درس ششم: یافتن طیف انرژی برای چند پتانسیل ساده

۱ مقدمه

دراین درس می خواهیم طیف انرژی یک ذره را که در پتانسیل ساده ای قرار دارد تعیین کنیم. اغلب مسایلی که حل می کنیم یک بعدی اند و به نظر خیلی ساده به نظر می رسند، آنقدر ساده که به نظر نمی رسد هیچ مسئله واقعی را بتوان با آنها بررسی کرد. ولی این دریافت درست نیست زیرا خصلت های اصلی بسیاری از مسایل واقعی را درهمین مثال های ساده می توان دید. مسئله‌اصلی ای که درمکانیک کوانتومی با آن روبرو هستیم آن است که طیف انرژی هامیلتونی یک سیستم را پیدا کنیم. این سیستم می تواند بسیارساده مثل یک ذره در یک چاه پتانسیل یک بعدی و یا یک نوسانگر هارمونیک یک بعدی باشد ویا یک سیستم بس ذره‌ای بسیار پیچیده مثل یک جامد. چرا یافتن طیف انرژی تا این اندازه مهم است ؟ نخستین دلیل اش آن است که اگر یک سیستم را به حال خود رها کنیم این سیستم در حالت پایه یعنی حالتی که کمترین انرژی را دارد قرار خواهد داشت، بنابراین دانست حالت پایه یک سیستم اهمیت بسیار دارد. در دمای غیرصفر یک سیستم با احتمال $P=\frac{1}{Z}e^{-\beta E}$ که درآن Z یک ثابت است در حالتی با انرژی E قرار می گیرد. و بالاخره هر گاه ویژه حالت های انرژی را تعیین کنیم آنگاه می توانیم دینامیک سیستم را در طول زمان به طور کامل تعیین کنیم. بنابراین نخستین مسئله ای که با آن روبرو هستیم آن است که طیف انرژی هامیلتونی را پیدا کنیم، که به معنای حل مسئله ویژه مقداری زیراست:

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle. \tag{1}$$

برای یک ذره که در یک بعد و تحت پتانسیل $V(X)$ حرکت می کند این معادله به شکل زیراست:

$$\left(\frac{P^2}{2m}+V(X)\right)|\psi\rangle = E|\psi\rangle. \tag{2}$$

هرگاه این رابطه را در پایه مختصات تصویر کنیم به شکل زیر در می آید:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial_x^2}\psi(x)+V(x)\psi(x) = E\psi(x). \tag{3}$$

دراین حالت E را انرژی یا تراز انرژی و $\psi(x)$ را ویژه تابع می گویند. گاهی اوقات به این معادله معادله شرودینگرِ مستقل از زمان نیز می گویند اگر چه این نامگذاریِ خوبی نیست. ماهم دراین درس از این معادله با نام معادله شرودینگر یاد می کنیم.

۲ چاه پتانسیل یک بعدی با عمق بی نهایت

ساده ترین مسئله‌ای که می توانیم معادله شرودینگر را برای آن حل کنیم، چاه پتانسیل یک بعدی با عمق بی نهایت است. شکل پتانسیل عبارت است از:

$$V(x) = \begin{cases} \infty x \leq 0, & \\ 0 & 0 \leq x \leq L, \\ \infty & L \leq x \end{cases} \tag{4}$$

بنابراین ذره در ناحیه‌ی $[0, L]$ کاملاً آزاد است ولی در نقاط 0 و L یعنی در دیواره های پتانسیل با یک نیروی بی نهایت مواجه شده و برمی گردد. احتمال وجود ذره در بیرون از پتانسیل برابر باصفراست. برای حل معادله شرودینگر کافی است که در ناحیه‌ی $[0, L]$ معادله شرودینگر را حل کنیم. دراین ناحیه داریم

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x). \tag{5}$$

با تعریفِ

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \longrightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{6}$$

این معادله به شکل زیر درمی آید

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2\psi(x), \tag{7}$$

که حل عمومی آن به شکل زیراست

$$\psi(x) = A\cos kx + B\sin kx. \tag{8}$$

اما می دانیم که تابع موج می بایست در دیواره ها برابر با صفر باشد و این تنها وقتی امکان پذیراست که داشته باشیم

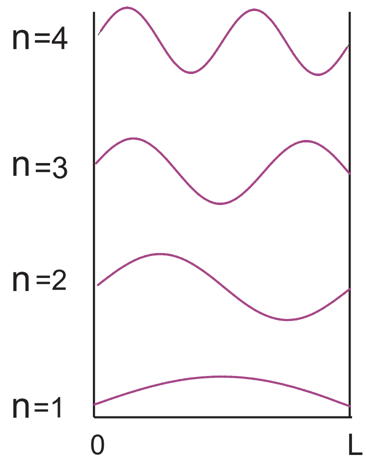
$$A = 0, \qquad kL = n\pi. \tag{9}$$

بنابراین تراز های انرژی و ویژه توابع مربوط به آنها عبارت خواهند بود از:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \; n^2\pi^2}{2mL^2}, \tag{10}$$

و

$$\psi_n(x) = A\sin\frac{n\pi}{L}x, \tag{11}$$



شکل ۱: چند تابع موج اولیه (حالت پایه و چند حالت برانگیخته) در چاه پتانسیل بی نهایت عمیق یک بعدی. فاصله سطوح انرژی به مقیاس رسم نشده‌است.

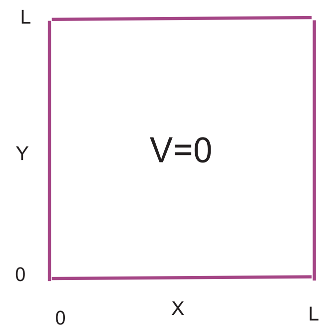
که درآن A یک ثابت است که توسط بهنجارش تابع موج تعیین می شود. شکل ۱ چند تابع موج اولیه را نشان می دهد.

چاه پتانسیل یک بعدی بیشتر ارزش آموزشی دارد. تعمیم این پتانسیل به دو بعد و سه بعد جالب تر است زیرا موقعیت های واقعی تری را می توان باتقریب خوب توسط آنها نشان داد. در فصل بعد معادله شرودینگر را برای چاه پتانسیل دوبعدی حل می کنیم.

۳ چاه پتانسیل مربعی

ذره‌ای را در نظر بگیرید که توسط یک پتانسیل جاذبه بسیارقوی در جایی گیر افتاده است و نمی تواند از آن ناحیه فرار کند. در بعضی از موارد شکل پتانسیل چنان است که ذره درون این ناحیه تقریباً احساس آزادی می کند مثل این که نیرویی به آن وارد نمی شود. به عنوان مثال با ساده سازی بسیار زیاد می توان گفت که در هسته های سنگین هستک ها یعنی پروتون و نوترون هایی که باهم جفت می شوند و تشکیل یک هسته‌ی آلفا می دهند چنین وضعی دارند. مثال دیگری از این دست الکترونی است که در یک فلز قرار دارد و درون فلز تقریباً آزاد است و فقط نمی تواند از سطح فلز بیرون بیایند. به عنوان اولین تقریب چنین پتانسیل هایی را به صورت یک چاه بی نهایت عمیق در نظر می گیریم که دیواره های آن مانع خروج ذره از چاه می شوند. حل کردن معادله شرودینگر برای چاه های بی نهایت عمیق یک بعدی و یا چاه های بی نهایت عمیق مربعی و مکعبی در بعد دلخواه آسان است. این کاری است که در این بخش انجام می دهیم. حل مسئله چاه پتانسیل برای وقتی که چاه شکل دایره ای یا کروی دارد زحمت بیشتری دارد. این کار را در درس های آینده انجام می دهیم.

چاه پتانسیل مربعی با عمق بی نهایت را درنظرمی گیریم. ابعاد چاه را در هردو راستا برابر با L می گیریم. دردرون چاه ذره درمعادله شرودینگر آزاد با پتانسیل $V = 0$ صدق می کند و تابع موج دردیواره ها می بایست برابر باصفرباشد، شکل ۲.



شکل ۲: چاه پتانسیل مربعی.

بنابراین دردرون چاه معادله زیربرقراراست:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial_x{}^2}+\frac{\partial^2}{\partial_y{}^2})\psi(x,y)=E\psi(x,y). \tag{12}$$

با تعریفِ $k^2 := \frac{2mE}{\hbar^2}$ این معادله به شکل زیردرمی آید:

$$(\partial_x^2+\partial_y^2)\psi(x,y)=-k^2\psi(x,y), \tag{13}$$

که درآن $\partial_x := \frac{\partial}{\partial_x}$ و $\partial_y := \frac{\partial}{\partial_y}$.
می توان به روش جداکردن متغیرها معادله فوق را حل کرد. قرارمی دهیم

$$\psi(x,y)=\phi(x)\chi(y) \tag{14}$$

وباجایگذاری آن درمعادله شرودینگر و تقسیم طرفین بر $\phi(x)\chi(y)$ به رابطه زیرمی رسیم

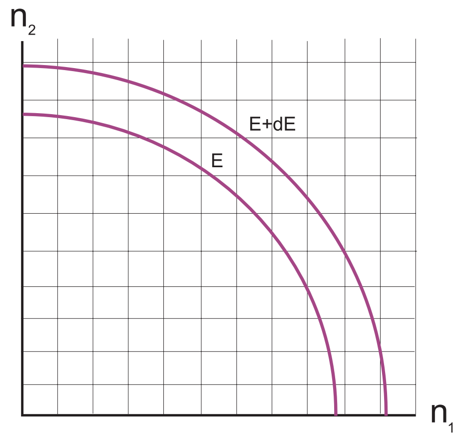
$$\frac{\phi''(x)}{\phi(x)}+\frac{\chi(y)''}{\chi(y)}=-k^2. \tag{15}$$

این معادله الزام می کند که $\frac{\phi''(x)}{\phi(x)}$ و $\frac{\chi''(y)}{\chi(y)}$ هردو ثابت باشند. بنابراین

$$\phi''(x)=-k_x^2\phi(x), \qquad \chi''(y)=-k_y^2\chi(y), \qquad k^2=k_x^2+k_y^2. \tag{16}$$

شرایط مرزی آن است که تابع موج دردیواره های پتانسیل برابرباصفرباشد. بنابراین حل این معادلات عبارت خواهند بوداز:

$$\phi(x)=A\sin k_x x, \qquad \chi(y)=B\sin k_y y, \qquad k_xL=n_1\phi, \quad k_yL=n_2\pi. \tag{17}$$



شکل ۳: تعداد حالت هایی که انرژی آنها بین E و $E+dE$ است، به تعداد نقاطی است که بین دو ربع دایره قراردارند.

