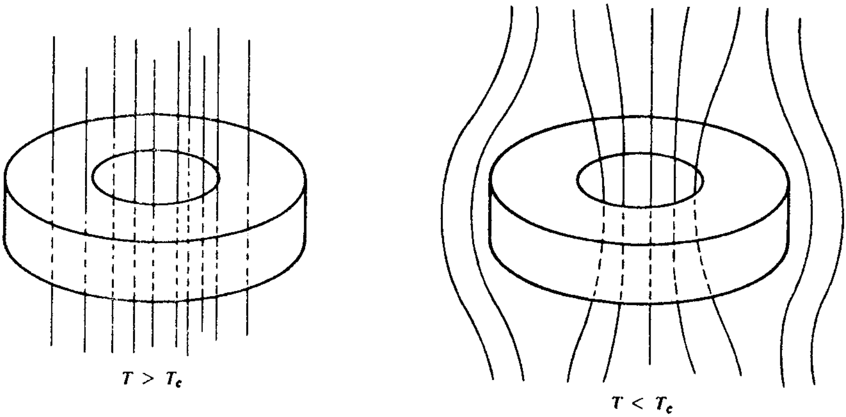
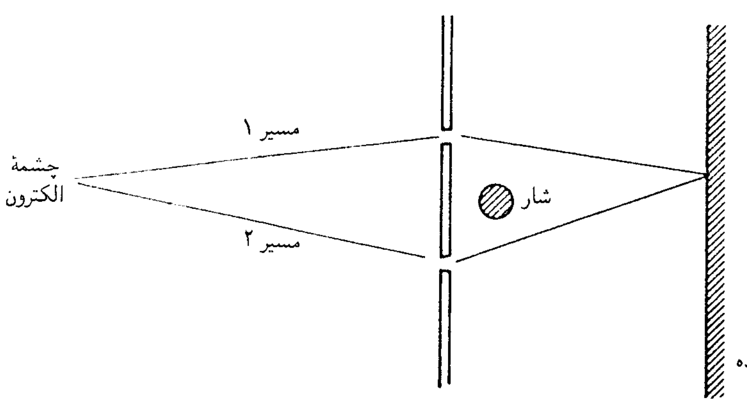


شکل۱۳ـ۴ یک ابررسانا در دمای T که بیشتر از دمای بحرانی T_c است مانند هر فلز معمولی دیگر رفتار می‌کند، و خطهای شار مغناطیسی می‌توانند به درون آن نفوذ کنند. وقتی دما کاهش داده می‌شود تا اینکه $T < T_c$، حلقه ابررسانا می‌شود و خطهای شار مغناطیسی را دفع می‌کند. بعضی از این خطها در حلقه به دام می‌افتند. این شار محصور کوانتیده است.



شکل۱۳ـ۵ طرح کلی آزمایش اندازه‌گیری انتقال نقش تداخل الکترون توسط شار مغناطیسی محصور.

این نتیجه با درک کنونی ما از پدیدهٔ ابررسانایی سازگار است، که بنابه آن "حالتهای همبستهٔ" زوجهای الکترون (با بار $2e$!) موجودات بنیادی هستند که در ابررساناها با آنها سروکار داریم.

نشانهٔ دیگری از وابستگی فاز تابع‌موج به شار را می‌توان، اصولاً، در یک آزمایش تداخل مشاهده کرد که در آن سیملوله‌ای که شار مغناطیسی را محصور می‌کند بین شکافهای دستگاه دوشکافی قرار داده می‌شود (شکل ۱۳ـ۵). نقش تداخل روی پرده ناشی از برهم‌نهش دو قسمت

تابع‌موج است:

$$\psi = \psi_۱ + \psi_۲ \tag{۹۵_۱۳}$$

که در آن $\psi_۱$ معرف قسمتی از تابع‌موج است که الکترونی را توصیف می‌کند که مسیر ۱ را می‌پیماید، و $\psi_۲$ قسمت مربوط به مسیر ۲ است. در حضور سیملوله، داریم

$$\begin{aligned}\psi &= \psi_۱ e^{ie/\hbar c \int_۱ dr\cdot A} + \psi_۲ e^{ie/\hbar c \int_۲ dr\cdot A} \\ &= (\psi_۱ e^{ie\Phi/\hbar c} + \psi_۲) e^{ie/\hbar c \int_۲ dr\cdot A}\end{aligned} \tag{۹۶_۱۳}$$

بنابراین، شار باعث یک تغییر فاز نسبی بین $\psi_۱$ و $\psi_۲$ می‌شود و این فاز نسبی طرح تداخل را تغییر می‌دهد. این اثر، که ابتدا آهارانوف و بوهم متوجه آن شدند، به‌صورت تجربی مشاهده شده است.

مسائل

۱_۱۳ یک ذره به جرم m در یک نوسانگر هماهنگ سه‌بعدی با انرژی پتانسیل $m\omega^۲ r^۲/۲$ دارای طیفی است که از رابطهٔ زیر به‌دست می‌آید

$$E = \hbar\omega(۲n_r + l + ۳/۲)$$

که در آن n_r عدد کوانتومی شعاعی $(n_r = ۰, ۱, ۲, ۳, \ldots)$ و l تکانهٔ زاویه‌ای مداری $(l = ۰, ۱, ۲, ۳, \ldots)$ است. فرض کنید ذره دارای بار q است و در میدان مغناطیسی ضعیف $\mathbf{B}$ قرار دارد. طیف آن‌را برای سه حالت اول انرژی ترسیم کنید.

۲_۱۳ یک اتم پوزیترونیم، از یک الکترون و یک پوزیترون (با بار $e+$ و جرم m_e) را در حالت مقید هیدروژنگونه، را در نظر بگیرید. هامیلتونی این دستگاه را در یک میدان مغناطیسی خارجی ثابت بنویسید، و نشان دهید که (با نادیده گرفتن اسپینهای الکترون و پوزیترون) اثر زیمان روی نمی‌دهد.

۳_۱۳ ذره‌ای به جرم M به یک سر میلهٔ صلب بدون جرمی به طول ثابت R متصل شده است. سر دیگر میله در مبدأ ثابت است، و میله می‌تواند آزادانه حول این نقطهٔ ثابت بچرخد.

(الف) استدلال کنید که چرا هامیلتونی این دستگاه را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$H = \frac{\mathbf{L}^۲}{۲I} = \frac{(\mathbf{R}\times\mathbf{p})^۲}{۲I}$$

که، در آن $I = MR^۲$.

(ب) اگر ذره حامل بار q باشد و این چرخانه در میدان مغناطیسی ثابت $\mathbf{B}$ گذاشته شود، هامیلتونی جدید را به دست آورید.

(ج) طیف انرژی را به‌ازای مقادیر کوچک B تعیین کنید.

۱۳ـ۴ طول‌موجهای سه خط زیمان را در گذار $۲P \to ۳D$ برای هیدروژن در میدان $۱۰^۴\mathrm{G}$ به‌دست آورید.

۱۳ـ۵ توزیع ۱۳ـ۵۵ را در نظر بگیرید:

$$P(x) = x^{۲m} e^{-x^۲} \qquad (m > ۰)$$

که می‌دانیم مقدار آن در $x = \sqrt{m}$ بیشینه است. نشان دهید پهنای این توزیع تقریباً برابر است با $۱/۲\sqrt{m}$.

[راهنمایی: قرار دهید $x = \sqrt{m}(۱ + \delta)$ و $P(x)/P_{\max}$ را محاسبه کنید.]

۱۳ـ۶ نشان دهید برای دستگاهی که با هامیلتونی

$$H = \frac{[\mathbf{p} + (e/c)\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)]^۲}{۲\mu}$$

توصیف می‌شود، شار $\mathbf{j}$، که در معادلهٔ

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi^* \psi + \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{j} = ۰$$

صدق می‌کند، با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{۲i\mu}\left[\psi^* \boldsymbol{\nabla}\psi - \psi \boldsymbol{\nabla}\psi^* + \frac{۲ie}{\hbar c}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)\psi^* \psi\right]$$

۱۳ـ۷ مسئلهٔ ویژه‌مقداری را برای یک ذرهٔ باردار در میدان مغناطیسی $\mathbf{B} = (۰, ۰, B)$ و میدان الکتریکی متعامد $\mathbf{E} = (E, ۰, ۰)$ حل کنید.

[راهنمایی: انتخاب مناسب پیمانه اهمیت دارد.]

۱۳ـ۸ این مسئله مثالی است که نشان می‌دهد چگونه شار مغناطیسی محصور تکانهٔ زاویه‌ای یک ذره را در ناحیهٔ خارج از لولهٔ شار تغییر می‌دهد. یک میدان مغناطیسی محصور در ناحیهٔ استوانه‌ای $\rho < a$ را در نظر بگیرید. شار را Φ بگیرید. در ناحیهٔ $\rho > a$ میدان مغناطیسی وجود ندارد، و در نتیجه پتانسیل برداری به‌صورت زیر است

$$\mathbf{A}(\rho, \theta, z) = \boldsymbol{\nabla}\Lambda(\rho, \theta, z)$$

(الف) انتخاب پیمانهٔ $\nabla\cdot\mathbf{A}=0$ ایجاب می‌کند که

$$\nabla^2\Lambda = 0$$

نشان دهید جواب این معادله، که در ۱۳ـ۹۲ صدق می‌کند، عبارت است از

$$\Lambda = \frac{1}{2\pi}\Phi\theta$$

(ب) تکانهٔ زاویه‌ای حول محور تقارن

$$(\mu\mathbf{r}\times\mathbf{v})_z = \tilde{L}_z = \left[\mathbf{r}\times\left(\frac{\hbar}{i}\boldsymbol{\nabla} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\right]_z$$

را در مختصات استوانه‌ای محاسبه کنید، و نشان دهید به‌ازای Λی بالا برابر است با

$$\tilde{L}_z = \frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{e}{c}\,\frac{\Phi}{2\pi}$$

(ج) مسئلهٔ ویژه‌مقداری $\tilde{L}_z\psi = \lambda\psi$ را حل کنید، و نشان دهید تک‌مقدار بودن ویژه‌تابعها موجب کوانتش شار می‌شود.

۱۳ـ۹ الکترونی را در نظر بگیرید که در ناحیهٔ بین دو استوانه به شعاعهای a و b $(b > a)$ محصور شده است. (الف) معادلهٔ شرودینگر را در مختصات استوانه‌ای جداسازی کنید (معادلهٔ ۱۳ـ۴۳)، و نشان دهید این معادله را می‌توان برحسب توابع بسل حل کرد. چه شرایطی ویژه‌مقدارهای انرژی را تعیین می‌کنند؟ (ب) دربارهٔ واگنی ویژه‌تابعهای انرژی بحث کنید. این واگنی ازکجا ناشی می‌شود؟ برای توابع بسل به یادداشت زیر مراجعه کنید.

یادداشت: جوابهای معادلهٔ بسل

$$\frac{d^2u}{dz^2} + \frac{1}{z}\frac{du}{dz} + \left(1 - \frac{n^2}{z^2}\right)u = 0$$

که در آن n عدد درست است دو نوع هستند: جوابهای منظم

$$J_n(z) = \left(\frac{z}{2}\right)^n \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(iz/2)^{2l}}{l!(n+1)!}$$

که توابع بسل نامیده می‌شوند، و جوابهای نامنظم

$$N_n(z) = \frac{۲}{\pi} J_n(z) \log \frac{\gamma z}{۲} - \frac{۱}{\pi}\left(\frac{z}{۲}\right)^n \sum_{l=۰}^{\infty} \frac{(iz/۲)^{۲l}}{l!(n+l)!} a_{nl}$$

$$- \frac{۱}{\pi}\left(\frac{z}{۲}\right)^{-n} \sum_{l=۰}^{n-۱} \frac{(n-l-۱)!}{l!}\left(\frac{z}{۲}\right)^{۲l}$$

$$(\log \gamma = ۰٫۵۷۷۲\ldots) \qquad a_{nl} = \left(\sum_{m=۱}^{l} \frac{۱}{m} + \sum_{m=۱}^{l+n} \frac{۱}{m}\right)$$

که توابع نویمان نامیده می‌شوند. رفتار مجانبی این توابع به‌صورت زیر است

$$J_n(z) \sim \left(\frac{۲}{\pi z}\right)^{۱/۲} \cos\left(z - \frac{n\pi}{۲} - \frac{\pi}{۴}\right)\left[۱ + O\left(\frac{۱}{z^۲}\right)\right]$$

$$N_n(z) \sim \left(\frac{۲}{\pi z}\right)^{۱/۲} \sin\left(z - \frac{n\pi}{۲} - \frac{\pi}{۴}\right)\left[۱ + O\left(\frac{۱}{z^۲}\right)\right]$$

بحث مفصل ویژگیهای این توابع را می‌توان در اکثر کتابهای ریاضی فیزیک که به توابع خاص می‌پردازند یافت.

مراجع

دربارهٔ ویژگیهای مختلف حرکت الکترون در میدان مغناطیسی به روش بسیار جالبی درکتاب زیر بحث شده است

R P Feynman, R B Leighton and M Sands, *The Feynman Lectures on Physics*, Vol III, Addison- Wesley, Reading, Mass, 1965.

برای بحث مفصلی دربارهٔ آزمایشهایی که اثر آهارانوف-بوهم را بدون ابهام اثبات می‌کنند، و برای یک بحث عالی دربارهٔ نظریهٔ مربوط مراجعه کنید به

M Peshkin and A Tonomura, *The Aharanov-Bohm Effect*, Lecture Notes in Physics, Vol 340, Springer-Verlag, Berlin/ New York, 1989.

