در نتیجه هامیلتونی عبارت است از

$$H = \frac{L_z^2}{2I} \qquad (۲۰_۱۱)$$

اما به‌آسانی می‌توان دید که ویژه‌مقدارهای این هامیلتونی به‌صورت زیر هستند

$$E_m = \frac{h^2 m^2}{2I} \qquad (۲۱_۱۱)$$

و ویژه‌تابعها عبارت‌اند از $e^{\pm im\phi}$. واگنی وجود دارد، زیرا H با L_z جابه‌جا می‌شود، و به‌ازای یک مقدار معین E_m دو ویژه‌تابع متناظر با دو جهت چرخش وجود دارند. اگر N ذره را با فاصله‌های زاویه‌ای مساوی $2\pi/N$ روی یک دایره به‌طور صلب مستقر کنیم، و اگر این ذرات یکسان باشند، جواب معادلهٔ ویژه‌مقداری انرژی

$$H\Phi_E(\phi) = E\Phi_E(\phi) \qquad (۲۲_۱۱)$$

باز هم به‌صورت $e^{\pm i\lambda\phi}$ خواهد بود. این دستگاه فیزیکی تحت چرخش $2\pi/N$ رادیان (یا مضرب درستی از این زاویه) بدون تغییر می‌ماند، و جوابها باید حاکی از این ناوردایی باشند. همان نوع استدلالهایی که نشان می‌دهند m باید یک عدد درست باشد اکنون ایجاب می‌کنند که $\lambda = N \times$ (عدد درست).[۱] بنابراین، انرژی برابر است با

$$E = \frac{h^2 (Nm)^2}{2I} \qquad (۲۳_۱۱)$$

۱. شاید لازم باشد آزمایش ذهنی دیکی-ویتکه در فصل ۱ را دوباره مرور کنید.

www.arsanjan.blogfa.com

عملگرهای افزاینده و کاهنده برای تکانهٔ زاویه‌ای

اکنون به معادله‌های ۱۱ـ۱ بازمی‌گردیم، و می‌خواهیم ویژه‌مقدارها را به روشی شبیه به مورد نوسانگر هماهنگ در فصل ۷ به‌دست آوریم. ویژه‌تابعهای عملگرهای هرمیتی L_z و $\mathbf{L}^2$، مربوط به ویژه‌مقدارهای مختلف، متعامد هستند، و با بهنجارش مناسب می‌نویسیم

$$\langle Y_{l'm'}|Y_{lm}\rangle = \delta_{ll'}\delta_{mm'} \qquad (۲۴_۱۱)$$

از آنجا که

$$\langle Y_{lm}|(L_x^2+L_y^2+L_z^2)Y_{lm}\rangle = \langle L_xY_{lm}|L_xY_{lm}\rangle + \langle L_yY_{lm}|L_yY_{lm}\rangle + m^2\hbar^2 \geq 0 \qquad (۲۵_۱۱)$$

نتیجه می‌گیریم که

$$l(l+1) \geq 0 \qquad (۲۶_۱۱)$$

عملگرهای $L_\pm$ که در ۱۱ـ۷ معرفی شدند در تحلیل زیر بسیار مفیدند، و خواهیم دید که در واقع عملگرهای افزاینده و کاهنده هستند. قبلاً دیدیم که

$$\mathbf{L}^2 = L_+L_- + L_z^2 - \hbar L_z \qquad (۲۷_۱۱)$$

و می‌توان نشان داد که

$$\mathbf{L}^2 = L_-L_+ + L_z^2 + \hbar L_z \qquad (۲۸_۱۱)$$

از این دو رابطه، و همچنین مستقیماً از ۱۰ـ۲۴، به‌دست می‌آوریم

$$[L_+, L_-] = 2\hbar L_z \qquad (۲۹_۱۱)$$

سایر رابطه‌های جابه‌جایی مربوط عبارت‌اند از

$$[L_+, L_z] = [L_x + iL_y, L_z] = -i\hbar L_y - \hbar L_x = -\hbar L_+ \qquad (۳۰_۱۱)$$