درنتیجه ویژه تابع موج بهنجارعبارت خواهد بوداز:

$$\psi(x,y)=\frac{2}{L}\sin\frac{n_1\pi}{L}x\sin\frac{n_2\pi}{L}y, \tag{18}$$

باانرژی

$$E_{n_1,n_2}=\frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2+k_y^2)=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{L^2}(n_1^2+n_2^2)$$

. بنابراین هرتراز انرژی با دوعدد کوانتومی $0<n_1,\ \ n_2$ مشخص می شود. می توانیم دریک دیاگرام دوبعدی به ازای هر جفت عدد کوانتومی (n_1,n_2) یک نقطه با مختصات صحیح در یک دیاگرام دوبعدی رسم کنیم.
حال تمام نقاطی که دریک ربع دایره بامعادله

$$n_1^2+n_2^2=\frac{2mEL^2}{\pi^2\hbar^2}$$

قراردارند تقریباً یک انرژی دارند. شعاع این دایره برابراست با $R=\frac{L}{\pi\hbar}\sqrt{2mE}$. می گوییم تقریباً زیرا همه نقاط روی این ربع دایره مختصات صحیح ندارند. امابرای انرژی های زیاد می توان باتقریب خوبی تعداد نقاطی را که بین دو ربع دایره مربوط به انرژی های E و $E+\Delta E$ وجود دارند بدست آورد، شکل ۳.

ازآنجا که برای هر مربع کوچک یک نقطه وجود دارد تعداد نقاط برابراست با تفاوت مساحت های دو ربع دایره . بنابراین

$$dn=\frac{1}{4}d(\pi R^2)=\frac{1}{4}2\pi RdR=\frac{1}{4}2\pi R\frac{dR}{dE}dE=(\frac{L}{\pi\hbar})^2mdE. \tag{19}$$

به این ترتیب تابعی بدست می آوریم که به آن چگالی حالات می گوییم. این تابع که آن را معمولاً با $g(E)$ نشان می دهیم به مامی گوید که درهربازه انرژی چه تعداد حالت وجود دارد. برای چاه پتانسیل مربعی دو بعدی داریم

$$dn = g_2(E)dE, \qquad g_2(E) = \frac{\pi}{4}(\frac{L}{\pi\hbar})^2(2m)^{\frac{2}{2}}. \tag{20}$$

برای چاه پتانسیل سه بعدی ویژه حالت های انرژی سه عدد کوانتومی دارند و انرژی هرحالت برابراست با

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{L^2}(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2), \qquad 0 \ < n_1,\ n_2,\ n_3 \tag{21}$$

دراین جا حالت های هم انرژی روی یک هشتم ازکره ای قرارگرفته اند که شعاع آن بازهم برابراست با $R = \frac{L}{\pi\hbar}\sqrt{2mE}$. امااین بار چگالی حالت ها از رابطه زیربدست می آید:

$$dn = \frac{1}{8}d(\frac{4}{3}\pi R^3) = (\frac{\pi R^2}{2}\frac{dR}{dE})dE. \tag{22}$$

درنتیجه برای چاه مکعبی سه بعدی خواهیم داشت

$$g_3(E) = \frac{\pi}{4}(\frac{L}{\pi\hbar})^3(2m)^{\frac{3}{2}}E^{\frac{1}{2}}. \tag{23}$$

به همین ترتیب می توان چاه پتانسیل را در d بعد حل کرد. خواننده را تشویق می کنیم که محاسبه مربوط به چگالی حالت ها را برای d بعد انجام دهد.

۴ قضایای کلی درباره پتانسیل های یک بعدی

تا کنون پتانسیل های بسیار ساده را بررسی کردیم. پتانسیل هایی که می توان معادله شرودینگر را برای آنها به طور دقیق حل کرد بسیار کمیاب اند. این امر حتی برای پتانسیل های یک بعدی نیز صادق است. با این وجود خوب است که بعضی خصلت های عمومی معادله شرودینگر را بررسی کنیم. این خصلت ها را در قضایایی که در این بخش آورده‌ایم بیان می کنیم.

قضیه ۱ : هرگاه پتانسیل زوج باشد یعنی $V(x) = V(-x)$ آنگاه ویژه حالت های انرژی را می توان باپاریته مشخص گرفت یعنی می توان ویژه حالت ها را طوری گرفت که یا زوج باشند یا فرد.

اثبات: برای پتانسیل زوج براحتی دیده می شود که اگر $\psi(x)$ یک ویژه حالت باانرژی E باشد، آنگاه $\psi(-x)$ نیز یک ویژه حالت باانرژی E است. بنابراین همواره می توان ویژه حالت را به صورت $\psi_e(x) = \psi(x) + \psi(-x)$ ویا

$\psi_o(x) = \psi(x) - \psi(-x)$ گرفت که اولی زوج و دومی فرداست.

قضیه ۲: هرگاه پتانسیل حقیقی باشد آنگاه ویژه حالت های انرژی را می توان حقیقی گرفت.

اثبات: برای پتانسیل حقیقی براحتی دیده می شود که اگر ψ یک ویژه حالت باانرژی E باشد، آنگاه ψ^* نیز یک ویژه حالت باانرژی E است. بنابراین همواره می توان ویژه حالت را به صورت $\psi + \psi^*$ یا $i(\psi - \psi^*)$ گرفت که هردو حقیقی اند.

قضیه ۳: ویژه حالت های انرژی دریک بعد واگنی ندارند.

اثبات: فرض کنید که ψ_1 و ψ_2 دوویژه حالت انرژی متناظر با انرژی E باشند. دراین صورت

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_1 + V(x)\psi_1 = E\psi_1 \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_2 + V(x)\psi_2 = E\psi_2. \end{aligned} \tag{24}$$

با ضرب کردن اولین معادله در ψ_2 و دومین معادله در ψ_1 و کم کردن دومعادله از هم بدست می آوریم:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi_2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_1 - \psi_1\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_2) = 0, \tag{25}$$

و یا

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi_2\frac{\partial}{\partial x}\psi_1 - \psi_1\frac{\partial}{\partial x}\psi_2\right) = 0, \tag{26}$$

که ازآن نتیجه می گیریم

$$\psi_2\frac{\partial}{\partial x}\psi_1 - \psi_1\frac{\partial}{\partial x}\psi_2 = Const. \tag{27}$$

با درنظرگرفتن حد $x \longrightarrow \infty$ می فهمیم که مقدار ثابت برابراست با صفر. درنتیجه

$$\psi_1\frac{d}{dx}\psi_1 - \psi_1\frac{d}{dx}\psi_2 = 0. \tag{28}$$

مااین رابطه آخر به این معناست که ψ_1 و ψ_2 باهم متناسبند وبنابراین هیچ نوع واگنی وجود ندارد.

نتیجه‌یک: درقضیه ۱ ثابت کردیم که برای یک پتانسیل حقیقی می توان ویژه توابع را حقیقی گرفت. حال بااستفاده از قضیه ۳ نشان می دهیم که دریک بعد این ویژه توابع منهای یک فازسرتاسری حتماً حقیقی هستند. برای این منظور فرض کنید که $\psi(x)=\alpha(x)+i\beta(x)$ یک ویژه تابع باشد. دراین صورت برای پتانسیل حقیقی $\psi^*(x)=\alpha(x)-i\beta(x)$، نیز یک ویژه تابع با همان انرژی است. بنابراین نتیجه می گیریم که $\alpha=\frac{1}{2}(\psi(x)+\psi^*(x))$ و هم چنین $\beta(x)=\frac{1}{2i}(\psi(x)-\psi^*(x))$ نیز ویژه تابع هایی باهمان انرژی هستند. اما چون دریک بعد واگنی نداریم پس باید این دو ویژه تابع با هم متناسب باشند یعنی $\beta=\kappa\alpha$. بدلیل اینکه هردو ویژه تابع α و β می بایست بهنجارباشند، ثابت κ می بایست برابربایکی ازمقادیرِ $0,\ \infty$ ویا ± 1 باشد. اما این امر به این معناست که‌یا یکی از توابع α و یا β برابر باصفراست ویااینکه $\psi(x)=\alpha(x)(1\pm i)$. درهر صورت تابع $\psi(x)$ چیزی نیست جزیک فاز عمومی دریک تابع حقیقی.

نتیجه دو: درقضیه ۲ ثابت کردیم که برای یک پتانسیل زوج می توان ویژه توابع را با پاریته مشخص گرفت یعنی ویژه توابع را می توان زوج و یا فرد گرفت. حال بااستفاده از قضیه ۳ نشان می دهیم که دریک بعد این ویژه توابع حتماً یا فرد هستند و یا زوج . برای این منظور فرض کنید که $\psi(x)$ یک ویژه تابع باشد. دراین صورت برای پتانسیل زوج $\psi(-x)$، نیز یک ویژه تابع با همان انرژی است. بنابراین نتیجه می گیریم که $\psi_e=\psi(x)+\psi(-x)$ و هم چنین $\psi_o(x)=\psi(x)-\psi(-x)$ نیز ویژه تابع هایی باهمان انرژی هستند. اما چون دریک بعد واگنی نداریم پس باید این دو ویژه تابع با هم متناسب باشند یعنی $\psi_e(x)=\kappa\psi_o(x)$. بدلیل اینکه هردو ویژه تابع ψ_e و ψ_o می بایست بهنجارباشند، ثابت κ می بایست برابربا یکی از مقادیر $0,\ \infty\ \pm 1$ باشد. درحالت اول $(\kappa=0,\ \infty)$ تابع یاحتماً فرداست و یا حتماً زوج. درحالت دوم نیز نتیجه می شود که تابع $\psi(x)$ یا $\psi(-x)$ متحد با صفرهستند که قابل قبول نیست.
بنابراین ثابت کرده ایم که ویژه توابع می بایست حتماً زوج و یافردباشند.

قضیه ۴: مقادیر ویژه انرژی همواره از مقدارمی نیمم پتانسیل بیشترند.