۱۴

عملگرها، ماتریسها، و اسپین

نمایش ماتریسی عملگرهای نوسانگر هماهنگ

بررسی صحیح اتمها بدون در نظر گرفتن اسپین الکترون غیرممکن است. این ویژگی الکترونها مانستهٔ کلاسیک ندارد، و چنانکه به‌زودی خواهیم دید باید آن‌را به روشهای نسبتاً مجرد بررسی کنیم. خوشبختانه برای کنار گذاشتن توصیف وابسته به فضای مختصات تا حدی آمادگی داریم، زیرا نوسانگر هماهنگ (فصل ۷) و مسئلهٔ ویژه‌مقداری تکانهٔ زاویه‌ای

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^{۲} Y_{lm} &= \hbar^{۲} l(l+۱) Y_{lm} \\ L_z Y_{lm} &= \hbar m Y_{lm} \end{aligned} \qquad (۱\_۱۴)$$

را با روشهای عملگری بررسی کردیم. برای نوسانگر هماهنگ دیدیم که حالتها با رابطهٔ زیر تعریف می‌شوند

$$u_n = \frac{۱}{(n!)^{۱/۲}} (A^{\dagger})^n u_{۰} \qquad (۲\_۱۴)$$

که برای آن معادلهٔ زیر برقرار است

$$Hu_n = \hbar\omega\left(n+\frac{۱}{۲}\right)u_n \qquad (۳\_۱۴)$$

و همچنین توانستیم تأثیر عملگرهای افزاینده و کاهنده را بر u_n محاسبه کنیم:

$$A^\dagger u_n = \sqrt{(n+۱)}u_{n+۱} \qquad (۴\_۱۴)$$

و

$$Au_n = \sqrt{n}\, u_{n-۱} \qquad (۵\_۱۴)$$

همچنین نشان دادیم که

$$\langle u_m|u_n\rangle = \delta_{mn} \qquad (۶\_۱۴)$$

و این حکمی است که می‌توان آن‌را برای ویژه‌حالتهای تمام عملگرهای هرمیتی (در اینجا H) برقرار کرد. اگر u_m را در ۱۴ـ۳ تا ۱۴ـ۵ ضرب نرده‌ای کنیم به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned}
\langle u_m|Hu_n\rangle &\equiv \langle u_m|H|u_n\rangle = \left(n+\frac{۱}{۲}\right)\hbar\omega\,\delta_{mn}\\
\langle u_m|A^\dagger u_n\rangle &\equiv \langle u_m|A^\dagger|u_n\rangle = \sqrt{(n+۱)}\,\delta_{m,n+۱}\\
\langle u_m|Au_n\rangle &\equiv \langle u_m|A|u_n\rangle = \sqrt{n}\,\delta_{m,n-۱}
\end{aligned} \qquad (۷_۱۴)$$

که در آنها از نمادنگاری متقارنتر زیر استفاده کرده‌ایم

$$\langle u_i|\mathrm{O}|u_j\rangle \equiv \langle u_i|\mathrm{O}u_j\rangle \qquad (۸\_۱۴)$$

این کمیتها را می‌توان به‌صورت آرایه‌هایی که ماتریس نامیده می‌شوند مرتب کرد. در نمادنگاری قراردادی برای عنصر ماتریسی M_{ij} شاخص اول نشان سطر و شاخص دوم نشان ستون آرایه

است. بنابراین، اگر حاصلضرب نرده‌ای $\langle u_m|H|u_n\rangle$ را با H_{mn} نشان دهیم، به‌دست می‌آوریم

$$H = \hbar\omega \begin{pmatrix} ۱/۲ & ۰ & ۰ & ۰ & \cdots \\ ۰ & ۳/۲ & ۰ & ۰ & \cdots \\ ۰ & ۰ & ۵/۲ & ۰ & \cdots \\ ۰ & ۰ & ۰ & ۷/۲ & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \qquad (۹\_۱۴)$$

به‌همین ترتیب داریم

$$A^\dagger = \begin{pmatrix} ۰ & ۰ & ۰ & ۰ & \cdots \\ \sqrt{۱} & ۰ & ۰ & ۰ & \cdots \\ ۰ & \sqrt{۲} & ۰ & ۰ & \cdots \\ ۰ & ۰ & \sqrt{۳} & ۰ & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \end{pmatrix} \qquad (۱۰\_۱۴)$$

و

$$A = \begin{pmatrix} ۰ & \sqrt{۱} & ۰ & ۰ & \cdots \\ ۰ & ۰ & \sqrt{۲} & ۰ & \cdots \\ ۰ & ۰ & ۰ & \sqrt{۳} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \end{pmatrix} \qquad (۱۱\_۱۴)$$

آرایهٔ $\langle u_m|F|u_n\rangle$ ها را، که در آن F یک عملگر است و u_i ها یک مجموعهٔ کامل تشکیل می‌دهند، نمایش ماتریسی F در پایهٔ متشکل از u_i می‌نامیم. باید نشان دهیم این نامگذاری موجه است. به‌عنوان مثال، ضرب ماتریسی با رابطهٔ زیر تعریف می‌شود

$$(FG)_{ij} = \sum_n (F)_{in}(G)_{nj} \qquad (۱۲\_۱۴)$$

و باید این رابطه را برای "نمایشهای ماتریسی" عملگرهای F و G تحقیق کنیم. برای این کار، حالت Gu_j را در نظر می‌گیریم و با استفاده از کامل بودن مجموعهٔ u_i ها آن‌را به‌صورت زیر بسط می‌دهیم

$$Gu_j = \sum_n C_n u_n \qquad (۱۳\_۱۴)$$

ضرایب C_n با رابطهٔ زیر داده می‌شوند

$$C_n = \langle u_n|G|u_j\rangle \tag{۱۴\_۱۴}$$

بنابراین،

$$\begin{aligned}\langle u_i|FG|u_j\rangle &= \left\langle u_i|F\left(\sum_n C_n u_n\right)\right\rangle \\ &= \sum_n C_n\langle u_i|F|u_n\rangle \\ &= \sum_n \langle u_i|F|u-N\rangle\langle u_n|G|u_j\rangle\end{aligned} \tag{۱۵\_۱۴}$$

که همان ۱۴_۱۲ است به‌شرط اینکه بنویسیم

$$\langle u_i|F|u_n\rangle = F_{in} \tag{۱۶\_۱۴}$$

و غیره. یادآوری می‌کنیم که کاملیت بردارهای پایهٔ $\langle u_n|$ را می‌توان به‌صورت زیر بیان کرد

$$\sum_n |u_n\rangle\langle u_n| = ۱ \tag{۱۷\_۱۴}$$

با قرار دادن عملگر واحد ۱۴_۱۷ بین عملگرهای F و G در $\langle u_i|FG|u_j\rangle$ بلافاصله ۱۴_۱۶ به‌دست می‌آید.

توجیه دیگر ارتباط ماتریسی از رابطهٔ زیر به‌دست می‌آید

$$\langle u_m|F|u_n\rangle^* = \langle Fu_n|u_m\rangle = \langle u_n|F^\dagger|u_m\rangle \tag{۱۸\_۱۴}$$

که نشان می‌دهد اگر عملگر F را با یک ماتریس نمایش دهیم عملگر همیوغ هرمیتی $F^\dagger$ با ماتریس همیوغ هرمیتی متناظر نمایش داده می‌شود، زیرا $F^\dagger$ با رابطهٔ زیر تعریف می‌شود

$$(F^\dagger)_{mn} = F^*_{mn} \tag{۱۹\_۱۴}$$

توجه کنید که در این بحث اشاره‌ای به این واقعیت نکردیم که شروع بررسی ما از ویژه‌حالتهای هامیلتونی نوسانگر هماهنگ بود. تنها چیز خاصی که دربارهٔ این ویژه‌حالتها می‌توان گفت این است که آنها ماتریس نمایشگر H را قطری می‌کنند. با هر مجموعهٔ کاملی، H قطری نیست، و تعیین ویژه‌مقدارهای آن، یعنی عناصر ماتریس وقتی که قطری است، آسان نخواهد بود.

نمایش ماتریسی عملگرهای تکانهٔ زاویه‌ای

عناصر ماتریس L_z بین حالتهای مختلف تکانهٔ زاویه‌ای، $\langle l'm'|L_z|lm\rangle$، را در نظر بگیرید. قبل از هر چیز، مشاهده می‌کنیم که رابطهٔ

$$[\mathbf{L}^۲, L_z] = ۰$$

ایجاب می‌کند که

$$\begin{aligned} ۰ &= \langle l'm'|[\mathbf{L}^۲, L_z]|lm\rangle \\ &= \langle \mathbf{L}^۲ l'm'|L_z|lm\rangle - \langle l'm'|L_z|\mathbf{L}^۲ lm\rangle \qquad (۲۰\text{ـ}۱۴) \\ &= \hbar^۲\{l'(l'+۱) - l(l+۱)\}\langle l'm'|L_z|lm\rangle \end{aligned}$$

از اینجا نتیجه می‌گیریم که اگر $l \neq l'$، آنگاه $\langle l'm'|L_z|lm\rangle$ صفر می‌شود. بنابراین، L_z، تنها بین حالتهایی عناصر ماتریسی غیرصفر دارد که اعداد کوانتومی تکانهٔ زاویه‌ای کل آنها یکسان هستند. برای $L_\pm$ نیز همین نتیجه صادق است. بدین‌ترتیب، اگر l را ثابت نگه داریم، یعنی حالتهایی را در نظر بگیریم که برای آنها فقط m تغییر می‌کند، از معادلهٔ دوم ۱۴ـ۱، با یک نمادنگاری فشرده، به‌دست می‌آوریم

$$\langle lm'|L_z|lm\rangle = \hbar m\, \delta_{m'm} \qquad (۲۱\text{ـ}۱۴)$$

علاوه بر این، از ۱۱ـ۳۶ و ۱۱ـ۴۸ به‌رابطهٔ زیر می‌رسیم

$$\langle lm'|L_\pm|lm\rangle = \hbar[l(l+۱) - m(m\pm ۱)]^{۱/۲}\delta_{m',m\pm ۱} \qquad (۲۲\text{ـ}۱۴)$$

در نتیجه، نمایشهای ماتریسی زیر را برای عملگرهای تکانهٔ زاویه‌ای $l = ۱$ به‌دست می‌آوریم

$$L_z = \hbar \begin{pmatrix} ۱ & ۰ & ۰ \\ ۰ & ۰ & ۰ \\ ۰ & ۰ & -۱ \end{pmatrix} \qquad (۱۴\text{ـ}۲۳\text{الف})$$

$$L_+ = \hbar \begin{pmatrix} ۰ & \sqrt{۲} & ۰ \\ ۰ & ۰ & \sqrt{۲} \\ ۰ & ۰ & ۰ \end{pmatrix} \qquad (۱۴\text{ـ}۲۳\text{ب})$$

و

$$L_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \tag{۱۴\_۲۳ج}$$

سطرها و ستونها به‌ترتیب از چپ به راست و از بالا به پایین با $m = 1, 0, -1$ نشانگذاری می‌شوند. به‌سادگی می‌توان دید که برای این ماتریسها رابطه‌های جابه‌جایی برقرارند. برای مثال،

$$[L_+, L_-] = \hbar^2 \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} - \hbar^2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{۱۴\_۲۴}$$

$$= \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \hbar^2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = 2\hbar L_z$$

رابطه‌های کلی میان حالتها را نیز می‌توان در نمایش ماتریسی نوشت. به‌عنوان مثال، رابطهٔ زیر را در نظر بگیرید

$$\psi = A\phi \tag{۱۴\_۲۵}$$

یکی از عضوهای مجموعهٔ کامل u_iها را در این رابطه ضرب نرده‌ای می‌کنیم:

$$\langle u_i|\psi\rangle = \langle u_i|A\phi\rangle \tag{۱۴\_۲۶}$$

با قرار دادن عملگر واحد ۱۴_۱۷ بین A و ϕ، به‌دست می‌آوریم

$$\langle u_i|\psi\rangle = \sum_n \langle u_i|A|u_n\rangle\langle u_n|\phi\rangle \tag{۱۴\_۲۷}$$

اگر $\langle u_n|\phi\rangle$ را به‌صورت ماتریس ستونی زیر بنویسیم

$$\langle u_n|\phi\rangle \to \begin{pmatrix} \langle u_1|\phi\rangle \\ \langle u_2|\phi\rangle \\ \langle u_3|\phi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{۱۴\_۲۸}$$

و به‌همین ترتیب،

$$\langle u_n|\psi\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \langle u_1|\psi\rangle \\ \langle u_2|\psi\rangle \\ \langle u_3|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{۱۴_۲۹}$$

آنگاه برای نمایش ماتریسی رابطهٔ ۱۴_۲۵ داریم

$$\beta_i = \sum_n A_{in}\alpha_n \tag{۱۴_۳۰}$$

بنابراین، ماتریسهای مربعی معرف عملگرها هستند و ماتریسهای ستونی حالتها را نمایش می‌دهند. حاصلضرب نرده‌ای $\langle\phi|u_n\rangle = \langle u_n|\phi\rangle^*$ را بنابه قرارداد به‌صورت یک ماتریس سطری می‌نویسیم:

$$\langle\phi|u_n\rangle \rightarrow (\alpha_1^*, \alpha_2^*, \alpha_3^*, \dots) \tag{۱۴_۳۱}$$

بدین‌ترتیب، به‌عنوان مثال، حاصلضرب نرده‌ای $\langle\phi|\psi\rangle$ را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$\begin{aligned} \langle\phi|\psi\rangle &= \sum_n \langle\phi|u_n\rangle\langle u_n|\psi\rangle \\ &= \sum_n \alpha_n^*\beta_n \end{aligned} \tag{۱۴_۳۲}$$

یک معادلهٔ ویژه‌مقداری مورد خاصی از رابطهٔ ۱۴_۲۵ است:

$$A\phi = a\phi \tag{۱۴_۳۳}$$

که صورت ماتریسی آن عبارت است از

$$\sum_n A_{in}\alpha_n = a\alpha_i \tag{۱۴_۳۴}$$

این رابطه معادل است با

$$\begin{pmatrix} A_{۱۱}-\alpha & A_{۱۲} & A_{۱۳} & \dots \\ A_{۲۱} & A_{۲۲}-a & A_{۲۳} & \dots \\ A_{۳۱} & A_{۳۲} & A_{۳۳}-a & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_۱ \\ \alpha_۲ \\ \alpha_۳ \\ \vdots \end{pmatrix} = ۰ \qquad (۳۵\_۱۴)$$

معادلهٔ بالا تنها وقتی جواب غیرصفر دارد که دترمینان ماتریس صفر شود:

$$\det|A_{in} - a\delta_{in}| = ۰ \qquad (۳۶\_۱۴)$$

این راه مناسبی برای یافتن ویژه‌مقدارها (و ویژه‌بردارها)ی عملگرهایی است که با ماتریسهای متناهی نمایش داده می‌شوند، اما برای ماتریسهای نامتناهی متأسفانه چندان ساده نیست.

عملگر اسپین و نمایش ماتریسی آن

واقعاً جای خوشبختی است که برای نمایش عملگرها راه دیگری، غیر از استفاده از توابع و مشتقات، وجود دارد، زیرا تمام عملگرها را نمی‌توان از این راه نمایش داد. ساده‌ترین مثال در این مورد مربوط به تکانهٔ زاویه‌ای $l = ۱/۲$ است. معادله‌های ۱۱ـ۵۱ و ۱۱ـ۶۰ نشان می‌دهند که

$$Y_{۱/۲,\pm۱/۲} = C_\pm \sqrt{\sin\ \theta}\ e^{\pm i\phi/۲} \qquad (۳۷\_۱۴)$$

و با استفاده از ۱۱ـ۵۴ می‌توان نوشت

$$L_- Y_{۱/۲,۱/۲} \propto \frac{\cos\ \theta}{\sqrt{\sin\ \theta}}\ e^{-i\phi/۲} \qquad (۳۸\_۱۴)$$

اما این نتیجه متناسب با $Y_{۱/۲,-۱/۲}$ نیست. بنابراین، گسترش قاعده‌های متداول به $l = ۱/۲$ با مشکل مواجه می‌شود، و در نتیجه از نمایش ماتریسی استفاده می‌کنیم.[1] به‌جای $l = ۱/۲$ می‌نویسیم $s = ۱/۲$، و حرف l را تنها برای تکانهٔ زاویه‌ای مداری وابسته به $\mathbf{r} \times \mathbf{p}$ به‌کار می‌بریم. عملگرهای اسپین عبارت‌اند از S_x، S_y و S_z که با رابطه‌های جابه‌جایی مربوط به مؤلفه‌های تکانه‌های زاویه‌ای تعریف می‌شوند:

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z \qquad (۳۹\_۱۴)$$

---

۱. نشان داده شده است که $Y_{۱/۲,\pm۱/۲}$ به جریان احتمال از یک قطب کره $(\theta = ۰)$ به قطب دیگر $(\theta = \phi)$ منجر می‌شود، به‌طوری که دو قطب به‌ترتیب به‌عنوان چشمه‌ها و چاهکهای احتمال عمل می‌کنند.