اثبات: فرض کنید که یک ویژه حالت انرژی باانرژی E وجود داشته باشد به قسمی که

$$H|\psi\rangle=E|\psi\rangle,\qquad E<V(x)\qquad \forall x. \tag{29}$$

دراین صورت باتوجه به اینکه $H=\frac{P^2}{2m}+V(X)$ می نویسیم:

$$\langle\psi|\frac{P^2}{2m}|\psi\rangle=\langle\psi|(H-V(X))|\psi\rangle=\int\psi^*(x)(E-V(x))\psi(x)dx<0, \tag{30}$$

وحال آنکه عملگر $\frac{P^2}{2m}$ یک عملگر مثبت است و مقدارمتوسط آن روی هیچ حالتی نمی بایست منفی باشد. بنابراین فرض 29 نمی تواند صحیح باشد.

قضیه ۵: اگر تابع پتانسیل متناهی باشد هم ویژه توابع انرژی وهم مشتقات آنها می بایست پیوسته باشند.

اثبات: معادله شرودینگرمستقل اززمان را درنظرمی گیریم.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi + V(x)\psi = E\psi. \tag{31}$$

نخست دقت می کنیم که تابع ψ نمی تواند دریک نقطه مثل x_0 شامل تابع دلتا باشد زیرادراین صورت بهنجارنخواهد بود. بنابراین تنها می تواند دراین نقطه یک ناپیوستگی متناهی داشته باشد به این شکل که $\psi(x_0+) - \psi(x_0-) = C$ که درآن C یک ثابت است. دراین صورت درنزدیکی نقطه x_0 خواهیم داشت

$$\frac{d}{dx}\psi(x) \equiv C\delta(x - x_0), \tag{32}$$

و درنتیجه درنزدیکی همان نقطه

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) \equiv C\frac{d}{dx}\delta(x - x_0). \tag{33}$$

چون در طرف راست معادله شرودینگر هم E و هم ψ محدود هستند، نتیجه می گیریم که چنین ناپیوستگی ای نمی تواند درتابع ψ وجود داشته باشد.
هم چنین مشتق تابع ψ نیز نمی تواند ناپیوسته باشد. زیرادراین صورت خواهیم داشت $\psi'(x_0+) - \psi'(x_0-) = C$ و ازآنجا

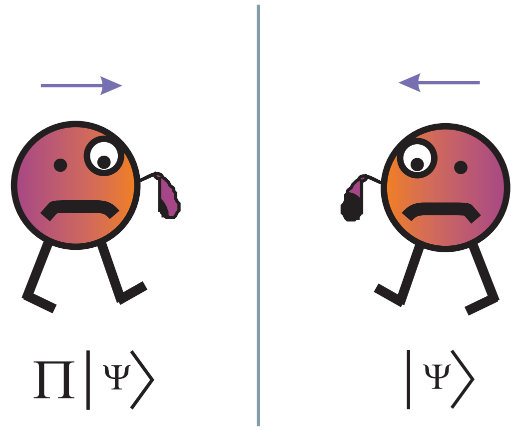
$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) \equiv C\delta(x - x_0) \tag{34}$$

وچنین جمله‌ای درطرف راست معادله شرودینگر وجود ندارد.

باید دقت کرد که اگر پتانسیل داری یک ناپیوستگی به صورت $V(x_0+) - V(x_0-) \propto \infty$ باشد آنگاه مشتق تابع موج می تواند یک ناپیوستگی به صورت

$$\psi'(x_0+) - \psi'(x_0-) = C \tag{35}$$

داشته باشد ولی خود تابع موج هم چنان می بایست پیوسته باشد زیرا ناپیوسته بودن تابع موج درطرف چپ معادله شرودینگر تولید مشتق تابع دلتای دیراک می کند که درطرف راست وجود ندارد.



شکل ۴: اثر عملگر پاریته روی حالتِ یک شئ همان اثری است که آینه روی شئ دارد. دقت کنید که جهت تکانه نیز عوض می شود.

۵ عملگرپاریته

می توان بامعرفی عملگرپاریته می توان قضیه ای را که در بخش پیشین دیدیم به شکل ظریف تری بیان کرد. عملگرپاریته را در یک بعد به شکل زیرتعریف تعریف می کنیم:

$$\Pi|x\rangle = |-x\rangle. \tag{36}$$

بنابراین تحت این عملگر هر شی به تصویرآینه ای خودش نگاشته می شود. ازتعریف فوق می توان نتیجه گرفت که این عملگر با عملگر مکان پادجابجامی شود یعنی

$$\Pi X + X\Pi = 0. \tag{37}$$

هم چنین باتوجه به اینکه $|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int e^{\frac{ixp}{\hbar}}|x\rangle$ می توان نتیجه گرفت

$$\Pi|p\rangle = |-p\rangle. \tag{38}$$

بنابراین عملگرپاریته نه تنها اشیا را به تصویر آینه ای آنها تبدیل می کند،بلکه جهت همه سرعت ها را نیز معکوس می کند یعنی همان چیزی که موقع نگاه کردن به تصویریک شی متحرک درآینه می بینیم. شکل ۴ اثر عملگر پاریته راروی یک حالت نشان می دهد.

به همان ترتیب می توان نتیجه گرفت که

$$\Pi P + P\Pi = 0. \tag{39}$$

ازتعریف این عملگرمی توان فهمید که $\Pi^2 = I$. درنتیجه ویژه مقدارهای آن عبارتند از ± 1. باتوجه به روابط 37 و 39 می توان نتیجه گرفت که برای هرپتانسیل $V(X)$ رابطه زیربرقراراست:

$$\Pi V(X)\Pi = V(-X). \tag{40}$$

بنابراین اگر پتانسیل زوج باشد آنگاه

$$[\Pi, H] = 0. \tag{41}$$

درنتیجه برای این پتانسیل ها می توان ویژه بردارهای مشترک H و Π را یافت. این امر به این معناست که اگر $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ آنگاه $\Pi|\psi\rangle = \pm|\psi\rangle$. برای این بردارها داریم

$$\langle x|\Pi|\psi\rangle = \pm\langle x|\psi\rangle \longrightarrow \langle -x|\psi\rangle = \pm\langle x|\psi\rangle, \tag{42}$$

ویا

$$\psi(-x) = \pm\psi(x), \tag{43}$$

که به این معناست که ویژه توابع هامیلتونی دارای پاریته مشخص هستند یعنی یا فرد هستند و یازوج.

مثل هرتقارن دیگری، تقارن پاریته اثر خود را بردینامیک نیز می گذراد. فرض کنید که تقارن پاریته داشته باشیم، یعنی $[H, \Pi] = 0$. دراین صورت عملگرتحول نیز با پاریته جابجاخواهد شد یعنی $[U(t), \Pi] = 0$. حال اگر حالت اولیه ای مثل $|\psi(0)\rangle$ داشته باشیم بعدازگذشت زمان t این حالت به حالتِ $|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle$ متحول خواهد شد. یعنی

$$|\psi(0)\rangle \longrightarrow U(t)|\psi(0)\rangle. \tag{44}$$

حالت $|\psi(0)\rangle$ را می توانید حالت آدمک سمت راست درشکل ۴ تصور کنید. حال سوال این است که اگر حالت اولیه بجای $|\psi(0)\rangle$، حالتِ $\Pi|\psi(0)\rangle$ باشد حالت نهایی چیست؟ دقت کنیم که حالتِ $\Pi|\psi(0)\rangle$ نشان دهنده تصویر آدمک نخست درآینه یعنی آدمک سمت چپ درشکل ۴ است. پاسخ این سوال این است که

$$\Pi|\psi(0)\rangle \longrightarrow U(t)\Pi|\psi(0)\rangle = \Pi U(t)|\psi(0)\rangle = \Pi|\psi(t)\rangle. \tag{45}$$

معنای این رابطه این است که هرکاری را که هرتحولی که برای آدمک قابل تصور باشد، برای تصویرآینه ای آن نیز قابل تصوراست. به عنوان مثال اگر آدمک به سمت راست برود، تصویرآن به سمت چپ خواهد رفت. به نظرمی رسد که همه اینها توضیح واضحات است. ولی چنین نیست زیرا مادرزندگی روزانه خود به این تقارن خو گرفته ایم و آن را بدیهی می پنداریم، ولی این تقارن بدیهی نیست.

۱.۵ نقض تقارن آینه ای :آیا دنیای ما نسبت به انعکاس در آینه متقارن است؟

آیابرهم کنش های بنیادی طبیعت تقارن پاریته دارند؟ اگر چنین باشد هرفرایندمیکروسکو پی را که درآزمایشگاه مشاهده کنیم می بایست تصویرآینه ای آن نیز قابل مشاهده و تصورباشد. اگرچه برهم کنش های گرانشی، الکترومغناطیسی و هسته ای قوی چنین تقارنی دارند ولی یکی از برهم کنش های بنیادی طبیعت به نام برهم کنش هسته ای ضعیف بدلیلی که نمی دانیم فاقد این تقارن است. این برهم کنش همان چیزی است که باعث واپاشی هسته هاازطریق واپاشی نوترون ها می شود. دراین واپاشی یک نوترون به یک پروتون و یک الکترون و یک پادنوتریتو واپاشیده می شود:

$$n \longrightarrow p^+ \ + \ e^- + \overline{\nu}. \tag{46}$$

این واپاشی باعث تبدیل یک هسته $^{Z}N^{A}$ به یک هسته $^{Z+1}N^{A}$ می شود. درآزمایشی که دردهه ۱۹۵۰ توسط Wu وهمکارانش انجام شد هسته های کبالت به نیکل واپاشیده می شند

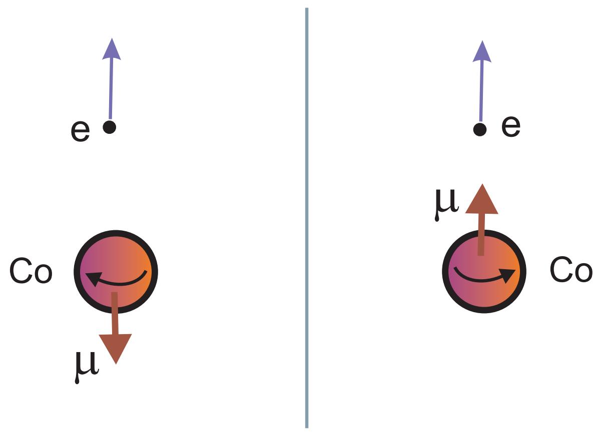
$$^{27}Co^{60} \longrightarrow ^{28} Ni^{60} + e^- + \overline{\nu}. \tag{47}$$

هسته های کبالت دارای گشتاورمغناطیسی ذاتی هستند که می توان با اعمال یک میدان مغناطیسی قوی و پایین آوردن دما به حد کافی آنها را با هم همراستاکرد. حال می توان پرسید که الکترون ها نسبت به این جهت تعریف شده درکدام جهت گسیل می شوند؟ آیا درهمان جهت ممان مغناطیسی واپاشیده می شوند ویا درخلاف جهت آن ویا اینکه کاملاً به طور متقارن درهردو جهت. درآزمایش Wu معلوم شد که الکترون ها درجهت ممان مغناطیسی گسیل می شوند. این نتیجه به نحو آشکاری نقض پاریته رانشان می دهد، زیرا هرگاه درآینه ی که به موازات ممان مغناطیسی قرارگرفته است به هسته های کبالت و الکترون های گسیل شده نگاه کنیم جهت ممان مغناطیسی کبالت را درخلاف جهت قبلی می بینیم ولی جهت گسیل الکترون ها را همان جهت قبلی می بینیم. شکل ۵.

اگر تقارن پاریته وجود می داشت می بایست تصویرآینه ای واپاشی کبالت نیز مشاهده می شد که درآن الکترونها درخلاف جهت ممان مغناطیسی کبالت ها گسیل می شدند. به عبارت دیگر می بایست دریک آزمایش واپاشی کبالت الکترونها درهردو جهت گسیل می شدند که چنین چیزی را آزمایش نشان نمی دهد. نقض تقارن پاریته دربرهم کنش های هسته ای ضعیف که اینقدر در زندگی روزمره به آن خو گرفته ایم و توسط همه برهم کنش های دیگر رعایت می شود یکی از مهمترین کشفیات فیزیک ذرات بنیادی بوده است.

۲.۵ پاریته در سه بعد

ممکن است خواننده سوال کند که چه ربطی بین تقارن آینه ای و تقارن تحت پاریته است؟ هم چنین ممکن است سوال کند چرا در شکل ۵ آنچنانکه از عمل پاریته انتظار داشتیم جهت تکانه الکترون ها را وارونه نکرده ایم. در پاسخ باید گفت که شکل ۵ و آزمایش مربوط به آن در واقع نقض تقارن آینه ای را نشان می دهند و تقارن آینه ای به پاریته مربوط است .



شکل ۵: واپاشی بتا برای هسته های کبالت. تصویر سمت راست آنچیزی است که درطبیعت مشاهده می شود. تصویرآینه ای آن هرگز دیده نشده است.

عملگر پاریته در سه بعد به شکل زیر تعریف می شود:

$$\Pi|\vec{r}\rangle = |-\vec{r}\rangle. \tag{48}$$

که از آن به همان شکل بالا می توان نتایج زیر را گرفت:

$$\Pi|\vec{p}\rangle = |-\vec{p}\rangle, \tag{49}$$

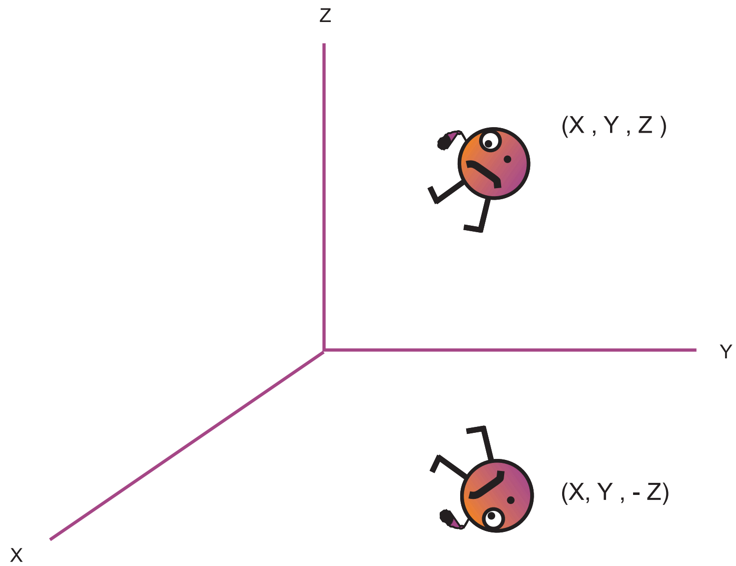
و

$$\Pi X_i + X_i \Pi = 0, \qquad \Pi P_i + P_i \Pi = 0, \qquad i = 1,\ 2,\ 3. \tag{50}$$

تصور عملگر پاریته و کاری که انجام می دهد در یک بعد آسان است ولی در سه بعد این کار چندان ساده نیست و ما به آن عادت نکرده ایم. اما می توان پاریته را به عملگر دیگری مرتبط کرد که تصورش بسیار آسان است و ما هر روز با آن مواجه می شویم، این عمل انعکاس نسبت به یک آینه است.

تصور کنید که می خواهیم تصویر هر چیزی را در آینه بی نهایت بزرگی که در صفحه xy قرار گرفته است ببینیم. این کار را نگاشت I_{xy} می نامیم و در مکانیک کوانتومی با عملگر $\hat{R}_{xy}$ نشان می دهیم. این نگاشت روی مختصات فضا چه اثری دارد؟ براحتی می توانید خود را قانع کنید که مختصه هر نقطه را به شکل زیر تغییر می کند:

$$I_{xy} : (x, y, z) \longrightarrow (x, y, -z). \tag{51}$$



شکل ٦: تبدیل یک شی تحت انعکاس در آینه. چنین انعکاسی ناشی از دوران حول محور z به اندازه ۱۸۰ درجه و سپس انعکاس حول مبدا (عمل پاریته) است.

هم چنین در یک آینه تکانه های ذرات نیز به شکل زیر تغییر می کنند:

$$I_{xy} : (p_x, p_y, p_z) \longrightarrow (p_x, p_y, -p_z). \tag{52}$$

آیا این عمل به عملِ پاریته ربطی دارد یا آنکه کاملاً مستقل است؟ دراین جا می خواهیم نشان دهیم که این عمل که آن را انعکاس نسبت به صفحه xy می نامیم، ترکیبی است از عمل پاریته و دوران . هرگاه دوران حول محورِ z به اندازه زاویه π را با $R_z(\pi)$ نشان دهیم خواهیم داشت:

$$R_z(\pi) : (x, y, z) \longrightarrow (-x, -y, z). \tag{53}$$

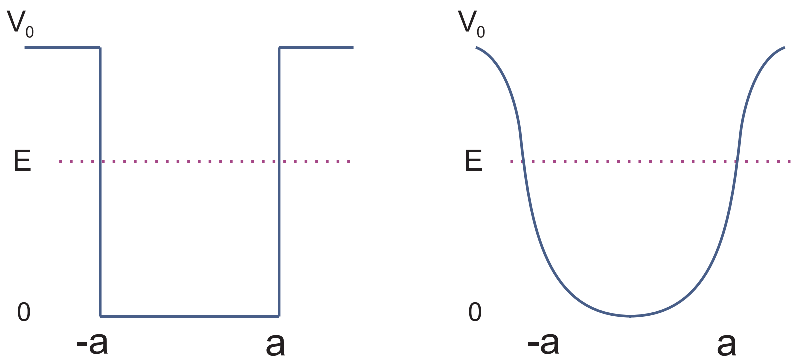
اگر این عمل را با پاریته ترکیب کنیم آنگاه خواهیم داشت:

$$\Pi R_z(\pi) : (x, y, z) \longrightarrow (-x, -y, z) \longrightarrow (x, y, -z). \tag{54}$$

بنابراین بدست می آوریم

$$I_{xy} = \Pi \; R_z(\pi). \tag{55}$$

می دانیم که دنیای ما تحت دوران متقارن است. بنابراین هرگاه تقارن پاریته وجود داشته باشد، تقارن آینه ای نیز وجود دارد و نقض تقارن پاریته نیز به معنای نقض تقارن آینه‌ای است.



شکل ۷: چاه پتانسیل با پهنای $2a$ و عمق V_0. تصویر سمت چپ نخستین تقریب به پتانسیل واقعی سمت راست است.

۶ چاه پتانسیل یک بعدی با عمق محدود

در بخش های گذشته چاه های پتانسیل مربعی با عمق محدود را مطالعه کردیم. دراین بخش چاه پتانسیل یک بعدی با عمق محدود را مطالعه می کنیم. این چاه نخستین تقریب به یک پتانسیل با برد و عمق محدود است، شکل ??. حل کردن چاه پتانسیل مربعی با عمق محدود به روش تحلیلی نه ساده است و نه مفید. به جای آن در فصل های آینده چاه پتانسیل دایره‌ای و کروی با عمق محدود را مطالعه می کنیم.