و غیره. عملگرهای اسپین ۱/۲ با ماتریسهای ۲ × ۲ نمایش داده می‌شوند. از ۱۴_۲۱ به‌دست می‌آوریم

$$S_z = \hbar \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix} \qquad (۱۴\_۴۰)$$

و از ۱۴_۲۲ داریم

$$S_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad (۱۴\_۴۱)$$

این نمایش را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma} \qquad (۱۴\_۴۲)$$

که در آن مؤلفه‌های

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad (۱۴\_۴۳)$$

ماتریسهای پاؤلی هستند. این ماتریسها در رابطه‌های جابه‌جایی زیر صدق می‌کنند

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z \qquad (۱۴\_۴۴)$$

و غیره، و همچنین برای آنها داریم

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \equiv 1 \qquad (۱۴\_۴۵)$$

ماتریسهای پاؤلی پاد جابه‌جاشونده هستند، به این معنی که

$$\begin{aligned} \sigma_x\sigma_y &= -\sigma_y\sigma_x \\ \sigma_z\sigma_x &= -\sigma_x\sigma_z \\ \sigma_y\sigma_z &= -\sigma_z\sigma_y \end{aligned} \qquad (۱۴\_۴۶)$$

این رابطه‌ها به نمایشهای اسپین ۱/۲ اختصاص دارند و مثلاً برای ماتریسهای $l = ۱$ صادق نیستند.

ویژه‌حالتهای S_z با بردار ستونی دو مؤلفه‌ای، که آن‌را اسپینور می‌نامند، نمایش داده می‌شوند. برای به‌دست آوردن این ویژه‌اسپینورها، معادلهٔ ویژه‌مقداری زیر را حل می‌کنیم

$$S_z \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \pm \frac{1}{2} h \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \tag{۱۴-۴۷}$$

یا

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

بنابراین،

$$\begin{pmatrix} u \\ -v \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \tag{۱۴-۴۸}$$

برای ویژه‌جواب با علامت به‌علاوه داریم $v = 0$، و برای ویژه‌جواب با علامت منها $u = 0$. بنابراین، می‌نویسیم

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{۱۴-۴۹}$$

χ_+ ویژه‌اسپینور مربوط به اسپین بالا $[S_z = +(1/2)h]$ و χ_- اسپین پایین $[S_z = -(1/2)h]$ است.

یک اسپینور اختیاری را می‌توان برحسب این مجموعهٔ کامل بسط داد:

$$\begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} = \alpha_+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_- \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{۱۴-۵۰}$$

بنابه قضیهٔ بسط، اگر اسپینور درست بهنجار شده باشد به‌طوری که

$$|\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2 = 1 \tag{۱۴-۵۱}$$

آنگاه $|\alpha_+|^۲$ و $|\alpha_-|^۲$ احتمال این مطلب‌اند که در اندازه‌گیری S_z روی حالت $\binom{\alpha_+}{\alpha_-}$ به‌ترتیب مقادیر $(۱/۲)\hbar+$ و $(۱/۲)\hbar-$ به‌دست آیند.

لازم نیست که S_z را قطری نگه داریم. برای تعیین ویژه‌حالتهای $S_x \cos\ \phi + S_y \sin\ \phi$، باید معادلهٔ زیر را حل کنیم

$$(S_x\ \cos\ \phi + S_y\ \sin\ \phi)\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \frac{۱}{۲}\hbar\lambda \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \qquad (۱۴\_۵۲)$$

یا

$$\begin{pmatrix} ۰ & \cos\ \phi - i\ \sin\ \phi \\ \cos\ \phi + i\ \sin\ \phi & ۰ \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

که ایجاب می‌کند

$$\begin{aligned} v\, e^{-i\phi} &= \lambda u \\ u\, e^{i\phi} &= \lambda v \end{aligned} \qquad (۱۴\_۵۳)$$

از ضرب طرفهای راست و همچنین طرفهای چپ این دو معادله در یکدیگر به‌دست می‌آوریم

$$uv(\lambda^۲ - ۱) = ۰ \qquad (۱۴\_۵۴)$$

بنابراین،

$$\lambda = \pm ۱ \qquad (۱۴\_۵۵)$$

ویژه‌بردار مربوط به $\lambda = ۱$ در رابطهٔ زیر صدق می‌کند

$$v = e^{i\phi} u$$

و در نتیجه صورت بهنجارشده عبارت است از

$$\frac{۱}{\sqrt{۲}}\begin{pmatrix} ۱ \\ e^{i\phi} \end{pmatrix}$$

با استفاده از این واقعیت که می‌توان هر بردار حالت را در یک ضریب فاز اختیاری ضرب کرد، از ضرب بردار بالا در $e^{-i\phi/2}$ به‌دست می‌آوریم

$$u_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} \\ e^{i\phi/2} \end{pmatrix} \qquad (۱۴\_۵۶)$$

و به‌همین ترتیب، ویژه‌حالت مربوط به $\lambda = -1$ را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$u_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} \\ -e^{i\phi/2} \end{pmatrix} \qquad (۱۴\_۵۷)$$

به‌سادگی می‌توان دید که u_- و u_+ برهم عمودند:

$$\begin{aligned} u_+^{\dagger} u_- &= \frac{1}{2}(e^{i\phi/2}, e^{-i\phi/2})\begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} \\ -e^{i\phi/2} \end{pmatrix} \\ &= 0 \end{aligned} \qquad (۱۴\_۵۸)$$

جالب توجه است که اگر ϕ را به $\phi + 2\pi$ تغییر دهیم جوابها تغییر علامت می‌دهند. این نتیجه مشخصهٔ توابع موج اسپین نیم‌فرد (حالتهای فرمیون) است، و مغایرتی با مکانیک کوانتومی ندارد، زیرا -1 تنها یک ضریب فاز است، اما نشان می‌دهد هیچ بستهٔ موج ماکروسکوپیک کلاسیکی را نمی‌توان ساخت که دارای تکانهٔ زاویه‌ای نیم‌فرد باشد.

برای یک حالت اختیاری مانند α، می‌توان مقدار انتظاری $\mathbf{S}$ را محاسبه کرد:

$$\langle\alpha|\mathbf{S}|\alpha\rangle = \sum_i \sum_j \langle\alpha|i\rangle\langle i|\mathbf{S}|j\rangle\langle j|\alpha\rangle$$

که معادل است با

$$(\alpha_+^*, \alpha_-^*)\mathbf{S}\begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix}$$

بنابراین،

$$
\begin{aligned}
\langle S_x \rangle &= (\alpha_+^*, \alpha_-^*)\frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2}\hbar(\alpha_+^*, \alpha_-^*) \begin{pmatrix} \alpha_- \\ \alpha_+ \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar(\alpha_+^*\alpha_- + \alpha_-^*\alpha_+ \\
\langle S_y \rangle &= (\alpha_+^*, \alpha_-^*)\frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2}\hbar(\alpha_+^*, \alpha_-^*) \begin{pmatrix} -i\alpha_- \\ i\alpha_+ \end{pmatrix} = -\frac{i\hbar}{2}(\alpha_+^*\alpha_- - \alpha_-^*\alpha_+) \\
&= (\alpha_+^*, \alpha_-^*)\frac{1}{2}\hbar\langle S_z \rangle \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2}\hbar(|\alpha_+^*, \alpha_-^*) \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ -\alpha_- \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar(|\alpha_+|^2 - |\alpha_-|^2)
\end{aligned}
\tag{14-59}
$$

توجه کنید که تمام اینها، همان‌طور که برای عملگرهای هرمیتی انتظار می‌رود، حقیقی هستند.

گشتاور مغناطیسی ذاتی ذرات اسپین ۱/۲

بعداً خواهیم دید که اسپین الکترون مثلاً در هامیلتونی اتم هیدروژن به‌صورت جفت‌شده با تکانهٔ زاویه‌ای مداری ظاهر می‌شود. وقتی الکترون، به‌عنوان مثال، در یک جایگاه شبکهٔ بلور جایگزیده باشد اغلب می‌توان اسپین را تنها درجهٔ آزادی الکترون در نظر گرفت. الکترون به واسطهٔ اسپین خود گشتاور دوقطبی مغناطیسی ذاتی دارد، و این گشتاور مغناطیسی[۲] عبارت است از

$$
\mathbf{M} = -\frac{eg}{2mc}\mathbf{S} \tag{14-60}
$$

۲. یک الکترون "کلاسیک" که با تکانهٔ زاویه‌ای $\mathbf{L}$ روی یک دایره حرکت می‌کند حلقهٔ جریانی تشکیل می‌دهد که گشتاور مغناطیسی آن برابر است با $\mathbf{M} = -e\mathbf{L}/2mc$. چون اسپین یک متغیر صرفاً کوانتوم‌ـمکانیکی است، ۱۴ـ۶۰ را تنها از روی شباهت می‌توان موجه دانست. برای توجیه این رابطه به معادلهٔ نسبیتی دیراک نیاز داریم، که مقدار $g = 2$ نیز از آن به‌دست می‌آید. الکترودینامیک کوانتومی تصحیحاتی را بر $g = 2$ اعمال می‌کند. جنبه‌های غیرکلاسیک اسپین را کاشفان آن، ساموئل گاتسمیت و گئورگ اولنبک، بیان کرده‌اند (۱۹۲۵).

که در آن g، نسبت ژیرومغناطیسی، بسیار نزدیک به ۲ است:

$$g = ۲\left(۱ + \frac{\alpha}{۲\pi} + \cdots\right) = ۲{,}۰۰۲۳۱۹۲ \qquad (۶۱\_۱۴)$$

m جرم الکترون، و α ثابت ساختار ریز است. برای چنین الکترون جایگزیده‌ای، هامیلتونی در حضور میدان مغناطیسی خارجی تنها انرژی پتانسیل است:

$$H = -\mathbf{M}\cdot\mathbf{B} = \frac{egh}{۴mc}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B} \qquad (۶۲\_۱۴)$$

معادلهٔ شرودینگر برای حالت $\psi(t) = \begin{pmatrix}\alpha_+(t)\\ \alpha_-(t)\end{pmatrix}$ عبارت است از

$$ih\frac{d\psi(t)}{dt} = \frac{egh}{۴mc}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}\psi(t) \qquad (۶۳\_۱۴)$$

اگر محور z را در راستای $\mathbf{B}$ بگیریم، و بنویسیم

$$\psi(t) = \begin{pmatrix}\alpha_+(t)\\ \alpha_-(t)\end{pmatrix} = e^{-i\omega t}\begin{pmatrix}\alpha_+\\ \alpha_-\end{pmatrix} \qquad (۶۴\_۱۴)$$

آنگاه معادله به‌صورت زیر درمی‌آید

$$\hbar\omega\begin{pmatrix}\alpha_+\\ \alpha_-\end{pmatrix} = \frac{eg\hbar B}{۴mc}\begin{pmatrix}۱ & ۰\\ ۰ & -۱\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha_+\\ \alpha_-\end{pmatrix} \qquad (۶۵\_۱۴)$$

جوابها متناظر با بسامدهای مختلف ω هستند. به‌ازای $\omega = egB/۴mc$ داریم $\begin{pmatrix}\alpha_+\\ \alpha_-\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}۱\\ ۰\end{pmatrix}$، و به‌ازای $\omega = -(egB/۴mc)$ باید $\begin{pmatrix}\alpha_+\\ \alpha_-\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}۰\\ ۱\end{pmatrix}$. بنابراین، اگر حالت اولیه به‌صورت زیر باشد

$$\psi(۰) = \begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix} \qquad (۶۶\_۱۴)$$

آنگاه حالت در یک زمان بعد عبارت خواهد بود از

$$\psi(t) = \begin{pmatrix}a\,e^{-i\omega t}\\ b\,e^{i\omega t}\end{pmatrix} \qquad \omega = \frac{geB}{۴mc} \qquad (۶۷\_۱۴)$$

فرض کنید در $t = 0$ اسپین یک ویژه‌حالت S_x با ویژه‌مقدار $+(1/2)\hbar$ است، یعنی "در جهت مثبت x قرار دارد". بنابراین،

$$\frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

یعنی $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 1/\sqrt{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$. بدین‌ترتیب، در یک زمان بعد داریم

$$\begin{aligned} \langle S_x \rangle &= \frac{1}{2}\hbar\frac{1}{\sqrt{2}}(e^{i\omega t}, e^{-i\omega t})\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{4}(e^{i\omega t}, e^{-i\omega t})\begin{pmatrix} e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\cos\ 2\omega t \end{aligned} \tag{۱۴\_۶۸}$$

به‌همین ترتیب، می‌توان نوشت

$$\begin{aligned} \langle S_y \rangle &= \frac{1}{2}\hbar\frac{1}{\sqrt{2}}(e^{i\omega t}, e^{-i\omega t})\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{4}(-i\ e^{2i\omega t} + i\ e^{-2i\omega t}) \\ &= \frac{\hbar}{2}\sin\ 2\omega t \end{aligned} \tag{۱۴\_۶۹}$$

بنابراین، اسپین با بسامد زیر، که بسامد سیکلوترون نامیده می‌شود، حول راستای B حرکت تقدیمی دارد

$$2\omega = \frac{egB}{2mc} \approx \frac{eB}{mc} \equiv \omega_c \tag{۱۴\_۷۰}$$

اگر اسپین ابتدا در یک راستای اختیاری باشد که با محور z زاویهٔ θ می‌سازد این حرکت تقدیمی روی می‌دهد. برای میدان مغناطیسی از مرتبهٔ $10^4\mathrm{G}\,(1T)$ داریم

$$\omega_c = \frac{(4.8 \times 10^{-10}\mathrm{esu})(10^4\mathrm{G})}{(0.9 \times 10^{-27}\mathrm{g})(3 \times 10^{10}\mathrm{cm/s})} \approx 1.8 \times 10^{11}\mathrm{rad/s}$$

که بسامد کاملاً بزرگی است.

تشدید پارامغناطیسی

در یک جسم جامد عامل ژیرومغناطیسی gی الکترون به ماهیت نیروهای فعال در این جسم بستگی دارد. دانستن g قیود بسیار مفیدی در این باره که این نیروها چگونه می‌توانند باشند به‌دست می‌دهد و از این‌رو اندازه‌گیری g اهمیت پیدا می‌کند. این اندازه‌گیری را می‌توان با روش تشدید پارامغناطیسی انجام داد. اصول این روش را در اینجا بیان می‌کنیم: یک میدان مغناطیسی در راستای z داریم و اسپین الکترون حول این راستا دارای حرکت تقدیمی است. سرعت این حرکت چقدر است؟ اگر بتوان یک میدان مغناطیسی اعمال کرد که بر محور z عمود باشد و با اسپین بچرخد آنگاه این میدان باید اسپین الکترون را ساکن "ببیند". مؤلفهٔ اسپین الکترون که موازی با صفحهٔ xy است ترجیحاً در جهت مخالف میدان مغناطیسی قرار می‌گیرد تا حالت کمترین انرژی به‌دست آید. برای الکترونهایی که قبلاً در این راستای کمترین انرژی قرار ندارند گذار به کمترین انرژی روی می‌دهد، و در این فرایند انرژی به‌صورت تابش آزاد می‌شود. این تابش را باید بتوان آشکارسازی کرد.

ایجاد میدان مغناطیسی که با بسامدی از مرتبهٔ 10^{11} رادیان بر ثانیه بچرخد عملی نیست. اما اگر یک میدان مغناطیسی در راستایی مانند x داشته باشیم که با بسامد ω نوسان کند، می‌توانیم آن‌را برهم‌نهشی از یک میدان چرخان ساعتگرد با بسامد ω و یک میدان چرخان پادساعتگرد با همان بسامد در صفحهٔ xy در نظر بگیریم و فاز را چنان تنظیم کنیم که میدان برایند در راستای x باشد. (این کار مانستهٔ به‌دست آوردن قطبش خطی از جمع دو قطبش دایره‌ای است.) تنها یکی از مؤلفه‌ها در همان جهت حرکت تقدیمی اسپین حرکت می‌کند. حرکت مؤلفهٔ دیگر در جهت مخالف حرکت تقدیمی اسپین خواهد بود و میانگین تأثیر آن روی اسپین الکترون صفر است.