نخستین پتانسیلی که به آن توجه می کنیم یک چاه پتانسیل با عمق محدوداست. این پتانسیل درشکل (۷) نشان داده شده است و به صورت زیراست:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x \leq -a, \\ 0 & -a \leq x \leq a, \\ V_0 & a \leq x \end{cases} \tag{56}$$

۱.۶ ویژه حالت های مقید

نخست حالت های مقید را بررسی می کنیم. این حالت ها حالت هایی هستند که انرژی آنهاکمتراز V_0 است . خواهیم دید که این جواب ها در$\pm\infty$ به سمت صفر میل می کنند و فقط درناحیه محدودی ازفضا غیرصفر هستند. به همین دلیل است که آنهارا جواب های مقید می گوییم.

$$
\begin{aligned}
&-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}\psi + V_0\psi(x) = E\psi \qquad\qquad |x| > a \\
&-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}\psi = E\psi(x) \qquad\qquad -a \leq x \leq a.
\end{aligned} \tag{57}
$$

این معادلات را می توان به شکل ساده ترزیر بازنویسی کرد:

$$
\begin{aligned}
&\frac{d^2\psi}{dx^2}\psi = q^2\psi \qquad q = \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}} \\
&\frac{d^2\psi}{dx^2}\psi = -\kappa^2\psi \qquad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}
\end{aligned} \tag{58}
$$

ازآنجا که این پتانسیل زوج است ویژه توابع انرژی دارای پاریته مشخص هستند یعنی می توانیم آنها را به ویژه توابع زوج و یافرد تقسیم کنیم. جواب های زوج را با $\psi_e(x)$ و جواب های فرد را با ψ_o نشان می دهیم. جواب های زوج به شکل زیرهستند:

$$
\psi_e(x) = \begin{cases} e^{qx} & x \leq -a, \\ A\cos kx & -a \leq x \leq a, \\ e^{-qx} & a \leq x. \end{cases} \tag{59}
$$

شرط پیوستگی تابع موج و مشتق آن درنقطه a منجر به روابط زیرمی شود:

$$
\begin{aligned}
e^{-qa} &= A\cos ka \\
qe^{-qa} &= Ak\sin ka
\end{aligned} \tag{60}
$$

که ازتقسیم این دو برهم رابطه زیر بدست می آید:

$$
\boxed{\cot ka = \frac{k}{q}.} \tag{61}
$$

جواب های فرد به شکل زیرهستند:

$$
\psi_o(x) = \begin{cases} e^{qx} & x \leq -a, \\ B\sin kx & -a \leq x \leq a, \\ -e^{-qx} & a \leq x. \end{cases} \tag{62}
$$

شرط پیوستگی تابع موج و مشتق آن درنقطه a منجر به روابط زیر می شود:

$$\begin{aligned} -e^{-qa} &= B\sin ka \\ qe^{-qa} &= Bk\cos ka \end{aligned} \tag{63}$$

که ازتقسیم آن دوبرهم رابطه زیربدست می آید:

$$\boxed{\cot ka = \frac{-q}{k}}. \tag{64}$$

با حل روابط 61 و 64 می توانیم مقادیر ویژه انرژی را برای چاه پتانسیل بدست آوریم. این معادلات را می بایست به روش ترسیمی حل کنیم. اماقبل ازآن می بایست طرفین معادله را برحسب یک متغیر بنویسیم. دراین جا مناسب است که با تعریف متغیر $y := \sqrt{\frac{2|E a^2}{\hbar^2}}$ و پارامتر $\lambda := \sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}}$ این معادلات را به شکل زیربازنویسی کنیم:

برای جواب های زوج :

$$\cot y = \sqrt{\frac{y^2}{\lambda^2 - y^2}}, \tag{65}$$

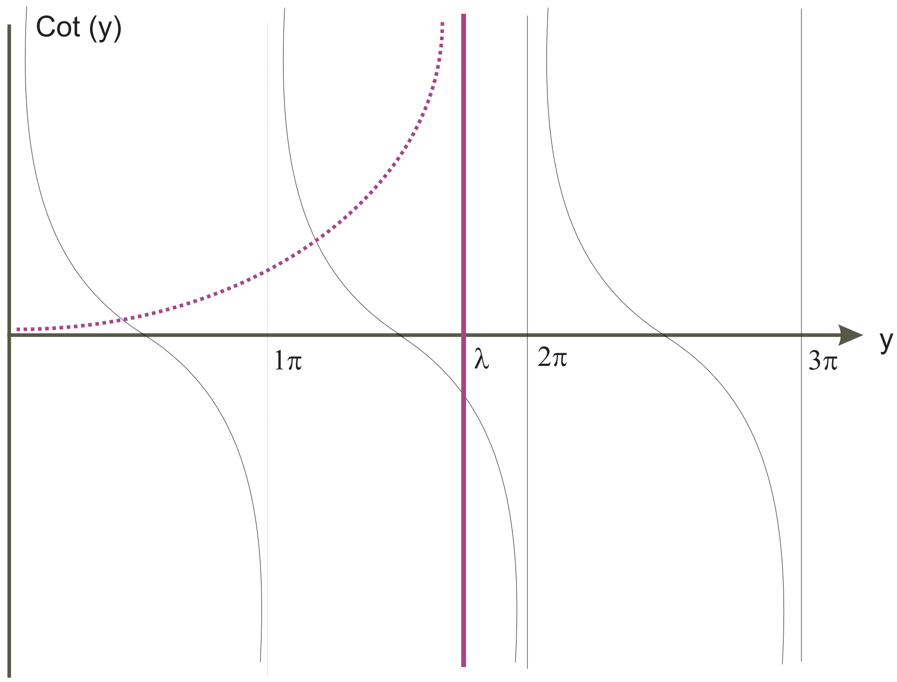
و برای جواب های فرد

$$\cot y = -\sqrt{\frac{\lambda^2 - y^2}{y^2}}. \tag{66}$$

شکل های ۸ و ۹ حل ترسیمی این معادلات رانشان می دهند.
ازاین شکل ها به چند خاصیت مهم جواب ها پی می بریم:

۱ – با افزایش λ تعداد حالت های مقید نیز افزایش می یابد. بنابراین هرچه که عمق چاه ویا پهنای آن زیاد شود ویااینکه جرم ذره زیاد ترباشد تعداد حالت های مقید نیز بیشتر می شود.

۲ – حالت پایه یعنی حالتی که کمترین انرژی رادارد یک حالت زوج است و بعدازآن حالت های فرد و زوج یک درمیان قرارمی گیرند.



شکل ۸: حل ترسیمی معادله انرژی برای جواب های زوج

۳ — هرگاه عمق و پهنای پتانسیل چنان باشد که ثابت λ از $\frac{\pi}{2}$ کمترباشد، جواب فرد وجود ندارد. دراین حالت تنها یک جواب زوج وجود دارد.

۴ — هرچه که مقدارانرژی بیشترمی شود، ضریب k بیشتر و ضریب q کمترمی شود، و درنتیجه طول موج جواب های سینوسی داخل چاه کمترشده و عمق نفوذ آنها به درون ناحیه $V_0 \geq E$ یعنی ناحیه ای که ازنظرکلاسیک ناحیه ممنوعه است نیز کمترمی شود.

۵ — واضح است که درحد $V_0 \longrightarrow \infty$ بی نهایت ویژه حالت انرژی وجود دارد. دراین حالت ها بدلیل اینکه $\lambda \longrightarrow \infty$، معادلات بالا را می توان به شکل تحلیلی نیز حل کرد. دراین حد معادلات بالا به شکل زیردرمی آیند:

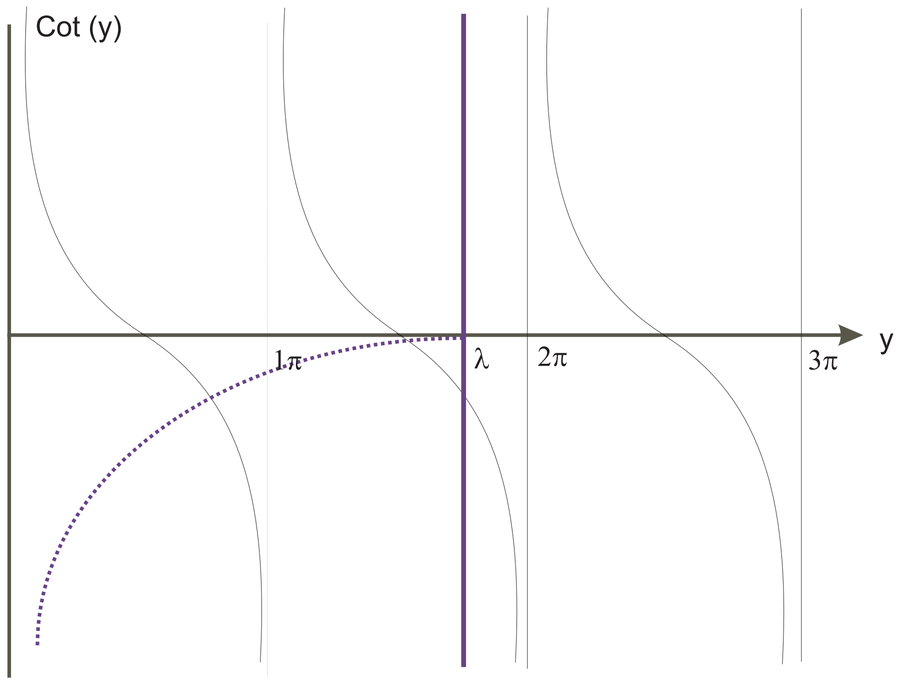
برای جواب های زوج:

$$\cot y = 0 \quad \longrightarrow \quad y = (n + \frac{1}{2})\pi \quad \longrightarrow \quad E_n = \frac{\hbar^2}{2ma^2}(n + \frac{1}{2})^2\pi^2. \tag{67}$$

برای جواب های فرد:

$$\tan y = 0 \quad \longrightarrow \quad y = (n + \frac{1}{2})\pi \quad \longrightarrow \quad E_n = \frac{\hbar^2}{2ma^2}{}^2 n\pi^2. \tag{68}$$

دراین حد عمق نفوذ به ناحیه ممنوعه دقیقاً برابربا صفرمی شود و مقدار تابع موج در دیواره های چاه پتانسیل برابر با صفرمی شود.