الکترونی را در نظر بگیرید که درجه‌های آزادی آن تنها حالتهای اسپینی هستند، و تحت تأثیر میدان مغناطیسی بزرگ و ثابت B_0 در جهت z و میدان مغناطیسی کوچک و نوسانی $B_1 \cos \omega t$ در راستای x قرار دارد. در اینجا معادلهٔ شرودینگر عبارت است از

$$i\hbar \frac{d}{dt}\begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} = \frac{eg\hbar}{4mc}\begin{pmatrix} B_0 & B_1 \cos \omega t \\ B_1 \cos \omega t & -B_0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} \tag{۷۱\_۱۴}$$

بنابراین، با

$$\omega_0 = \frac{egB_0}{4mc} = \frac{1}{2}\omega_c \qquad \omega_1 = \frac{egB_1}{4mc} \tag{۷۲\_۱۴}$$

داریم

$$\begin{aligned} i\frac{da(t)}{dt} &= \omega_0 a(t) + \omega_1 \cos \omega t\, b(t) \\ i\frac{db(t)}{dt} &= \omega_1 \cos \omega t\, a(t) - \omega_0 b(t) \end{aligned} \tag{۷۳\_۱۴}$$

فرض می‌کنیم

$$A(t) = a(t)e^{i\omega_\circ t}$$
$$B(t) = b(t)e^{-i\omega_\circ t} \qquad (\text{۷۴\_۱۴})$$

این توابع در معادله‌های زیر صدق می‌کنند

$$\begin{aligned} i\frac{dA(t)}{dt} &= \omega_\text{۱}\ \cos\ \omega t\ B(t)\ e^{i\omega_c t} \\ &\approx \frac{\text{۱}}{\text{۲}}\omega_\text{۱}\ e^{i(\omega_c-\omega)t}B(t) \\ i\frac{dB(t)}{dt} &= \omega_\text{۱}\ \cos\ \omega t\ A(t)e^{-i\omega_c t} \\ &\approx \frac{\text{۱}}{\text{۲}}\omega_\text{۱}\ e^{-i(\omega_c-\omega)t}A(t) \end{aligned} \qquad (\text{۷۵\_۱۴})$$

که در آنها از تقریب زیر استفاده کرده‌ایم

$$\begin{aligned} \cos\ \omega t\ e^{i\omega_c t} &= \frac{\text{۱}}{\text{۲}}[e^{i(\omega_c+\omega)t} + e^{i(\omega_c-\omega)t}] \\ &\approx \frac{\text{۱}}{\text{۲}}e^{i(\omega_c-\omega)t} \end{aligned}$$

چون با مقادیر $\omega_c = \omega$ سروکار داریم و هر دو بزرگ هستند، جمله‌ای را که بسیار سریع نوسان می‌کند حذف کرده‌ایم زیرا انتظار داریم میانگین سهم آن صفر باشد. یک بررسی مفصلتر این نتیجه‌گیری را تأیید می‌کند. می‌توان $B(t)$ را برحسب $dA(t)dt$ تعیین کرد:

$$B(t) = \frac{\text{۲}i}{\omega_\text{۱}}\ \frac{dA(t)}{dt}e^{-i(\omega_c-\omega)t} \qquad (\text{۷۶\_۱۴})$$

و با استفاده از این رابطه یک معادلهٔ دیفرانسیل مرتبهٔ دوم برای $A(t)$ به‌دست می‌آید:

$$\frac{d^\text{۲}A(t)}{dt^\text{۲}} - i(\omega_c - \omega)\frac{dA(t)}{dt} + \frac{\omega_\text{۱}^\text{۲}}{\text{۴}}A(t) = \circ \qquad (\text{۷۷\_۱۴})$$

برای این معادله جوابی به‌صورت زیر در نظر می‌گیریم

$$A(t) = A(\circ)e^{i\lambda t} \qquad (\text{۷۸\_۱۴})$$

با جاگذاری در ۱۴_۷۷ به معادلهٔ زیر می‌رسیم

$$-\lambda^2 + (\omega_c - \omega)\lambda + \frac{\omega_1^2}{4} = 0$$

که ریشه‌های آن مقادیر λ را تعیین می‌کنند:

$$\lambda_\pm = \frac{\omega_c - \omega \pm \sqrt{(\omega_c - \omega)^2 + \omega_1^2}}{2} \qquad (۱۴\_۷۹)$$

جواب عمومی عبارت است از

$$A(t) = A_+ e^{i\lambda_+ t} + A_- e^{i\lambda_- t} \qquad (۱۴\_۸۰)$$

و در نتیجه

$$B(t) = -\frac{2}{\omega_1} e^{-i(\omega_c - \omega)t} \left(\lambda_+ A_+ e^{i\lambda_+ t} + \lambda_- A_- e^{i\lambda_- t}\right) \qquad (۱۴\_۸۱)$$

سرانجام به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} a(t) &= e^{-i\omega_c t/2}\left(A_+ e^{i\lambda_+ t} + A_- e^{i\lambda_- t}\right) \\ b(t) &= -\frac{2}{\omega_1} e^{-i(\omega_c/2 - \omega)t} \left(\lambda_+ A_+ e^{i\lambda_+ t} + \lambda_- A_- e^{i\lambda_- t}\right) \end{aligned} \qquad (۱۴\_۸۲)$$

اگر در $t = 0$ اسپین الکترون در جهت مثبت محور z باشد آنگاه $a(0) = 1$ و $b(0) = 0$، یعنی

$$\begin{aligned} A_+ + A_- &= 1 \\ \lambda_+ A_+ + \lambda_- A_- &= 0 \end{aligned}$$

و در نتیجه

$$\begin{aligned} A_+ &= \frac{\lambda_-}{\lambda_- - \lambda_+} \\ A_- &= -\frac{\lambda_+}{\lambda_- - \lambda_+} \end{aligned} \qquad (۱۴\_۸۳)$$

احتمال اینکه در یک زمان بعد مانند t اسپین در جهت منفی باشد برابر است با $|b(t)|^{۲}$:

$$|b(t)|^{۲} = \frac{۴}{\omega_{۱}^{۲}} \left| \frac{\lambda_+ \lambda_-}{\lambda_- - \lambda_+} e^{i\lambda_+ t} - \frac{\lambda_+ \lambda_-}{\lambda_- - \lambda_+} e^{i\lambda_- t} \right|^{۲}$$

$$= \frac{\omega_{۱}^{۲}/۴}{(\omega_c - \omega)^{۲} + \omega_{۱}^{۲}} \left| ۱ - e^{-i(\lambda_+ - \lambda_-)t} \right|^{۲} \qquad (۸۴\text{ـ}۱۴)$$

$$= \frac{\omega_{۱}^{۲}}{(\omega_c - \omega)^{۲} + \omega_{۱}^{۲}} \, \frac{۱ - \cos\sqrt{(\omega_c - \omega)^{۲} + \omega_{۱}^{۲}}\,t}{۲}$$

این کمیت کوچک است، زیرا $\omega_c, \omega \gg \omega_{۱}$. اگر میدان $B_{۱}$ را به‌گونه‌ای "تنظیم" کنیم که با ω_c جور شود آنگاه احتمال به‌صورت زیر درمی‌آید

$$|b(t)|^{۲} \to \frac{۱ - \cos\,\omega_{۱} t}{۲} \qquad (۸۵\text{ـ}۱۴)$$

یعنی به ۱ نزدیک می‌شود. چون انرژی حالت "بالا" با انرژی حالت "پایین" تفاوت دارد، این اختلاف انرژی که از میدان خارجی جذب می‌شود بسامد تشدیدی را مشخص می‌کند، و در نتیجه ω_c و از روی آن g را می‌توان با دقت زیاد اندازه‌گیری کرد.

مسائل

۱۴ـ۱ اگر بردار حالت پایه برای یک نوسانگر هماهنگ به‌صورت زیر باشد

$$u_{۰} = \begin{pmatrix} ۱ \\ ۰ \\ ۰ \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$u_{۱}$، $u_{۲}$ و $u_{۳}$ را با استفاده از ۱۴ـ۲ و ۱۴ـ۱۰ محاسبه کنید. طرح کلی چیست؟ نشان دهید

$$\langle u_m | u_n \rangle = \delta_{mn}$$

۲ـ۱۴ با داشتن بردار

$$\psi = \frac{۱}{\sqrt{۶}}\begin{pmatrix} ۱ \\ ۲ \\ ۱ \\ ۰ \\ \vdots \end{pmatrix}$$

کمیتهای زیر را با استفاده از عملگرهای نوسانگر هماهنگ ۱۴ـ۹، ۱۴ـ۱۰ و ۱۴ـ۱۱ محاسبه کنید

(الف) $\langle H \rangle$.

(ب) $\langle x^۲ \rangle$، $\langle x \rangle$، $\langle p^۲ \rangle$ و $\langle p \rangle$.

(ج) $\Delta p\, \Delta x$.

[تذکر: رابطه‌های p و x برحسب A و $A^\dagger$ را می‌توانید از ۴ـ۷ به‌دست آورید.]

۳ـ۱۴ عناصر چهار سطر و چهار ستون اول نمایش ماتریسی $x^۴$ را برای نوسانگر هماهنگ محاسبه کنید.

۴ـ۱۴ با استفاده از ۴ـ۲۱ و ۱۴ـ۲۲، نمایش ماتریسی L_x، L_y و L_z را برای تکانهٔ زاویه‌ای ۳/۲ به‌دست آورید. وارسی کنید که رابطه‌های جابه‌جایی

$$[L_x, L_y] = i\hbar\, L_z$$

و غیره برقرارند.

۵ـ۱۴ ویژه‌مقدارهای هامیلتونی

$$H = \frac{۱}{۲I_۱}L_x^۲ + \frac{۱}{۲I_۲}L_y^۲ + \frac{۱}{۲I_۳}L_z^۲$$

را با (الف) تکانهٔ زاویه‌ای ۱، و (ب) تکانهٔ زاویه‌ای ۲ به‌دست آورید.

[تذکر: برای تکانهٔ زاویه‌ای ۲، نمایش ماتریسی L_z عبارت است از

$$L_z = \hbar\begin{pmatrix} ۲ & ۰ & ۰ & ۰ & ۰ \\ ۰ & ۱ & ۰ & ۰ & ۰ \\ ۰ & ۰ & ۰ & ۰ & ۰ \\ ۰ & ۰ & ۰ & -۱ & ۰ \\ ۰ & ۰ & ۰ & ۰ & -۲ \end{pmatrix}$$

و نمایشهای ماتریسی L_x و L_y را می‌توان

$$L_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad L_- = (L_+)^\dagger$$

به‌دست آورد.]

۱۴ـ۶ ویژه‌مقدارهای ماتریس زیر را محاسبه کنید

$$H = \begin{pmatrix} 8 & 4 & 6 \\ 4 & 14 & 4 \\ 6 & 4 & 8 \end{pmatrix}$$

و ویژه‌بردارهای آن‌را به‌دست آورید

۱۴ـ۷ دستگاهی با اسپین ۱/۲ در نظر بگیرید که بردار حالت بهنجارشدهٔ آن عبارت است از

$$\begin{pmatrix} \cos\alpha \\ \sin\alpha\, e^{i\beta} \end{pmatrix}$$

احتمال این را محاسبه کنید که از اندازه‌گیری S_y مقدار $-\hbar/2$ به‌دست آید.

۱۴ـ۸ نشان دهید که برای حالت تکانهٔ زاویه‌ای ۱ ماتریسهای $\mathbf{L}\cdot\mathbf{n}$، که در آن $\mathbf{n}$ یک بردار یکهٔ اختیاری است، در معادلهٔ چندجمله‌ای زیر صدق می‌کنند

$$\sum \alpha_k (\mathbf{L}\cdot\mathbf{n})^k = 0$$

شکل این چندجمله‌ای را به‌چه صورت است؟ آیا می‌توان این معادله را به هر تکانهٔ زاویه‌ای اختیاری l تعمیم داد؟

۱۴ـ۹ برای تکانهٔ زاویه‌ای ۱، چنانکه در فصل ۱۰ گفتیم، می‌توان از $Y_{lm}(\theta, \phi)$ به‌عنوان ویژه‌حالت و، از عملگرهای دیفرانسیلی برای نمایش $\mathbf{L}$ استفاده کرد. با محاسبهٔ

$$\int \sin\theta\, d\theta\, d\phi\, Y^*_{1k}(\theta,\phi)\, L_+\, Y_{1m}(\theta,\phi)$$

و مقایسهٔ آن با عنصر ماتریسی $(L_+)_{km}$ یکسان بودن نتایج را نشان دهید.

۱۴ـ۱۰ دستگاهی با تکانهٔ زاویه‌ای ۱ با بردار حالت زیر نمایش داده می‌شود

$$u = \frac{1}{\sqrt{26}} \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ -3 \end{pmatrix}$$

احتمال اینکه از اندازه‌گیری L_x مقدار ۰ به‌دست آید چقدر است؟

۱۴ـ۱۱ ویژه‌تابعها و ویژه‌مقدارهای عملگر $L_xL_y + L_yL_x$ را برای دستگاهی با تکانهٔ زاویه‌ای ۱ به‌دست آورید.

۱۴ـ۱۲ دستگاهی با اسپین ۱/۲ را در نظر بگیرید. ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارهای عملگر $S_x + S_y$ را به‌دست آورید. فرض کنید این عملگر را اندازه‌گیری کرده‌ایم و دستگاه را در حالت مربوط به ویژه‌مقدار بزرگتر یافته‌ایم. احتمال این را محاسبه کنید که از اندازه‌گیری S_z مقدار $\hbar/2$ به‌دست آید.

۱۴ـ۱۳ معادلهٔ آهنگ تغییر یک عملگر در نمایش هایزنبرگ با ۷ـ۶۲ داده می‌شود. اگر هامیلتونی به‌صورت زیر باشد

$$H = \frac{eg}{2mc}\mathbf{S}(t) \cdot \mathbf{B}$$

و رابطه‌های جابه‌جایی $[S_x(t), S_y(t)] = i\hbar S_z(t)$ و غیره برقرار باشند، معادله‌های حرکت عملگرهای $S_x(t)$، ... را به‌دست آورید. اگر $\mathbf{B} = (0, 0, B)$، $\mathbf{S}(t)$ را برحسب $\mathbf{S}(0)$ تعیین کنید.

۱۴ـ۱۴ جسمی با اسپین ۱/۲ در زمان $t = 0$ در یک ویژه‌حالت S_x با ویژه‌مقدار $+\hbar/2$ است. در این زمان آن‌را در میدان مغناطیسی $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ قرار می‌دهیم و می‌گذاریم برای مدت زمان T به حرکت تقدیمی انجام دهد. در این لحظه میدان را به‌سرعت به جهت y می‌چرخانیم، و در نتیجه مؤلفه‌های آن به‌صورت $(0, B, 0)$ درمی‌آیند. پس از یک بازهٔ زمانی دیگر T، S_x را اندازه می‌گیریم. احتمال اینکه مقدار $\hbar/2$ به‌دست آید چقدر است؟

۱۴ـ۱۵ رفتار ذره‌ای با اسپین ۱ را در میدان مغناطیسی خارجی بررسی کنید. فرض کنید به‌صورت $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ است و حالت اولیه را یک ویژه‌حالت عملگر زیر به‌ترتیب با ویژه‌مقدارهای $\hbar$، ۰، $-\hbar$ بگیرید

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{n} = S_x \sin\,\theta\,\cos\,\phi + S_y \sin\,\theta\,\sin\,\phi + S_z \cos\,\theta$$

[راهنمایی: از نمایشهای ماتریسی ۱۴ـ۲۳ استفاده کنید.]

۱۴ـ۱۶ انرژی الکترونی به جرم μ در میدان مغناطیسی $\mathbf{B} = \mathbf{k}B$، با تکانهٔ صفر در راستای z،

با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$E = \frac{eB\hbar}{۲\mu c}(۲n + ۱ + |m| + m) \qquad \text{با} \qquad m = ۰, \pm۱, \pm۲, \pm۳, \ldots$$

(الف) با توجه به اینکه الکترون دارای اسپین ۱/۲ است، رابطهٔ انرژی به‌چه صورت در می‌آید؟

(ب) طیف انرژی را با در نظر گرفتن اثر اسپین برای چهار حالت اول انرژی ترسیم کنید. برای هر یک از ترازهایی که ترسیم می‌کنید، مقادیر کوانتومی مربوط به آن انرژی الکترون، یعنی n، m و S_z، را دقیقاً بنویسید.

مراجع

مباحث مربوط به اسپین را می‌توان در تمام کتابهایی که در آخر این کتاب معرفی کرده‌ایم یافت.

۱۵

جمع تکانه‌های زاویه‌ای

جمع دو اسپین

فرض کنید دو الکترون داریم که اسپینهای آنها با عملگرهای $\mathbf{S}_1$ و $\mathbf{S}_2$ توصیف می‌شوند. هر یک از این دو مجموعهٔ عملگرها در رابطه‌های جابه‌جایی مشخصهٔ تکانه‌های زاویه‌ای صدق می‌کنند:

$$[S_{1x}, S_{1y}] = i\hbar S_{1z}$$

و غیره، و

$$[S_{2x}, S_{2y}] = i\hbar S_{2z} \qquad (۱\_۱۵)$$

و غیره، اما دو مجموعهٔ عملگر با یکدیگر جابه‌جا می‌شوند زیرا درجه‌های آزادی مربوط به ذرات مختلف مستقل از یکدیگرند، یعنی

$$[\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2] = 0 \qquad (۲\_۱۵)$$

اکنون اسپین کل را با رابطهٔ زیر تعریف می‌کنیم

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 \tag{۳-۱۵}$$

رابطه‌های جابه‌جایی حاکم بر مؤلفه‌های $\mathbf{S}$ عبارت‌اند از

$$\begin{aligned} [S_x, S_y] &= [S_{1x} + S_{2x}, S_{1y} + S_{2y}] \\ &= [S_{1x}, S_{1y}] + [S_{2x}, S_{2y}] \\ &= i\hbar(S_{1z} + S_{2z}) = i\hbar S_z \end{aligned} \tag{۴-۱۵}$$

و غیره. بنابراین، اینکه $\mathbf{S}$ را اسپین کل گفتیم موجه است. اکنون می‌خواهیم ویژه‌مقدارها و ویژه‌تابعهای $\mathbf{S}^2$ و S_z را تعیین کنیم.

دستگاه دو اسپینی عملاً چهار حالت دارد. اگر اسپینورهای الکترون اول را با $\chi_\pm^{(1)}$ نشان دهیم، به‌طوری که

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_1^2 \chi_\pm^{(1)} &= \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + 1\right)\hbar^2 \chi_\pm^{(1)} \\ S_{1z}\chi_\pm^{(1)} &= \pm\frac{1}{2}\hbar\chi_\pm^{(1)} \end{aligned} \tag{۵-۱۵}$$

و به‌همین ترتیب اسپینورهای الکترون دوم $\chi_\pm^{(2)}$ باشند، این چهار حالت عبارت‌اند از

$$\chi_+^{(1)}\chi_+^{(2)},\ \chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)},\ \chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)},\ \chi_-^{(1)}\chi_-^{(2)} \tag{۶-۱۵}$$

ویژه‌مقدارهای S_z از رابطه‌های زیر تعیین می‌شوند

$$\begin{aligned} S_z\chi_\pm^{(1)}\chi_\pm^{(2)} &= (S_{1z} + S_{2z})\chi_\pm^{(1)}\chi_\pm^{(2)} \\ &= \left(S_{1z}\chi_\pm^{(1)}\right)\chi_\pm^{(2)} + \chi_\pm^{(1)}\left(S_{2z}\chi_\pm^{(2)}\right) \end{aligned}$$

یعنی

$$\begin{aligned} S_z\chi_+^{(1)}\chi_+^{(2)} &= \hbar\chi_+^{(1)}\chi_+^{(2)} \\ S_z\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)} &= S_z\chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)} = 0 \\ S_z\chi_-^{(1)}\chi_-^{(2)} &= -\hbar\chi_-^{(1)}\chi_-^{(2)} \end{aligned} \tag{۷-۱۵}$$

به‌ازای $m = 0$ دو حالت داریم، و پیش‌بینی می‌کنیم که از یک ترکیب خطی این دو حالت یک حالت $S = 1$ به‌دست می‌آید که با حالتهای $m = 1$ و $m = -1$ یک سه‌تایی تشکیل می‌دهد، و از ترکیب متعامد یک حالت تکتایی $S = 0$ به‌دست می‌آید. برای تحقیق درستی این پیش‌بینی، عملگر کاهندهٔ زیر را می‌سازیم

$$S_- = S_{1-} + S_{2-} \tag{۱۵-۸}$$

و آن‌را بر حالت $m = 1$ اعمال می‌کنیم. در نتیجه یک حالت $m = 0$ به‌دست می‌آید که با تقریب یک ضریب به سه‌تایی $S = 1$ تعلق دارد. در واقع، با استفاده از

$$S_-^{(i)}\chi_+^{(i)} = h\chi_-^{(i)} \tag{۱۵-۹}$$

که می‌توان آن‌را با توجه به رابطهٔ زیر اثبات کرد

$$\frac{1}{2}h\left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - i\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\right]\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = h\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{۱۵-۱۰}$$

داریم

$$\begin{aligned} S_-\chi_+^{(1)}\chi_+^{(2)} &= \left(S_{1-}\chi_+^{(1)}\right)\chi_+^{(2)} + \chi_+^{(1)}S_{2-}\chi_+^{(2)} \\ &= h\chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)} + h\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)} \\ &= \sqrt{2}\, h\frac{\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)} + \chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)}}{\sqrt{2}} \end{aligned} \tag{۱۵-۱۱}$$

این ترکیب خطی بهنجارشده است، و ضریب جبران‌کنندهٔ $\sqrt{2}h$ با آنچه از ۱۱ـ۳۶ و ۱۱ـ۴۸ به‌ازای $l = m = 1$ انتظار داریم توافق دارد. با اعمال S_- بر این ترکیب خطی، و با توجه به اینکه

$$S_-^{(i)}\chi_-^{(i)} = 0 \tag{۱۵-۱۲}$$

به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} S_-\frac{\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)} + \chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)}}{\sqrt{2}} &= \frac{h}{\sqrt{2}}\left(\chi_-^{(1)}\chi_-^{(2)} + \chi_-^{(1)}\chi_-^{(2)}\right) \\ &= \sqrt{2}h\chi_-^{(1)}\chi_-^{(2)} \end{aligned} \tag{۱۵-۱۳}$$

که همان چیزی است که برای حالت‌های [illegible] $S = 1$ باید به‌دست آوریم. حالت باقی‌مانده، که طوری ساخته شده است که با ۱۵ـ۱۱ متعامد و درست بهنجارشده باشد، عبارت است از

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)} - \chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)}) \tag{۱۵ـ۱۴}$$

و چون همتایی ندارد حدس می‌زنیم که یک حالت $S = 0$ باشد. برای وارسی این حدس، $\mathbf{S}^2$ را برای دو حالت زیر محاسبه می‌کنیم

$$X_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)} \pm \chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)}) \tag{۱۵ـ۱۵}$$

داریم

$$\begin{aligned}\mathbf{S}^2 &= (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2 = \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \\ &= \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2S_{1z}S_{2z} + S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+}\end{aligned} \tag{۱۵ـ۱۶}$$

ابتدا می‌نویسیم

$$\begin{aligned}\mathbf{S}_1^2 X_\pm &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_-^{(2)}\mathbf{S}_1^2\chi_+^{(1)} \pm \chi_+^{(2)}\mathbf{S}_1^2\chi_-^{(1)}) \\ &= \frac{3}{4}\hbar^2 X_\pm\end{aligned} \tag{۱۵ـ۱۷}$$

و به‌همین ترتیب،

$$\mathbf{S}_2^2 X_\pm = \frac{3}{4}\hbar^2 X_\pm \tag{۱۵ـ۱۸}$$

سپس، برای جملهٔ سوم ۱۵ـ۱۶ داریم

$$2S_{1z}S_{2z}X_\pm = 2\left(\frac{1}{2}\hbar\right)\left(-\frac{1}{2}\hbar\right)X_\pm = -\frac{1}{2}\hbar^2 X_\pm \tag{۱۵ـ۱۹}$$

و سرانجام

$$\begin{aligned}(S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+})X_\pm = &\frac{1}{\sqrt{2}}(S_{1+}\chi_+^{(1)}S_{2-}\chi_-^{(2)} + S_{1-}\chi_+^{(1)}S_{2+}\chi_-^{(2)} \\ &\pm S_{1+}\chi_-^{(1)}S_{2-}\chi_+^{(2)} \pm S_{1-}\chi_-^{(1)}S_{2+}\chi_+^{(2)})\end{aligned}$$

که با توجه به ۱۵_۹ و ۱۵_۱۲ به‌دست می‌آید

$$(S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+})X_{\pm} = \pm\hbar^2 X_{\pm} \qquad (۱۵\_۲۰)$$

بنابراین، برای حالتهای $\pm$ متناظر با $S = 1, 0$، به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned}\mathbf{S}^2 X_{\pm} &= \hbar^2\left(\frac{3}{4}+\frac{3}{4}-\frac{1}{2}\pm 1\right)X_{\pm} = \begin{pmatrix}2\\0\end{pmatrix}\hbar^2 X_{\pm}\\ &= \hbar^2 S(S+1)X_{\pm}\end{aligned} \qquad (۱۵\_۲۱)$$

آنچه نشان داده‌ایم این است که تمام چهار حالت ذرات اسپین ۱/۲ را می‌توان به‌صورت حالتهای اسپین کل سه‌تایی و تکتایی بازترکیب کرد. باید توجه کرد که دو توصیف کاملاً هم‌ارز داریم. در یک مورد، مجموعهٔ کامل مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشونده از $\mathbf{S}_1^2$، $\mathbf{S}_2^2$، S_{1z} و S_{2z} تشکیل می‌شود. در مورد دیگر، مجموعهٔ کامل مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشوندهٔ $\mathbf{S}^2$، S_z، $\mathbf{S}_1^2$ و $\mathbf{S}_2^2$ را داریم. بنابه قضیهٔ بسط، هر تابعی را می‌توان برحسب مجموعهٔ کاملی از ویژه‌حالتها بسط داد. آنچه در اینجا نشان داده‌ایم بسط ویژه‌حالتهای مجموعهٔ دوم مشاهده‌پذیرها برحسب مجموعهٔ کامل حالتهای مجموعهٔ اول مشاهده‌پذیرها است. این کاملاً شبیه به نوشتن ویژه‌حالتهای اتم هیدروژن برحسب ویژه‌حالتهای عملگر تکانه است، که در آن ضرایب بسط (مانسته‌های ضرایب $1/\sqrt{2}$ در اینجا) توابع‌موج فضای تکانه هستند. به‌سادگی می‌توان این فرایند را وارونه کرد و حاصلضربهای $\chi^{(1)}\chi^{(2)}$ را برحسب ترکیبهای سه‌تایی و تکتایی به‌دست آورد.

در مسائل فیزیکی، اغلب اتفاق می‌افتد که در تقریب اول این دو مجموعهٔ مشاهده‌پذیرهای جابه‌جاشوندهٔ کامل برای ساختن ویژه‌حالتها به یک اندازه مفید هستند. در تقریب بعد، وقتی جمله‌های اضافی در هامیلتونی به‌حساب آورده می‌شوند، تنها یکی از این دو مجموعه مفید خواهد بود. یک مثال ساده در فیزیک هسته‌ای کم انرژی پیش می‌آید.

در مطالعات اولیهٔ پتانسیل $V(r)$ که برهم‌کنش میان نوترونها و پروتونها کم‌انرژی را توصیف می‌کند معلوم شد که شدت برهم‌کنش بستگی به این دارد که دو ذرهٔ برهم‌کنش‌کننده در حالت اسپین کل $S = 1$ باشند یا در حالت $S = 0$. به‌عنوان مثال، برای دوترون $S = 1$، در حالی‌که حالت $S = 0$ برای یک نوترون و یک پروتون حالت مقید نیست. این وضعیت را می‌توان برحسب یک پتانسیل وابسته به اسپین توصیف کرد. فرض کنید

$$V(r) = V_1(r) + \frac{1}{\hbar^2}\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2 V_2(\mathbf{r}) \qquad (۱۵\_۲۲)$$

به‌سادگی می‌توان دید که S_1 و S_{2z} با جملهٔ دوم جابه‌جا نمی‌شوند، و در نتیجه ویژه‌حالتهای هامیلتونی حاوی این پتانسیل نمی‌توانند صرفاً حاصلضربهای ساده‌ای از ویژه‌حالتهای S_{1z} و S_{2z}،

باشند. اما با توجه به اینکه

$$\mathbf{S}_۱ \cdot \mathbf{S}_۲ = \frac{۱}{۲}(\mathbf{S}^۲ - \mathbf{S}_۱^۲ - \mathbf{S}_۲^۲) \qquad (۱۵\text{-}۲۳)$$

به‌طوری که می‌توان به‌جای این جمله، وقتی روی ویژه‌تابع $\mathbf{S}^۲$، $\mathbf{S}_۱^۲$ و $\mathbf{S}_۲^۲$ عمل می‌کند، ویژه‌مقدارآن‌را قرار داد، می‌توانیم بنویسیم

$$\begin{aligned} V(r) &= V_۱(r) + \frac{۱}{۲}V_۲(r)\left[S(S+۱) - \frac{۳}{۲}\right] \\ &= V_۱(r) + \frac{۱}{۴}\begin{pmatrix} ۱ \\ -۳ \end{pmatrix} V_۲(r) \begin{cases} S = ۱ \\ S = ۰ \end{cases} \end{aligned} \qquad (۱۵\text{-}۲۴)$$

این نوع پتانسیل وابسته به اسپین در واقع در دستگاه نوترون-پروتون مشاهده شده است. حالت مقید یک حالت $S = ۱$ است ـــ یعنی همان دوترون است ـــ اما حالت نامقید $S = ۰$ نیز وجود دارد. بنابراین، $V_۱ - (۳/۴)V_۲$ باید پتانسیلی باشد که جاذبهٔ آن از $V_۱ + (۱/۴)V_۲$ کمتر است. تنها اگر $V_۲(r) \neq ۰$ این وضعیت امکانپذیر است.

تابع‌موج تکتایی اسپین ۱۵ـ۱۴ ایجاب می‌کند که اگر در یک اندازه‌گیری معلوم شد الکترون (۲) حالت اسپین "بالا" است الکترون (۱) باید در حالت اسپین "پایین" باشد. اگرچه الکترونها یکسان هستند می‌توان یک حالت تکتایی در نظر گرفت که در آن الکترونها با تکانه‌های مساوی و مخالف به راست و به چپ حرکت می‌کنند، به‌طوری که دستگاه دو الکترونی باز هم نسبت به مرکز جرم ساکن است. الکترون (۲) می‌تواند الکترونی باشد که به راست حرکت می‌کند و الکترون (۱) الکترونی که به چپ حرکت می‌کند، و این گفته که الکترون سمت راست در حالت "بالا" است معنای کاملاً معینی دارد.