شکل ۹: حل ترسیمی معادله انرژی برای جواب های فرد

۲.۶ ویژه حالت های نامقید

این ویژه حالت ها، حالت هایی هستند که انرژی آنها بیشتر از V_0 است. دراین حالت جواب های زوج به شکل زیردرمی آیند:

$$\psi_e(x) = \begin{cases} e^{iqx} + Ce^{-iqx} & x \leq -a, \\ A\cos kx & -a \leq x \leq a, \\ e^{-iqx} + Ce^{iqx} & a \leq x. \end{cases} \tag{69}$$

که درآن

$$q = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}. \tag{70}$$

دراین جواب دیگر جملهٔ e^{-iqx} در$-\infty$ واگرانمی شود و می بایست آن رانگاه داشت. درنتیجه وقتی که شرایط پیوستگی تابع موج و مشتق آن را درنقطه $x = a$ می نویسیم با دومعادله و سه مجهول مواجهیم که عبارتند از $(E,\ A,\ C)$. این موضوع یعنی زیادتربودن تعداد مجهولات نسبت به معادلات باعث می شود که دیگر انرژی مقادیر گسسته نداشته باشد و به ازای هرمقدار پیوستهٔ E بتوانیم مقادیر ضرایب (A, C) بدست بیاوریم. به طور صریح تر شرایط مرزی در نقطه a عبارتند از:

$$\begin{aligned} &e^{-iqa} + Ce^{iqa} = A\cos ka \\ &iq(e^{-iqa} - Ce^{iqa}) = Ak\sin ka \end{aligned} \tag{71}$$

که باکمی محاسبه منجر به روابط زیرمی شود:

$$C = e^{-2iqa}\frac{iq\cos ka + k\sin ka}{iq\cos ka - k\sin ka}, \tag{72}$$

و

$$A = e^{-iqa}\frac{2iq}{iq\cos ka - k\sin ka}. \tag{73}$$

دراین حالت به ازای هرمقدار انرژی $E \geq V_0$ یک تابع موج ψ_e با ضرایب فوق وجود دارد که از$-\infty$ تا ∞ درفضا گسترده است. این تابع موج درهرناحیه به صورت ترکیبی از دوموج تخت است و درناحیه پتانسیل به صورت یک موج ایستاده است. باتوجه به اینکه $q \leq k$، طول موج این امواج درناحیه درون پتانسیل کمتراز خارج پتانسیل است که ناشی از زیادتربودن تکانه ویاانرژی جنبشی ذرات درناحیه درون پتانسیل است.

دراین حالت جواب های فرد به شکل زیردرمی آیند

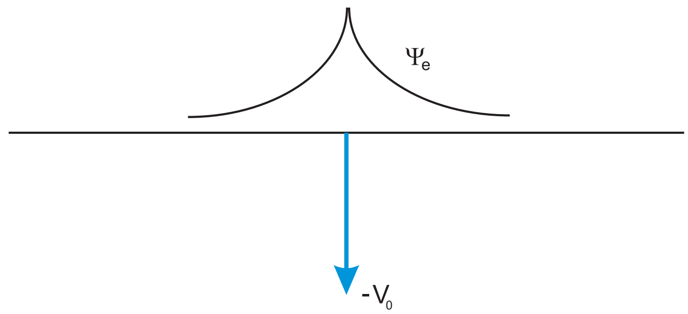
$$\psi_o(x) = \begin{cases} e^{iqx} + De^{-iqx} & x \leq -a, \\ B\sin kx & -a \leq x \leq a, \\ -e^{-iqx} - Ce^{iqx} & a \leq x. \end{cases} \tag{74}$$

شرایط مرزی درنقطه $x = a$ عبارت خواهند بوداز:

$$\begin{aligned} &e^{-iqa} + De^{iqa} = -B\sin ka \\ &iq(e^{-iqa} - De^{iqa}) = kB\cos ka \end{aligned} \tag{75}$$

که باکمی محاسبه منجر به مقادیر زیر برای B و D می شود:

$$B = e^{-iqa}\frac{2iq}{k\cos ka - iq\sin ka}, \tag{76}$$



شکل ۱۰: چاه پتانسیل دلتا تنها یک جواب مقید زوج دارد.

و

$$D = e^{-2iqa}\frac{iq\sin ka + k\cos ka}{iq\sin ka - k\cos ka}. \tag{77}$$

۷ چاه پتانسیل دلتا

دراین بخش یک چاه بسیار عمیق باپهنای کم را درنظرمی گیریم و آن را با تابع پتانسیل $V(x) = -V_0\delta(x)$ نشان می دهیم. این چاه نشان دهنده یک نیروی جاذبه خیلی بزرگ با برد خیلی کوتاه است. شکل ۱۰ این چاه رانشان می دهد. ازآنجا که پتانسیل زوج است می توانیم جواب های آن را به زوج و فرد تقسیم کنیم. جواب های زوج به شکل زیرهستند که ازحل کردن معادله آزاد شرودینگر دردوسوی پتانسیل بدست آمده اند

$$\psi_e(x) = \begin{cases} e^{qx} & x \leq 0, \\ e^{-qx} & 0 \leq x, \end{cases} \tag{78}$$

که درآن $q = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$.

مطابق با آنچه که درقضایای اول فصل گفتیم درمورد پتانسیل دلتا مشتق تابع موج نمی تواند پیوسته باشد ولی همچنان خود تابع موج می بایست پیوسته باشد. برای آنکه تفاوت مشتق را دردوطرف نقطه صفر بدست بیاوریم ازمعادله شرودینگر از نقطه $-\epsilon$ تا نقطه ϵ انتگرال می گیریم.

برای این جواب ها داریم

$$\frac{-\hbar^2}{2m}(\psi_e'(0+) - \psi_e'(0-)) + V(0)\psi_e(0) = 0. \tag{79}$$

شکل ۱۱: چاه پتانسیل دوتایی، مدلی ساده برای یک مولکول دو اتمی.

ازاین معادله نتیجه می گیریم $q = \frac{mV_0}{\hbar^2}$. بنابراین فقط یک حالت مقیدِ زوج وجود دارد. انرژی این حالت مقید برابراست با

$$E = -\frac{\hbar^2 q^2}{2m} = -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}. \tag{80}$$

جواب های فرد به صورت زیرهستند:

$$\psi_o(x) = \begin{cases} e^{qx} & x \leq 0, \\ -e^{-qx} & 0 \leq x. \end{cases} \tag{81}$$

برای این جواب ها شرط مرزی به صورت زیردرمی آید:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}(\psi_o'(0+) - \psi_o'(0-)) + V(0)\psi_o(0) = 0. \tag{82}$$

که ازآن نتیجه می گیریم $V_0\psi_o = 0$ که به معنای این است که $\psi_o = 0$. بنابراین هیچ حالت مقید فردی وجود ندارد. پس نشان داده ایم که چاه پتانسیل $V(x) = -V_0\delta(x)$ تنها یک حالت مقید زوجِ را درخود نگاه می دارد که انرژی آن برابراست با $E = -\frac{\hbar^2 q^2}{2m} = -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}$.

۸ چاه پتانسیل دوگانه، مدلی برای یک مولکول دواتمی

دراین بخش یک چاه پتانسیلی دلتای دوگانه را که مدل ساده ای برای یک مولکول دواتمی است مطابعه می کنیم. این پتانسیل می تواند نشان دهنده برهم کنش جاذبه ای است که یون های مثبت یک مولکول دواتمی برای یک الکترون دارند. تابع پتانسیل به شکل زیراست:

$$V(x) = -V_0\delta(x-a) - V_0\delta(x+a). \tag{83}$$

باید دقت کنیم که V_0 دراینجا دیمانسیون انرژی درطول دارد یعنی

$$[V_0] = [E][L]. \tag{84}$$

درنواحی بین تابع های دلتا پتانسیل صفراست و تابع موج حل معادله شرودینگر آزاد است. باتوجه به زوج بودن پتانسیل جواب ها به فرد و زوج تقسیم می شوند. جواب های زوج به شکل زیرهستند:

$$\psi_e(x) = \begin{cases} e^{q} & x \leq -a, \\ A\cosh qx & -a \leq x \leq a, \\ e^{qx} & a \leq x. \end{cases} \tag{85}$$

پیوستگی تابع موج درنقطه $x = a$ منجر به شرط زیر می شود:

$$A\cosh qa = e^{-qa} \tag{86}$$

و ناپیوستگی مشتق نیز از رابطه زیربدست می آید:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi_e'(a+) - \psi_e'(a-)) - V_0\psi_e(a) = 0 \tag{87}$$

و بااستفاده از معادله قبلی بدست می آوریم:

$$\frac{\hbar^2 q}{2m}(1 + \tanh qa) = V_0, \tag{88}$$

و یا

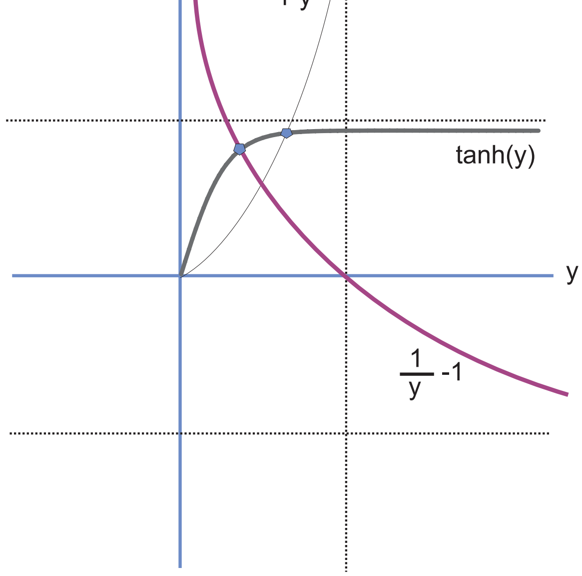
$$\tanh qa = \frac{2mV_0}{\hbar^2 q} - 1. \tag{89}$$

با تعریف پارامترهای بدون بعدِ $y = \frac{\hbar^2 q}{2mV_0}$ و $\lambda = \frac{2mV_0 a}{\hbar^2}$ این معادله را به شکل زیربازنویسی می کنیم:

$$\tanh \lambda y = \frac{1}{y} - 1. \tag{90}$$

برای بدست آوردن حل های این معادله بازهم ازروش ترسیمی استفاده می کنیم ولی قبل از حل آن سعی می کنیم حل های فرد را نیز بدست آوریم. برای حل های فرد داریم

$$\psi_o(x) = \begin{cases} e^{q} & x \leq -a, \\ B\sinh qx & -a \leq x \leq a, \\ -e^{qx} & a \leq x. \end{cases} \tag{91}$$



شکل ۲۱: حل ترسیمی معادلات ویژه مقداری چاه پتانسیل دوتایی

شرط پیوستگی تابع موج منجر به معادله زیرمی شود:

$$B\sinh qa = -e^{-qa}, \tag{92}$$

و ناپیوستگی مشتق نیز به همراه شرط بالا منجر به رابطه زیرمی شود:

$$\tanh \lambda y = \frac{y}{1-y}. \tag{93}$$

شکل ۲۱ حل ترسیمی معادلات 90 و 93 را نشان می دهد. شکل های ۳۱ و ۴۱ توابع موج زوج و فرد را برای چاه پتانسیل دوتایی دلتا نشان می دهند.