می‌توان پرسش جالبتری را مطرح کرد. فرض کنید S_x را برای الکترون (۲) اندازه گرفته‌ایم و معلوم شده است که ویژه‌مقدار آن $+\hbar/۲$ است. یعنی الکترون (۲) در امتداد محور x در حالت "بالا"ست. اندازه‌گیری S_x برای الکترون (۱) چه نتیجه‌ای به‌دست خواهد داد؟ چون فاصلهٔ دو الکترون از یکدیگر بسیار زیاد است، ممکن است فکر کنیم که هر یک از دو مقدار $+\hbar/۲$ یا $-\hbar/۲$، و شاید با احتمال یکسان، می‌تواند به‌دست آید، زیرا اطلاعات مربوط به نتیجهٔ "تصویر" الکترون (۲) بر یک ویژه‌حالت خاص S_x نمی‌تواند با سرعت نامتناهی منتشر شود تا بر اندازه‌گیری روی الکترون (۱) تأثیر بگذارد. این در واقع چیزی است که باید انتظار داشته باشیم اگر بپذیریم که یک نظریهٔ فیزیکی کامل باید دارای معیارهای مشخصی باشد، چنانکه در یک مقالهٔ آلبرت اینشتین، روزن، و پادولسکی به‌دقت بیان شده است.[1] از طرف دیگر، بنابه مکانیک کوانتومی دستگاه دو

۱. این موضوع به‌خوبی در کتاب نظریهٔ کوانتومی دیوید بوهم و از یک دیدگاه جدیدتر، در ارتباط با پژوهشهای جی ←

اسپینی با یک تک تابع‌موج توصیف می‌شود که در آن اسپینها هم‌بسته‌اند. اندازه‌گیری روی بخشی از دستگاه، در اینجا S_x برای یکی از الکترونها، همراه با این آگاهی که دستگاه در یک حالت اسپینی تکتایی است، در واقع اندازه‌گیری روی تمام تابع‌موج است. بنابراین، اگر از اندازه‌گیری S_x برای الکترون (۲) مقدار $\hbar/۲$ به‌دست آید، آنگاه نتیجه اندازه‌گیری S_x برای الکترون (۱) باید $-\hbar/۲$ باشد. برای اثبات صوری این نتیجه، توجه کنید که ویژه‌حالتهای $\chi_\pm$ را می‌توان به ویژه‌حالتهای S_x، که آنها را با $\xi_\pm$ نشان می‌دهیم، تجزیه کرد. قبلاً دیدیم (رابطه‌های ۱۴ـ۵۶ و ۱۴ـ۵۷ به‌ازای $\phi = ۰$) که

$$\xi_\pm = \frac{۱}{\sqrt{۲}}(\chi_+ \pm \chi_-)$$

یا معادل آن

$$\chi_\pm = \frac{۱}{\sqrt{۲}}(\xi_+ \pm \xi_-)$$

با جاگذاری در

$$\psi = \frac{۱}{\sqrt{۲}}(\chi_+^{(۱)}\chi_-^{(۲)} - \chi_-^{(۱)}\chi_+^{(۲)})$$

به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned}\psi &= (۱/\sqrt{۲})^{(۳)}[(\xi_+^{(۱)} + \xi_-^{(۱)})(\xi_+^{(۲)} - \xi_-^{(۲)}) - (\xi_+^{(۱)} - \xi_-^{(۱)})(\xi_+^{(۲)} + \xi_-^{(۲)})] \\ &= \frac{۱}{\sqrt{۲}}(\xi_+^{(۱)}\xi_-^{(۲)} - \xi_-^{(۱)}\xi_+^{(۲)})\end{aligned} \qquad (۱۵\text{ـ}۲۵)$$

که به‌روشنی نشان می‌دهد اگر الکترون (۲) در حالت "بالا" باشد آنگاه الکترون (۱) باید در حالت "پایین" باشد.

جمع اسپین ۱/۲ و تکانهٔ زاویه‌ای مداری

آنچه در کاربردهای بعدی اهمیت فراوان دارد ترکیب اسپین با تکانهٔ زاویه‌ای مداری است. چون $\mathbf{L}$ وابسته به مختصات فضایی است و $\mathbf{S}$ نیست، با هم جابه‌جا می‌شوند:

$$[\mathbf{L}, \mathbf{S}] = ۰ \qquad (۱۵\text{ـ}۲۶)$$

اس بی، در مکانیک کوانتومی نوین ساکورایی بررسی شده است. همچنین مراجعه کنید به سخن آخر در کتاب آشنایی با مکانیک کوانتومی دیوید جی گریفیث.

بنابراین، بدیهی است که مؤلفه‌های تکانهٔ زاویه‌ای کل $\mathbf{J}$ که با رابطهٔ زیر تعریف می‌شود

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \qquad (۱۵ـ۲۷)$$

در رابطه‌های جابه‌جایی تکانه‌های زاویه‌ای صدق می‌کنند.

برای یافتن ترکیبهای خطی Y_{lm} و $\chi_\pm$ که ویژه‌حالتهای

$$J_z = L_z + S_z \qquad (۱۵ـ۲۸)$$

و

$$\begin{aligned}\mathbf{J}^2 &= \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + 2\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}\\ &= \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + 2L_zS_z + L_+S_- + L_-S_+\end{aligned} \qquad (۱۵ـ۲۹)$$

هستند، باز هم ضریبهای بسط یک مجموعهٔ کامل از ویژه‌تابعها را برحسب مجموعهٔ کامل ویژه‌تابعهای دیگر به‌دست می‌آوریم

ترکیب خطی زیر را در نظر بگیرید

$$\psi_{j,m+1/2} = \alpha Y_{lm}\chi_+ + \beta Y_{l,m+1}\chi_- \qquad (۱۵ـ۳۰)$$

این ترکیب، بنابه ساختارش، یک ویژه‌تابع J_z با ویژه‌مقدار $(m+1/2)\hbar$ است. اکنون α و β را چنان تعیین می‌کنیم که ترکیب بالا ویژه‌تابع J^2 هم باشد. با استفاده از رابطه‌های

$$\begin{aligned}L_+Y_{lm} &= [l(l+1)-m(m+1)]^{1/2}\hbar Y_{l,m+1}\\ &= [(l+m+1)(l-m)]^{1/2}\hbar Y_{l,m+1}\\ L_-Y_{lm} &= [(l-m+1)(l+m)]^{1/2}\hbar Y_{l,m-1}\\ S_+\chi_+ = S_-\chi_- &= 0 \qquad S_\pm\chi_\mp = \hbar\chi_\pm\end{aligned} \qquad (۱۵ـ۳۱)$$

می‌نویسیم

$$\begin{aligned}\mathbf{J}^2\psi_{j,m+1/2} =& \alpha\hbar^2\{l(l+1)Y_{lm}\chi_+ + \frac{3}{4}Y_{lm}\chi_+ + 2m\left(\frac{1}{2}\right)Y_{lm}\chi_+\\ &+ [(l-m)(l+m+1)]^{1/2}Y_{l,m+1}\chi_-\} + \beta\hbar^2\{l(l+1)Y_{l,m+1}\chi_-\\ &+ \frac{3}{4}Y_{l,m+1}\chi_- + 2(m+1)\left(-\frac{1}{2}\right)Y_{l,m+1}\chi_-\\ &+ [(l-m)(l+m+1)]^{1/2}Y_{l,m}\chi_+\}\end{aligned} \qquad (۱۵ـ۳۲)$$

که به‌صورت

$$\hbar^2 j(j+1)\psi_{j,m+1/2} = \hbar^2 j(j+1)(\alpha Y_{lm}\chi_+ + \beta Y_{l,m+1}\chi_-) \qquad (۱۵\_۳۳)$$

است به شرط اینکه

$$\begin{aligned} \alpha\left[l(l+1)+\frac{3}{4}+m\right]+\beta[(l-m)(l+m+1)]^{1/2} &= j(j+1)\alpha \\ \beta\left[l(l+1)+\frac{3}{4}-m-1\right]+\alpha[(l-m)(l+m+1)]^{1/2} &= j(j+1)\beta \end{aligned} \qquad (۱۵\_۳۴)$$

از اینجا به‌دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} (l-m)(l+m+1) = &\left[j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4}-m\right] \\ &\times\left[j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4}+m+1\right] \end{aligned}$$

که به‌وضوح دارای دو جواب زیر است

$$j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4} = \begin{cases} -l-1 \\ l \end{cases} \qquad (۱۵\_۳۵)$$

یعنی

$$j = \begin{cases} 1-\frac{1}{2} \\ l+\frac{1}{2} \end{cases} \qquad (۱۵\_۳۶)$$

به‌ازای $j = l + 1/2$، به‌دست می‌آوریم

$$\alpha = \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}} \qquad \beta = \sqrt{\frac{1-m}{2l+1}} \qquad (۱۵\_۳۷)$$

(در واقع نسبت را به‌دست می‌آوریم؛ اینها مقادیر بهنجارشده هستند.) بنابراین،

$$\psi_{l+1/2,m+1/2} = \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}}Y_{lm}\chi_+ + \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}}Y_{l,m+1}\chi_- \qquad (۱۵\_۳۸)$$

می‌توان حدس زد که جواب مربوط به $j = l - 1/2$ برای متعامد بودن با جواب مربوط به $j = l + 1/2$، باید به‌صورت زیر باشد

$$\psi_{l-1/2,m+1/2} = \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}}\, Y_{lm}\chi_{+} - \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}}\, Y_{l,m+1}\chi_{-} \qquad (۱۵\_۳۹)$$

قاعده‌های کلی جمع تکانه‌های زاویه‌ای، و پیامدهای آن برای ذرات یکسان

دو مثال بالا ویژگیهای کلی جمع تکانه‌های زاویه‌ای را نشان می‌دهند: با داشتن ویژه‌حالتهای $Y^{(1)}_{l_1 m_1}$، مربوط به $\mathbf{L}_1^2$ و L_{1z}، و ویژه‌حالتهای $Y^{(2)}_{l_2 m_2}$، مربوط به $\mathbf{L}_2^2$ و L_{2z}، می‌توان تعداد $(2l_1+1)(2l_2+1)$ حاصلضرب توابع زیر را تشکیل داد

$$Y^{(1)}_{l_1 m_1} Y^{(2)}_{l_2 m_2} \begin{Bmatrix} -l_1 \le m_1 \le l_1 \\ -l_2 \le m_2 \le l_2 \end{Bmatrix} \qquad (۱۵\_۴۰)$$

این توابع موج را می‌توان با ویژه‌مقدار عملگر

$$J_z = L_{1z} + L_{2z} \qquad (۱۵\_۴۱)$$

که $m_1 + m_2$ است و از مقدار بیشینهٔ $l_1 + l_2$ تا مقدار کمینهٔ $-l_1 - l_2$ تغییر می‌کند، رده‌بندی کرد. مانند دو مورد ساده‌ای که قبلاً بررسی کردیم، ترکیبهای خطی مختلف تابعهای مربوط به مقدار یکسان m به مقادیر مختلف j متعلق هستند. در جدول زیر ترکیبهای ممکن مربوط به مثال خاص $l_1 = 4$ و $l_2 = 2$ را می‌بینید. دراین جدول از نماد اختصاری (m_1, m_2) به‌جای $Y^{(1)}_{l_1 m_1} Y^{(2)}_{l_2 m_2}$ استفاده کرده‌ایم. جمعاً ۴۵ ترکیب داریم، که با $(2l_1+1)(2l_2+1)$ سازگار است.

بالاترین حالت دارای تکانهٔ زاویه‌ای کل $l_1 + l_2$ است، چنانکه می‌توان به‌سادگی از اعمال J^2 بر $Y^{(1)}_{l_1 l_1} Y^{(2)}_{l_2 l_2}$ دید:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2 Y^{(1)}_{l_1 l_1} Y^{(2)}_{l_2 l_2} &= (\mathbf{L}_1^2 + \mathbf{L}_2^2 + 2L_{1z}L_{2z} + L_{1+}L_{2-} + L_{1-}L_{2+}) Y^{(1)}_{l_1 l_1} Y^{(2)}_{l_2 l_2} \\ &= \hbar^2 [l_1(l_1+1) + l_2(l_2+1) + 2l_1 l_2] Y^{(1)}_{l_1 l_1} Y^{(2)}_{l_2 l_2} \\ &= \hbar^2 (l_1+l_2)(l_1+l_2+1) Y^{(1)}_{l_1 l_1} Y^{(2)}_{l_2 l_2} \end{aligned} \qquad (۱۵\_۴۲)$$

تعداد	ترکیبهای m_1 و m_2	مقدار m
۱	(۴, ۲)	۶
۲	(۴, ۱)(۳, ۲)	۵
۳	(۴, ۰)(۳, ۱)(۲, ۲)	۴
۴	(۴, −۱)(۳, ۰)(۲, ۱)(۱, ۲)	۳
۵	(۴, −۲)(۳, −۱)(۲, ۰)(۱, ۱)(۰, ۲)	۲
۵	(۳, −۲)(۲, −۱)(۱, ۰)(۰, ۱)(−۱, ۲)	۱
۵	(۲, −۲)(۱, −۱)(۰, ۰)(−۱, ۱)(−۲, ۲)	۰
۵	(۱, −۲)(۰, −۱)(−۱, ۰)(−۲, ۱)(−۳, ۲)	−۱
۵	(۰, −۲)(−۱, −۱)(−۲, ۰)(−۳, ۱)(−۴, ۲)	−۲
۴	(−۱, −۲)(−۲, −۱)(−۳, ۰)(−۴, ۱)	−۳
۳	(−۲, −۲)(−۳, −۱)(−۴, ۰)	−۴
۲	(−۳, −۲)(−۴, −۱)	−۵
۱	(−۴, −۲)	−۶

این حالت مربوط به $j = ۶$ در جدول بالا است. با اعمال پی‌درپی عملگر

$$J_- = L_{1-} + L_{2-} \qquad (۱۵\text{ـ}۴۳)$$

یک ترکیب خطی از هر سطر جدول به‌دست می‌آید. این ترکیبها ۱۳ حالت تشکیل می‌دهند که متعلق به $j = ۶$ هستند. پس از انجام این کار، یک حالت با $m = ۵$، دو حالت با $m = ۴$، ...، یک حالت با $m = -۵$ باقی می‌ماند. این نتیجه‌گیری موجه است، و در واقع می‌توان وارسی کرد که حالت $m = ۵$ به $j = ۵$ مربوط می‌شود. باز هم با اعمال پی در پی L_- یک ترکیب خطی دیگر از هر سطر جدول به‌دست می‌آوریم، که جمعاً ۱۱ حالت مربوط به $j = ۵$ تشکیل می‌دهند. با ادامهٔ این روند مجموعه‌هایی مربوط به $j = ۴$، $j = ۳$ و سرانجام $j = ۲$ به‌دست می‌آیند. تعداد اینها به ۴۵ می‌رسد:

$$۱۳ + ۱۱ + ۹ + ۷ + ۵ = ۴۵$$

جزئیات این تجزیه را بررسی نمی‌کنیم زیرا این کار فراتر از اهداف این کتاب است. تنها به بیان نتایج می‌پردازیم.

(الف) حاصلضربهای $Y^{(1)}_{l_1 m_1} Y^{(2)}_{l_2 m_2}$ را می‌توان به ویژه‌حالتهای $\mathbf{J}^2$ با ویژه‌مقدارهای $j(j+1)\hbar^2$ تجزیه کرد؛ j می‌تواند مقادیر زیر را بگیرد

$$j = l_1 + l_2' l_1 + l_2 - 1, \ldots , |l_1 - l_2| \qquad (۱۵\text{ـ}۴۴)$$

می‌توان تحقیق کرد که تعداد حالتها با ۱۵_۴۴ تطبیق می‌کند. اگر تعداد حالتها را جمع بزنیم به‌دست می‌آوریم $(l_1 \geq l_2)$

$$\begin{aligned}[2(l_1+l_2)+1]+[2(l_1+l_2-1)+1]+\cdots+[2(l_1-l_2)+1] &= \sum_{n=0}^{2l_2}[2(l_1-l_2+n)+1] \\ &= (2l_2+1)(2l_1+1)\end{aligned} \qquad (۱۵\text{_}۴۵)$$

(ب) رابطه‌های ۱۵_۳۸ و ۱۵_۳۹ را می‌توان تعمیم داد و رشتهٔ کلبش_گوردان را به‌دست آورد:

$$\psi_{jm} = \sum_{m_1} C(jm; l_1 m_1 l_2 m_2) Y^{(1)}_{l_1 m_1} Y^{(2)}_{l_2 m_2} \qquad (۱۵\text{_}۴۶)$$

ضرایب $C(jm; l_1 m_1 l_2 m_2)$ را ضرایب کلبش_گوردان می‌نامند؛ این ضرایب را به‌ازای مقادیر زیادی از شناسه‌ها جدول‌بندی کرده‌اند. در اینجا این ضرایب را به‌ازای $l_2 = 1/2$ محاسبه کرده‌ایم، و خلاصهٔ ۱۵_۳۷ و ۱۵_۳۸ را در جدول زیر نوشته‌ایم. توجه کنید که $m = m_1 + m_2$، و در نتیجه m در این رابطه‌ها همان m_1 در جدول زیر است.

$C(jm; l_1 m_1, 1/2, m_2)$

	$m_2 = 1/2$	$m_2 = -1/2$
$j = l_1 + 1/2$	$\sqrt{\frac{l_1+m+1/2}{2l_1+1}}$	$\sqrt{\frac{l_1-m+1/2}{2l_1+1}}$
$j = l_1 - 1/2$	$-\sqrt{\frac{l_1-m+1/2}{2l_1+1}}$	$\sqrt{\frac{l_1+m+1/2}{2l_1+1}}$

یک جدول مفید دیگر عبارت است از

$C(jm; l_1 m_1, 1, m_2)$

	$m_2 = 1$	$m_2 = 0$	$m_2 = -1$
$j = l_1 + 1$	$\sqrt{\frac{(l_1+m)(l_1+m+1)}{(2l_1+1)(2l_1+2)}}$	$\sqrt{\frac{(l_1-m+1)(l_1+m+1)}{(2l_1+1)(l_1+1)}}$	$\sqrt{\frac{(l_1-m)(l_1-m+1)}{(2l_1+1)(2l_1+2)}}$
$j = l_1$	$-\sqrt{\frac{(l+m)(l_1-m+1)}{2l_1(l_1+1)}}$	$\frac{m}{\sqrt{l_1(l_1+1)}}$	$\sqrt{\frac{(l_1-m)(l_1+m+1)}{2l_1(2l_1+1)}}$
$j = l_1 - 1$	$\sqrt{\frac{(l_1-m)(l_1-m+1)}{2l_1(2l_1+1)}}$	$-\sqrt{\frac{(l_1-m)(l_1+m)}{l_1(2l_1+1)}}$	$\sqrt{\frac{(l_1+m)(l_1+m+1)}{2l_1(2l_1+1)}}$

و در پایان باید نکته‌ای را تذکر دهیم. در بحث ذرات یکسان گفتیم که دستگاه متشکل از دو الکترون (یا به‌طورکلی دو فرمیون) باید در حالتی باشد که تحت تعویض دو ذره پادمتقارن است. در این تعویض، علاوه بر تبادل مختصات فضایی، تبادل نشانهای اسپینی نیز دخیل است. برای دستگاهی متشکل از دو ذرهٔ یکسان با اسپین ۱/۲، حالتهای سه‌تایی $S = ۱$، یعنی

$$\begin{aligned} &\chi_+^{(۱)}\chi_+^{(۲)} \\ &\frac{۱}{\sqrt{۲}}(\chi_+^{(۱)}\chi_-^{(۲)} + \chi_-^{(۱)}\chi_+^{(۲)}) \\ &\chi_-^{(۱)}\chi_-^{(۲)} \end{aligned} \qquad (۱۵\_۴۷)$$

تحت تعویض نشان اسپینی متقارن هستند، در حالی که حالت تکتایی $S = ۰$

$$\frac{۱}{\sqrt{۲}}(\chi_+^{(۱)}\chi_-^{(۲)} - \chi_-^{(۱)}\chi_+^{(۲)}) \qquad (۱۵\_۴۸)$$

پادمتقارن است. بنابراین، تابع‌موج فضایی باید برای حالت سه‌تایی پادمتقارن و برای حالت تکتایی متقارن باشد. تابع‌موج فضایی دستگاه دو ذره‌ای در چارچوب مرکز جرم به‌صورت کلی زیر است

$$u(\mathbf{r}) = R_{nlm}(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \qquad (۱۵\_۴۹)$$

تعویض مختصات دو ذره هم‌ارز تبدیل زیر است

$$\begin{aligned} &r \rightarrow r \\ &\theta \rightarrow \pi - \theta \\ &\phi \rightarrow \phi + \pi \end{aligned} \qquad (۱۵\_۵۰)$$

بنابراین، تابع شعاعی تغییر نمی‌کند. اما تحت این تبدیل داریم

$$\begin{aligned} Y_{lm}(\theta\ \phi) \rightarrow &Y_{lm}(\pi - \theta, \phi + \pi) \\ = &(-۱)^l Y_{lm}(\theta, \phi) \end{aligned} \qquad (۱۵\_۵۱)$$

در نتیجه، تکانهٔ زاویه‌ای مداری l باید برای حالتهای سه‌تایی فرد و برای حالتهای تکتایی زوج باشد. در بحث اتم هلیم کاربرد این نتیجه را خواهیم دید.

نکاتی دربارهٔ پاریته

استدلال بالا را می‌توان برای بررسی خواص Y_{lm} تحت وارونی به‌کار برد. تبدیل $x \to -x$، $y \to -y$ و $z \to -z$ با ۱۵ـ۵۰ است. بنابراین، می‌بینیم که ذره‌ای در یک حالت تکانهٔ زاویه‌ای مداری دارای تابع‌موجی است که با $(-1)^l$ تغییر می‌کند. حالتهای مداری با l زوج حالتهای پاریتهٔ زوج نیز هستند، و حالتهای مداری با l فرد حالتهای پاریتهٔ فرد هستند. اما باید توجه داشت که ذرات می‌توانند پاریتهٔ ذاتی هم داشته باشند. می‌توان پاریتهٔ الکترون و نوترون و پروتون را زوج تعریف کرد. آنگاه، به‌عنوان مثال، پاریتهٔ حالت $l = 1$ برای هیدروژن، فرد است، در حالی‌که پاریتهٔ حالت پایهٔ آن زوج است.

در مکانیک کوانتومی نسبیتی می‌توان نشان داد که پاریتهٔ ذاتی پادذرهٔ یک فرمیون مخالف پاریتهٔ ذاتی فرمیون است. مثلاً e^+ دارای پاریتهٔ ذاتی منفی است، و در نتیجه حالت پایهٔ پوزیترونیم که برای آن $l = 0$ پاریتهٔ منفی دارد.

یک کاربرد جالب این نکات را در فیزیک ذرات بنیادی می‌توان دید. یکی از اولین ذرات بنیادی ناپایدار که بنابه پیش‌بینی یوکاوا باید کشف می‌شد مزون π بود. این ذره که دارای سه حالت بار π^+، π° و π^- است نقش مهمی در نیروهای هسته‌ای دارد. معلوم شد که این ذره دارای اسپین ۰ است، و این سؤال پیش آمد که با فرض اینکه ذرات شناخته‌شدهٔ پروتون و نوترون پاریتهٔ ذاتی مثبت داشته باشند، تابع‌موج مزون پی ـــ که بعداً پیون نامیده شد ـــ تحت انعکاس زوج است یا فرد؟ آزمایش زیر پیشنهاد شد.

گیراندازی π^- توسط دوترون را در نظر بگیرید. یک پیون کند در دوتریم مایع از راههای مختلفی انرژی از دست می‌دهد تا سرانجام در پایین‌ترین مدار بور حول هستهٔ (pn) قرار گیرد، و سپس تحت تأثیر نیروهای هسته‌ای گیر می‌افتد. در واکنش هسته‌ای

$$\pi^- + d \to n + n$$

تکانهٔ زاویه‌ای برابر با ۱ است؛ اسپین پیون صفر است، و تکانهٔ زاویه‌ای مداری در پایین‌ترین حالت بور صفر است، و در نتیجه تنها تکانهٔ زاویه‌ای دوترون که ۱ است، در این مورد سهیم است. بنابراین، دو نوترون باید در حالت تکانهٔ زاویه‌ای ۱ باشند. اگر اسپین کل دو نوترون ۰ باشد، تکانهٔ زاویه‌ای مداری باید ۱ باشد. اگر اسپین کل حالت دو نوترون ۱ باشد، تکانهٔ زاویه‌ای مداری می‌تواند ۰، ۱، و ۲ باشد، زیرا جمع دو تکانهٔ زاویه‌ای که هر یک از آنها برابر واحد است می‌تواند ۰، ۱، و ۲ باشد، و افزودن یک واحد به دو واحد تکانهٔ زاویه‌ای می‌تواند ۳، ۲، و ۱ را به‌دست دهد. اما حالت تکتایی دو فرمیون یکسان باید تکانهٔ زاویه‌ای زوج داشته باشد، و از این‌رو کنار گذاشته می‌شود. یک حالت سه‌تایی باید تکانهٔ زاویه‌ای مداری فرد داشته باشد، و این در صورتی ممکن است که تکانهٔ زاویه‌ای مداری ۱ باشد. اما این حالت بنابه ۱۵ـ۵۱ دارای پاریتهٔ فرد است، و در نتیجه پیون باید پاریتهٔ

فرد داشته باشد. با نمادگذاری طیف‌نمایی، که در آن یک حالت با

$$ {}^{2S+1}L_j \qquad (۱۵\text{-}۵۲) $$

نشانگذاری می‌شود، حالتهای دونوترون، از تمام ردهٔ حالتهای ${}^1S_0$، ${}^1P_1$، ${}^1D_2$، ${}^1F_3$، ...، ${}^3S_1$، ${}^3P_2$، ${}^3P_2$، ${}^3P_0$، ${}^3D_3$، ${}^3D_2$، ${}^3D_1$، ${}^3F_4$، ${}^3F_3$، ${}^3F_2$، ...، با توجه به آمار فرمی‌ـدیراک به ${}^1S_0$، ${}^1D_2$، ...، ${}^3P_{2,1,0}$، ${}^3F_{4,3,2}$، ... محدود می‌شوند، و از اینها تنها یک حالت، حالت ${}^3P_1$، دارای تکانهٔ زاویه‌ای ۱ است.

مسائل [4]

✓ **۱۵-۱** تعمیم ۱۵-۳۸ و ۱۵-۳۹ به جمع تکانهٔ زاویه‌ای مداری با اسپین ۱ را به‌تفصیل بنویسید.

(الف) ویژه‌حالتهای $\mathbf{S}^2$ و S_z را به‌دست آورید. در این مورد،

$$ S_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} $$

(ب) اگر این ویژه‌حالتها را با ξ_{+1}، ξ_0 و ξ_{-1} نشان دهیم، نتیجهٔ اعمال S_+ و S_- بر این حالتها را به‌دست آورید.

(ج) تأثیر

$$ \mathbf{J}^2 = \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + 2L_zS_z + L_+S_- + L_-S_+ $$

را بر ترکیبهایی مانند

$$ \psi_{jm+1} = \alpha Y_{lm}\xi_1 + \beta Y_{l,m+1}\xi_0 + \gamma Y_{l,m+2}\xi_{-1} $$

محاسبه کنید.

(د) رابطه‌های میان α، β و γ را با استفاده از معادلهٔ زیر تعیین کنید

$$ \mathbf{J}^2\Psi_{j,m} = \hbar^2 j(j+1)\Psi_{j,m} $$

✓ **۱۵-۲** مانستهٔ ۱۵-۴۷ را برای دو ذره با اسپین ۱، که از ترکیب آنها حالتهای اسپین ۲، ۱ و ۰

به‌دست می‌آیند، محاسبه کنید. از نمادهای $\xi_{1}^{(i)}$، $\xi_{0}^{(i)}$ و $\xi_{-1}^{(i)}$ برای بردارهای اسپین تک‌ذره‌ای استفاده کنید.

۱۵ـ۳ دوترون دارای اسپین ۱ است. حالتهای ممکن اسپین و تکانهٔ زاویه‌ای کل دو دوترون را در یک حالت تکانهٔ زاویه‌ای اختیاری L به‌دست آورید. قواعد متقارن‌سازی را فراموش نکنید.

۱۵ـ۴ ذره‌ای با اسپین ۱ در پتانسیل مرکزی زیر حرکت می‌کند

$$V(r) = V_{۱}(r) + \frac{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}}{\hbar^{۲}}V_{۲}(r) + \frac{(\mathbf{S}\cdot\mathbf{L})^{۲}}{\hbar^{۴}}V_{۳}(r)$$

مقادیر $V(r)$ را در حالتهای $J = L - ۱$ و L و $L + ۱$ به‌دست آورید.

۱۵ـ۵ بحث تعیین پاریتهٔ π^- را در نظر بگیرید. فرض کنید π^- اسپین ۱ دارد اما باز هم در واکنش

$$\pi^- + d \to ۲n$$

در یک حالت مداری $L = ۰$ گیر می‌افتد. حالتهای ممکن دو نوترون را به‌دست آورید. اگر پاریتهٔ π^- منفی باشد چه حالتهایی مجاز هستند؟

۱۵ـ۶ فرض کنید π^- اسپین ۰ و پاریتهٔ منفی دارد اما در واکنش

$$\pi^- + d \to ۲n$$

از مدار P گیر می‌افتد. نشان دهید که این دو نوترون باید در حالت تکتایی باشند.

۱۵ـ۷ هامیلتونی یک دستگاه اسپین‌دار عبارت است از

$$H = A + \frac{B\mathbf{S}_{۱}\cdot\mathbf{S}_{۲}}{\hbar^{۲}} + \frac{C(S_{۱z} + S_{۲z})}{\hbar}$$

ویژه‌مقدارها و ویژه‌تابعهای دستگاه دوذره‌ای را به‌دست آورید اگر (الف) هر دو ذره اسپین ۱/۲ داشته باشند؛ (ب) یکی از ذرات اسپین ۱/۲ و دیگری اسپین ۱ داشته باشد. در قسمت (الف) فرض کنید دو ذره یکسان هستند.