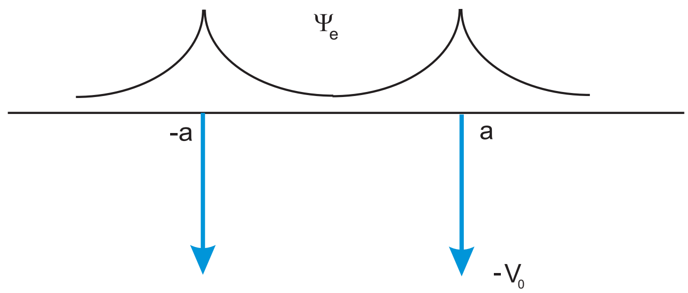
ازاین حل ترسیمی نکات زیر را می توان آموخت:

۱ — حداکثر دو حالت مقید وجود دارد. برای این دوحالت $y_{even} \geq y_{odd}$ که به معنای آن است که $q_{even} \geq q_{odd}$، و یا $E_{odd} \geq E_{even}$.

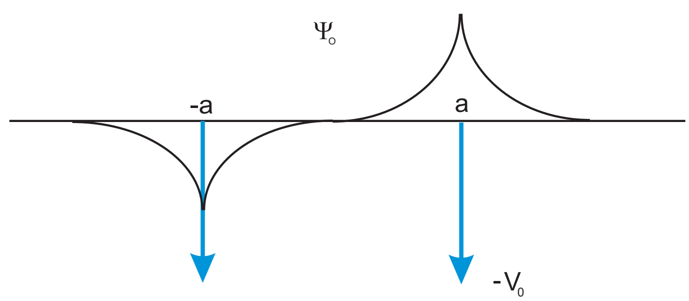
۲ — جواب زوج همواره وجود دارد ولی جواب فرد تنها وقتی وجود دارد که شیب منحنی تانژانت درنقطه صفر از یک بیشتر باشد. ازآنجا که این شیب برابر با λ است، بنابراین جواب فرد تنهاوقتی وجود دارد که شرط $\frac{2mV_0a}{\hbar^2} > 1$. بنابراین جواب فرد تنها وقتی وجود دارد که عمق پتانسیل و یا فاصله دو چاه ازیکدیگر به ا ندازه کافی بزرگ باشد.

۳ — حال فرض کنید که حالت اولیه ذره ترکیبی خطی از دو حالت زوج و فرد باشد به این صورت که

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_e(x) + \psi_o(x)). \tag{94}$$



شکل ۳۱: تابع موج زوج برای چاه پتانسیل دوتایی دلتا



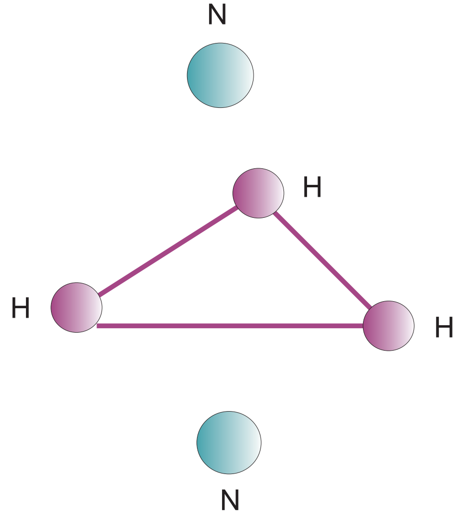
شکل ۴۱: تابع موج فرد برای چاه پتانسیل دوتایی دلتا

دراین حالت ذره بیشتر دراطراف چاه پتانسیل طرف راست قرار دارد.
دراین صورت تابع موج درلحظه t عبارت است از

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-i\frac{E_e}{\hbar}t}\psi_e(x)+e^{-i\frac{E_o}{\hbar}t}\psi_o(x)) \\ &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_e(x)+e^{-i\frac{E_o-E_e}{\hbar}t}\psi_o(x)).\end{aligned} \tag{95}$$

حال پس از گذشت زمان T که برابر است با

$$T=\frac{2\pi\hbar}{E_o-E_e} \tag{96}$$



شکل ۵۱: مولکول آمونیاک، و دووضعیت تعادل اتم نیتروژن درآن

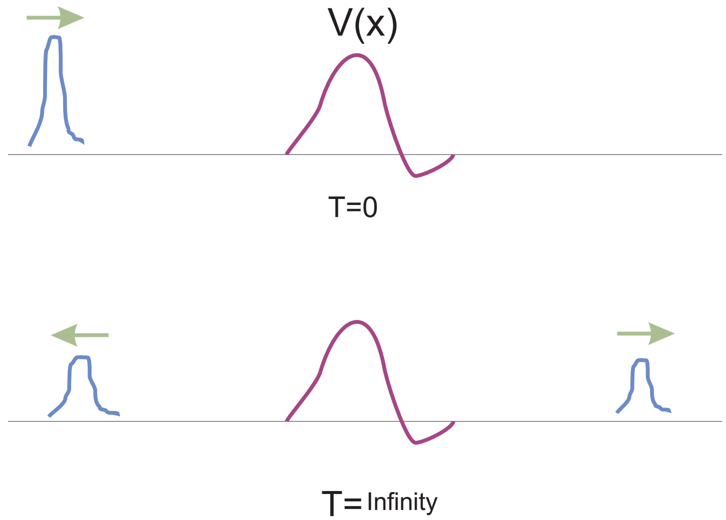
تابع موج به صورت زیردرمی آید:

$$\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_e(x)-\psi_o(x)). \tag{97}$$

که نشان دهنده آن است که ذره بیشتر دراطراف چاه پتانسیل طرف چپ قراردارد. به این ترتیب می بینیم که ذره بین دو حالت فوق نوسان می کند واین نوسان را باپریودِ T انجام می دهد.
مولکول آمونیاک یک سیستم فیزیکی است که دراولین تقریب توسط مدل بالا توصیف می شود. درمولکول آمونیاک با فرمول NH_3، اتم های هیدروژن به شکل رئوس یک مثلث دریک صفحه قرارگرفته اند. مطابق شکلِ ۵۱ ، اتم نیتروژن دو وضعیت تعادلی دارد که دردوطرف این صفحه قرارگرفته اند. این دووضعیت تعادلی را می توان با دو چاه پتانسیل نشان داد. مطابق با آنچه که دراین بخش دیده‌ایم، ویژه حالت های مولکول آمونیاک حالت هایی نیستند که درآن اتم نیتروژن دریکی از این چاه ها قرارگرفته باشد بلکه حالت هایی هستند که دارای پاریته زوج و یا فردهستند و درآنها احتمال یافتن اتم نیتروژن درطرفین صفحه هیدروژن ها یکسان است.

۹ مسئله پراکندگی دریک بعد

دراین بخش موقتاً حالت های مقید را رها می کنیم و به مسئله پراکندگی می پردازیم. این مسئله به صورت کلاسیک به شکل زیراست. ذره ای را باتکانه یا انرژی معین به یک پتانسیل شبیه به آنچه که درشکل ٦١ نشان داده شده است می تابانیم. این ذره مطابق به طرف پتانسیل حرکت کرده و درصورتی که انرژی آن از ارتفاع پتانسیل بیشترباشد از آن عبورمی کند و درغیراین صورت در نقطه‌ای مثل نقطه a متوقف می شود و برمی گردد. نقطه a نقطه بازگشت ذره یا $Turning\ Point$ نامیده می شود.
البته پراکندگی به ندرت دریک بعد صورت می گیرد و معمولاً برای حل مسئله پراکندگی می بایست صورت سه بعدی آن را درنظرگرفت. این کاری است که بامعلومات کنونی ما امکان پذیرنیست و بعداً آن را به تفصیل بررسی می کنیم. دراین فصل



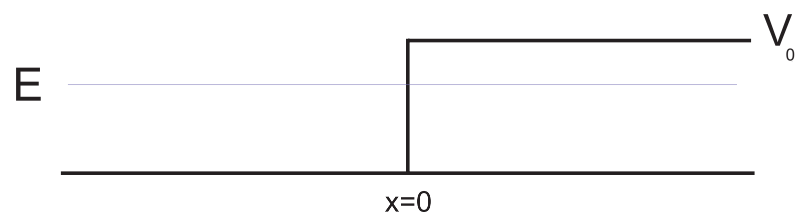
شکل ٦١: پراکندگی از یک پتانسیل

خود را به مسئله پراکندگی دریک بعد محدود می کنیم.
هرگاه بخواهیم درچارچوب مکانیک کوانتومی مسئله پراکندگی دریک بعد را حل کنیم باید دقت کنیم که ذره تابنده هیچگاه بایک تکانه کاملاً دقیق مشخص نمی شود، بلکه تابع موج آن ترکیبی است از امواج تخت با طول موج های و یاتکانه های مختلف. به عبارت بهتر می بایست بسته موجی با پهنای کم و تکانه متوسط p درنظرگرفت و معادله وابسته به زمان شرودینگر را برای آن به طور کامل حل کرد. اگر این کاررا به طور تحلیلی (البته بازحمت زیاد) و یا به طور عددی انجام دهیم خواهیم دید که بسته موج به طرف پتانسیل حرکت کرده ضمن حرکت پخش می شود، و پس از اصابت به پتانسیل کج و معوج شده و لی سرانجام بعدازگذشت زمان به شکل دو بسته موج کوچکتردرمی آید که یکی درهمان راستای قبلی به حرکت خود ادامه می دهد و دیگری بازمی گردد. علی الاصول می توان با حل معادله شرودینگر، شکل دقیق توابع موج تابیده شده و یا عبورکرده و بازتابیده را پیداکرد. ازنظرفیزیکی به این علاقمندیم که نسبت ذراتی که از سد پتانسیل عبور می کنند و هم چنین نسبت ذراتی که ازپتانسیل بازتابیده می شوند را به کل ذرات تابیده شده پیداکنیم. آنچه که کارماراساده می کند این است که این نسبت هارا می توان با محاسبه بسیارساده تری درمقایسه با آنچه که دربالاگفته شد نیز یافت به این معنا که بجای بسته های موج از امواج تخت نیز می توانیم استفاده کنیم. می توان ثابت کرد که این نسبت ها را با یافتن ویژه توابع معادله مستقل از زمان شرودینگر نیز یافت. این ویژه توابع را چنان باید گرفت که مطابق با تصویرفیزیکی ما ازمسئله پراکندگی باشد. دراین بخش این کار را برای چند پتانسیل ساده انجام می دهیم.