۱۵ـ۸ دو ذره با اسپین ۱/۲ را در نظر بگیرید؛ اسپینهای این دو ذره با عملگرهای پاؤلی $\boldsymbol{\sigma}_{۱}$ و $\boldsymbol{\sigma}_{۲}$ توصیف می‌شوند. $\hat{\mathrm{e}}$ را بردار واحد راستایی بگیرید که دو ذره را به هم وصل می‌کند و عملگر زیر را تعریف کنید

$$S_{۱۲} = ۳(\boldsymbol{\sigma}_{۱}\cdot\hat{\mathrm{e}})(\boldsymbol{\sigma}_{۱}\cdot\hat{\mathrm{e}}) - \boldsymbol{\sigma}_{۱}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{۲}$$

نشان دهید اگر این دو ذره در حالت $S = ۰$ (تکتایی) باشند آنگاه

$$S_{۱۲} X_{\text{تکتایی}} = ۰$$

برای حالت سه‌تایی داریم

$$(S_{۱۲} - ۲)(S_{۱۲} + ۴) X_{\text{سه‌تایی}} = ۰$$

[راهنمایی: $\hat{\mathbf{e}}$ را در راستای z بگیرید.]

۱۵ـ۹ در یک دستگاه نوترون–پروتون کم‌انرژی (که دارای تکانهٔ زاویه‌ای مداری صفر است) انرژی پتانسیل با رابطهٔ زیر داده می‌شود

$$V(r) = V_۱(r) + V_۲(r) \left(۳\frac{(\boldsymbol{\sigma}_۱ \cdot \mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}_۲ \cdot \mathbf{r})}{r^۲} - \boldsymbol{\sigma}_۱ \cdot \boldsymbol{\sigma}_۲ \right) + V_۳(r) \boldsymbol{\sigma}_۱ \cdot \boldsymbol{\sigma}_۲$$

که در آن $\mathbf{r}$ برداری است که دو ذره را به هم متصل می‌کند. انرژی پتانسیل این دستگاه پروتون–نوترون را در حالتهای زیر محاسبه کنید.

(الف) در حالت تکتایی اسپین.

(ب) در حالت سه‌تایی.

✓ **۱۵ـ۱۰** دو الکترون را در حالت تکتایی اسپین در نظر بگیرید.

الف) اگر اندازه‌گیری اسپین یکی از الکترونها نشان دهد که این الکترون در حالتی با $s_z = ۱/۲$ است، احتمال این را تعیین کنید که اندازه‌گیری مؤلفهٔ z اسپین الکترون دیگر مقدار $s_z = ۱/۲$ را به‌دست دهد.

(ب) اگر اندازه‌گیری اسپین یکی از الکترونها نشان دهد که این الکترون در حالتی با $s_y = ۱/۲$ است، احتمال اینکه از اندازه‌گیری مؤلفهٔ x اسپین مقدار $s_x = -۱/۲$ برای الکترون دوم به‌دست آید چقدر است؟

(ج) اگر الکترون (۱) در حالتی باشد که با $\cos\alpha_۱ \chi_+ + \sin\alpha_۱ e^{i\beta_۱}\chi_-$ و الکترون (۲) در حالتی باشد که با $\cos\alpha_۲ \chi_+ + \sin\alpha_۲ e^{i\beta_۲}\chi_-$ توصیف می‌شود، احتمال این را به‌دست آورید که حالت دو الکترون یک حالت سه‌تایی باشد.

مراجع

مطالب این فصل، با روشهای مختلفی، در تمام کتابهای درسی مکانیک کوانتومی بیان می‌شوند. بسیاری از جزئیات را می‌توان درکتاب زیر یافت

M E Rose, *Elementary Theory of Angular Momentum*, John Wiley & Sons, New York, 1957.

۱۶

نظریهٔ اختلال مستقل از زمان

نظریهٔ اختلال برای حالتهای ناواگن

تعداد پتانسیلهای $V(r)$ که برای آنها معادلهٔ شرودینگر حل دقیق دارد اندک است، و بیشتر آنها را قبلاً بررسی کردیم. بنابراین، برای معادله‌هایی که حل دقیق ندارند باید از روشهای تقریبی برای تعیین ویژه‌مقدارها و ویژه‌تابعها استفاده کنیم. در این فصل به بررسی نظریهٔ اختلال می‌پردازیم.

فرض می‌کنیم ویژه‌مقدارها و مجموعهٔ کامل ویژه‌تابعهای بهنجارشدهٔ هامیلتونی $H_\circ$ را داریم:

$$H_\circ \phi_n = E_n^\circ \phi_n \qquad (۱\_۱۶)$$

و می‌خواهیم ویژه‌مقدارها و ویژه‌تابعهای هامیلتونی زیر را به‌دست آوریم

$$H = H_\circ + \lambda H_\backslash \qquad (۲\_۱۶)$$

یعنی می‌خواهیم، معادلهٔ ویژه‌مقداری زیر را حل کنیم

$$(H_\circ + \lambda H_\backslash)\psi_n = E_n \psi_n \qquad (۳\_۱۶)$$

کمیتهای مطلوب را به‌صورت رشته‌های توانی برحسب λ بیان می‌کنیم. مسئلهٔ همگرایی این رشته‌ها را بررسی نمی‌کنیم. اغلب این رشته‌ها نمی‌توانند همگرا باشند، اما باز هم چند جملهٔ اول آنها، وقتی λ کوچک است، دستگاه فیزیکی را به‌خوبی توصیف می‌کنند. فرض می‌کنیم اگر $\lambda \to 0$، آنگاه $E_n \to E_n^{(0)}$ و $\psi_n \to \phi_n$.

چون ϕ_iها یک مجموعهٔ کامل تشکیل می‌دهند، می‌توان ψ_n را برحسب آنها بسط داد. می‌نویسیم

$$\psi_n = N(\lambda)\left\{\phi_n + \sum_{k\neq n} C_{nk}(\lambda)\phi_k\right\} \tag{۴\_۱۶}$$

ضریب $N(\lambda)$ برای بهنجارکردن ψ_n است. در انتخاب فاز ψ_n آزادیم، و آن‌را به‌گونه‌ای انتخاب می‌کنیم که ضریب ϕ_n در بسط بالا حقیقی و مثبت باشد. چون وقتی $\lambda \to 0$ می‌خواهیم $\psi_n \to \phi_n$، باید

$$\begin{aligned} N(0) &= 1 \\ C_{nk}(0) &= 0 \end{aligned} \tag{۵\_۱۶}$$

به‌طورکلی داریم

$$C_{nk}(\lambda) = \lambda C_{nk}^{(1)} + \lambda^2 C_{nk}^{(2)} + \cdots \tag{۶\_۱۶}$$

و

$$E_n = E_n^{0} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots \tag{۷\_۱۶}$$

بنابراین، معادلهٔ شرودینگر به‌صورت زیر در می‌آید

$$\begin{aligned} &(H_0 + \lambda H_1)\left\{\phi_n + \sum_{k\neq n} \lambda C_{nk}^{(1)}\phi_k + \sum_{k\neq n} \lambda^2 C_{nk}^{(2)}\phi_k + \cdots\right\} \\ &= (E_n^{0} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots)\left\{\phi_n + \sum_{k\neq n} \lambda C_{nk}^{(1)}\phi_k + \sum_{k\neq n} \lambda^2 C_{nk}^{(2)}\phi_k + \cdots\right\} \end{aligned} \tag{۸\_۱۶}$$

توجه کنید که ضریب بهنجارش $N(\lambda)$ در این معادلهٔ خطی ظاهر نمی‌شود. با مساوی قرار دادن ضرایب مربوط به توانهای یکسان λ در دو طرف، یک رشته معادله به‌دست می‌آوریم. اولین معادله عبارت است از

$$H_0 \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}\phi_k + H_1\phi_n = E_n^0 \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}\phi_k + E_n^{(1)}\phi_n \tag{۱۶-۹}$$

با استفاده از $H_0\,\phi_k = E_k^0\,\phi_k$ به‌دست می‌آوریم

$$E_n^{(1)}\phi_n = H_1\phi_n + \sum_{k\neq n} (E_k^0 - E_n^0)C_{nk}^{(1)}\phi_k \tag{۱۶-۱۰}$$

که اگر آن‌را در ϕ_n ضرب نرده‌ای کنیم، با توجه به شرط راست‌هنجاری

$$\langle\phi_k|\phi_l\rangle = \delta_{kl} \tag{۱۶-۱۱}$$

به نتیجهٔ زیر می‌رسیم

$$\lambda E_n^{(1)} = \langle\phi_n|\lambda H_1|\phi_n\rangle \tag{۱۶-۱۲}$$

این فرمول بسیار مهم است، و نشان می‌دهد که جابه‌جایی انرژی مرتبهٔ اول برای یک حالت معین همان مقدار انتظاری پتانسیل اختلالی در آن حالت است. اگر تغییر پتانسیل دارای علامت معینی باشد، جابه‌جایی انرژی نیز همان علامت را خواهد داشت. صورت صریح

$$\lambda E_n^{(1)} = \int d^3r\ \phi_n^*(\mathbf{r})\ \lambda H_1(\mathbf{r})\ \phi_n(\mathbf{r}) \tag{۱۶-۱۳}$$

نشان می‌دهد برای اینکه این جابه‌جایی قابل‌ملاحظه باشد باید هم تغییر پتانسیل و هم چگالی احتمال $|\phi_n(\mathbf{r})|^2$ بزرگ باشند.

اگر ϕ_m را، با $m\neq n$، در ۱۶ـ۱۰ ضرب نرده‌ای کنیم به‌دست می‌آوریم

$$\langle\phi_m|H_1|\phi_n\rangle + (E_m^0 - E_n^0)D_{nm}^{(1)} = 0$$

یعنی

$$\lambda C_{nk}^{(1)} = \frac{\langle\phi_k|\lambda H_1|\phi_n\rangle}{E_n^0 - E_k^0} \tag{۱۶-۱۴}$$

صورت کسر عنصر ماتریس $H_\circ$ در پایه‌ای است که در آن $H_\circ$ قطری است. این فرمول در معادلهٔ زیر به‌کار می‌رود، که از تساوی جمله‌های متناسب با $\lambda^{۲}$ به‌دست می‌آید:

$$H_\circ \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(۲)}\phi_k + H_۱ \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(۱)}\phi_k = E_n^\circ \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(۲)}\phi_k + E_n^{(۱)} \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(۱)}\phi_k + E_n^{(۲)}\phi_n \qquad (۱۵\_۱۶)$$

از ضرب نرده‌ای در ϕ_n داریم

$$E_n^{(۲)} = \sum_{k\neq n} \langle\phi_n|H_۱|\phi_k\rangle C_{nk}^{(۱)} = \sum_{k\neq n} \frac{\langle\phi_n|H_۱|\phi_k\rangle\langle\phi_k|H_۱|\phi_n\rangle}{E_n^\circ - E_k^\circ} = \sum_{k\neq n} \frac{|\langle\phi_k|H_۱|\phi_n\rangle|^۲}{E_n^\circ - E_k^\circ} \qquad (۱۶\_۱۶)$$

در سطر آخر از هرمیتی بودن $H_۱$ استفاده کرده‌ایم:

$$\langle\phi_n|H_۱|\phi_k\rangle = \langle\phi_k|H_۱|\phi_n\rangle^* \qquad (۱۷\_۱۶)$$

فرمول ۱۶_۱۶ نیز بسیار مهم است، مخصوصاً از این لحاظ که جابه‌جایی مرتبهٔ اول غالباً به دلیل تقارن صفر می‌شود. این فرمول را می‌توان به‌صورت زیر تعبیر کرد: جابه‌جایی انرژی مرتبهٔ دوم برابر است با مجموع جمله‌هایی که بزرگی آنها با مجذور قدرمطلق عنصر ماتریسی داده می‌شود که حالت معین ϕ_n را توسط پتانسیل اختلالی به تمام حالتهای دیگر مربوط می‌کند، و با معکوس اختلاف انرژی بین حالتها موزون شده است. از این فرمول می‌توان نتایج زیر را به‌دست آورد:

(الف) اگر ϕ_n حالت پایه، یعنی حالت کمترین انرژی، باشد آنگاه مخرج کسر همیشه منفی است، و در نتیجه ۱۶_۱۶ همیشه منفی است.

(ب) اگر تمام چیزهای دیگر یکسان باشند، یعنی اگر تمام عناصر ماتریس $H_۱$ تقریباً از یک مرتبهٔ بزرگی باشند (که می‌توان بدون آگاهی خاص بیشتری حدس زد) آنگاه ترازهای نزدیک تأثیر زیادتری بر جابه‌جایی انرژی مرتبهٔ دوم نسبت به ترازهای دور دارند.

(ج) اگر یک تراز مهم "k" ــمهم از این نظر که در نزدیکی قرار دارد، یا اینکه $\langle\phi_k|H_۱|\phi_n\rangle$ بزرگ استــ بالای تراز معین "n" قرار داشته باشد آنگاه جابه‌جایی مرتبهٔ دوم به طرف پایین است، و اگر پایینتر باشد جابه‌جایی به‌طرف بالا است. در این مورد می‌گوییم ترازها می‌خواهند یکدیگر را دفع کنند.

رابطهٔ $C_{nk}^{(2)}$ را می‌توان از ۱۵_۱۶ به‌دست آورد، اما نیازی به این فرمول نداریم. همچنین می‌توان $N(\lambda)$ را از رابطهٔ زیر تعیین کرد

$$\begin{aligned}\langle\psi_n|\psi_n\rangle &= N^2(\lambda)\left\{1+\lambda^2\sum_{k\neq n}|C_{nk}^{(1)}|^2+\cdots\right\} \\ &= 1\end{aligned} \qquad (۱۸\_۱۶)$$

که نشان می‌دهد $N(\lambda)$ تا مرتبهٔ اول λ برابر با ۱ است. بنابراین، تا مرتبهٔ اول λ، می‌توان نوشت

$$\psi_n=\phi_n+\sum_{k\neq n}\frac{\langle\phi_k|\lambda H_1|\phi_n\rangle}{E_n^\circ-D_k^\circ}\phi_k \qquad (۱۹\_۱۶)$$

این فرمول گاهی به‌کار می‌آید.

نظریهٔ اختلال واگن

اگر واگنی وجود داشته باشد باید تغییراتی در بررسی قبلی وارد کنیم، زیرا برحسب ظاهر، اختلاف انرژی در مخرج کسرها می‌تواند صفر شود. مشکل به‌این واقعیت مربوط است که به‌جای تنها یک ϕ_n چندین $\phi_n^{(i)}$ وجود دارند که همهٔ آنها دارای انرژی یکسان $E_n^{(\circ)}$ هستند. این ویژه‌تابعها را می‌توان نسبت به نشان i راست‌هنجار کرد، زیرا چنانکه در فصل ۴ دیدیم این نشان i می‌تواند به ویژه‌مقدارهای عملگرهای هرمیتی دیگری، که به‌طور همزمان جابه‌جاشونده هستند، وابسته باشد. بنابراین، مجموعهٔ $\phi_n^{(i)}$ را به‌گونه‌ای انتخاب می‌کنیم که

$$\langle\phi_m^{(j)}|\phi_n^{(i)}\rangle=\delta_{mn}\delta_{ij} \qquad (۲۰\_۱۶)$$

روش بدیهی برای به‌حساب آوردن واگنی این است که به‌جای ۱۶_۴ رابطه‌ای بگذاریم که در آن ترکیبهای خطی ویژه‌تابعهای واگن $H_\circ$ وارد می‌شوند:

$$\psi_n=N(\lambda)\left\{\sum_i\alpha_i\phi_n^{(i)}+\lambda\sum_{k\neq n}C_{nk}^{(1)}\sum_i\beta_i\phi_k^{(i)}+\cdots\right\} \qquad (۲۱\_۱۶)$$