١٠ پتانسیل پله

شکل ٧١ یک پله پتانسیل را نشان می دهد.
معادله شرودینگر در دوناحیه کوچکتراز $x=0$ و بزرگتر از $x=0$ برای این پتانسیل به شکل زیراست:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}=E\psi \qquad x<0$$



شکل ۷۱: پتانسیل پله

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+V_0\psi=E\psi \qquad 0\leq x. \tag{98}$$

حالت اول: $E\geq V_0$.

برای این حالت پارامتر های زیر را معرفی می کنیم:

$$k:=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \qquad q:=\sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}. \tag{99}$$

درنتیجه معادلات بالا به شکل زیردرمی آیند:

$$\begin{aligned} -\frac{d^2\psi}{dx^2}&=k^2 \qquad x<0\\ -\frac{d^2\psi}{dx^2}&=q^2 \qquad 0\leq x. \end{aligned} \tag{100}$$

با حل زیر:

$$\psi=\begin{cases} e^{ikx}+Re^{-ikx} & x\leq 0,\\ Te^{iqx} & \end{cases} \tag{101}$$

شرط پیوستگی تابع موج و مشتق آن درنقطه $x=0$ منجر به روابط زیرمی شود:

$$1+R=T$$

$$ik(1-R) = iqT, \qquad (102)$$

و درنتیجه

$$T = \frac{2k}{k+q}, \qquad R = \frac{k-q}{k+q}. \qquad (103)$$

دقت کنید که دراین حالت موج تخت بازگشتی هیچ اختلاف فازی با موج تابیده ندارد زیرا ضریب R حقیقی است. این امر ناشی از این است که انرژی ذره بیشتراز ارتفاع پتانسیل است و پتانسیل برای ذره مثل یک مانع نرم عمل می کند.

جریان های احتمال برابرند با:

$$\begin{aligned} J_{in} &= \frac{\hbar k}{m} \\ J_{ref} &= \frac{\hbar k}{m} R^2 = \frac{\hbar k}{m} (\frac{k-q}{k+q})^2 \\ J_{tr} &= \frac{\hbar q}{m} T^2 = \frac{\hbar q}{m} (\frac{2k}{k+q})^2. \end{aligned} \qquad (104)$$

هرگاه این جریان ها را در تعداد کل ذرات تابیده یعنی N ضرب کنیم، کمیت های بدست آمده یعنی NJ_{in}، NJ_{ref} و NJ_{tr} به ترتیب تعداد ذرات تابیده، تعداد ذرات بازتابیده و تعداد ذرات عبورکرده را درواحد زمان نشان می دهند.
نتایج بالا نشان می دهند که

$$J_{in} = J_{ref} + J_{tr}. \qquad (105)$$

این معادله نشان دهنده پایسته بودن تعداد ذرات یا پایسته بودن احتمال است.

هم چنین دیده می شود که هرچه انرژی ورودی ذرات بیشتر شود، نسبت $\frac{k}{q}$ به سمت یک میل می کند ودرنتیجه $T \longrightarrow 1$ و $R \longrightarrow 0$. این نتیجه باشهود فیزیکی ما نیز سازگاراست زیرا دراین حالت ذرات پرانرژی، حضور پتانسیل را حس نمی کنند.
درحدی که انرژی E به V_0 نزدیک می شود، یعنی درحد برخورد خراشی، داریم $q \longrightarrow 0$، $T \longrightarrow 2$ و $R \longrightarrow 1$. این امر به این معناست که همه ذرات پس ازبرخورد خراشی با پتانسیل برمی گردند، اما اینکه $|T|^2$ برابربا 4 است به این معنانیست که جریان عبورکننده ذرات نیز زیاد شده است زیرااین جریان متناسب با q و درنتیجه برابر با صفراست.

حالت دوم: $E \leq V_0$.

برای این حالت پارامتر های زیر را معرفی می کنیم:

$$k := \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \qquad q := \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}. \qquad (106)$$

درنتیجه معادلات بالا به شکل زیردرمی آیند:

$$
\begin{aligned}
&-\frac{d^2\psi}{dx^2} = k^2 \qquad x < 0\\
&\frac{d^2\psi}{dx^2} = q^2 \qquad 0 \leq x.
\end{aligned} \tag{107}
$$

با حل زیر:

$$
\psi = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx} & x \leq 0, \\ Te^{-qx} \end{cases} \tag{108}
$$

شرط پیوستگی تابع موج و مشتق آن درنقطه $x = 0$ منجر به روابط زیرمی شود:

$$
\begin{aligned}
&1 + R = T\\
&ik(1 - R) = -qT,
\end{aligned} \tag{109}
$$

و درنتیجه

$$
T = \frac{2ik}{ik - q}, \qquad R = \frac{ik + q}{ik - q}. \tag{110}
$$

دراین حالت داریم $|R|^2 = 1$ و $|T|^2 = \frac{4k^2}{k^2+q^2}$ و جریان های مختلف به شکل زیردرمی آیند:

$$
\begin{aligned}
&J_{in} = \frac{\hbar k}{m}\\
&J_{ref} = \frac{\hbar k}{m} R^2 = J_{in}\\
&J_{tr} = 0.
\end{aligned} \tag{111}
$$

دراین حالت موج بازگشتی نسبت به موج تابیده دارای یک اختلاف فازاست . درواقع داریم

$$
\psi_{in} = e^{ikx}, \qquad \psi_{ref} = Re^{-ikx} = e^{-ikx - i\phi} \tag{112}
$$

که درآن

$$
\phi = tan^{-1}(\frac{2kq}{k^2 - q^2}) = tan^{-1}(\frac{2\sqrt{E(V - E)}}{2E - V}). \tag{113}
$$

بنابراین ذره پس از برخورد با پتانسیل حتماً برمی گردد و هیچگاه از پتانسیل نمی تواند عبورکند. بااین وجود دامنه احتمال آن درناحیه ای که ازنظرکلاسیک ممنوع بود، برابربا صفرنیست. دراین ناحیه ممنوعه انرژی کل ذره از انرژی پتانسیل آن کمتراست و به نظرمی رسد که انرژی جنبشی ذره منفی است . می توان پرسید که اگر چنین ذره ای را مشاهده کنیم چگونه می توانیم انرژی جنبشی منفی آن را توضیح دهیم. پاسخ این است که هرگاه بخواهیم چنین ذره ای را مشاهده کنیم مجبوریم آنقدربه آن انرژی بدهیم که انرژی جنبشی آن مثبت شود. برای فهم این موضوع به این نکته توجه می کنیم که مشاهده کردن این ذره درناحیه ای به طول تقریبی $\frac{1}{q}$، نیازمندن تاباندن نوری به آن است که طول موج آن بمراتب کمتراز $\frac{1}{q}$ باشد زیرادرغیراین صورت نورتابیده شده نمی تواند ذره را آشکارکند. بنابراین اگر طول موج فوتون های تابیده شده به این ذره را λ بگیریم می بایست داشته باشیم

$$\lambda < \frac{1}{q}. \tag{114}$$

اگر تکانه فوتون را با P نشان دهیم این رابطه به این معناست که

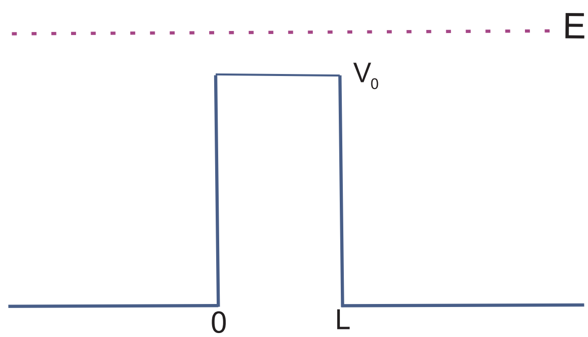
$$P = \frac{h}{\lambda} > hq. \tag{115}$$

بنابراین انرژی داده شده به ذره ازمرتبه $\Delta E \approx \frac{(hq)^2}{2m} = V_0 - E$ خواهد بود. درنتیجه انرژی ذره پس ازبرخورد ازمقدار $E + \Delta E \approx V_0$ بیشترخواهد بود. این امر به این معناست که هرگاه بخواهیم ذره را درناحیه ممنوعه مشاهده کنیم ناگزیر می بایست آن را به بالای پتانسیل بیاوریم و مشاهده کنیم که دراین صورت انرژی جنبشی آن مثبت خواهد بود.

۱۱ سد پتانسیل مربعی

شکل ۸۱ یک سد پتانسیل مربعی را نشان می دهد. این پتانسیل را می توان تقریبی از یک پتانسیل دافعه واقعی با برد تقریبی $\frac{L}{2}$ درنظرگرفت. هدف ما مطالعه مسئله پراکندگی از این سد پتانسیل است. می خواهیم ضرایب عبور و انعکاس را برحسب انرژی ذرات تابیده و مشخصات پتانسیل بدست آوریم.

حالت اول: $E > V_0$:



شکل ۸۱: سد پتانسیل

نخست حالتی را بررسی می کنیم که انرژی ذرات از ارتفاع سد بیشتراست. دراین حالت داریم

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx} & x \leq 0, \\ Ae^{iqx} + Be^{-iqx} & 0 \leq x \leq L, \\ Te^{ikx} & L \leq x. \end{cases} \tag{116}$$

شرایط مرزی درنقطه $x = 0$ عبارتنداز:

$$\begin{aligned} 1 + R &= A + B \\ ik(1 - R) &= iq(A - B). \end{aligned} \tag{117}$$

شرایط مرزی در نقطه $x = L$ نیز برابرند با:

$$\begin{aligned} &Ae^{iqL} + Be^{-iqL} = Te^{ikL} \\ &iq(Ae^{iqL} - Be^{-iqL}) = ikTe^{ikL}. \end{aligned} \tag{118}$$

باحذف R ار معادلات 117 و هم چنین T از معادلات 170 به دو معادله زیر برای ضرایب A و B می رسیم:

$$(k + q)A + (k - q)B = 2$$

$$e^{iqL}(k-q)A+e^{-iqL}(k+q)B=0. \qquad (119)$$

باحل این دو معادله ضرایب A و B بدست می آیند:

$$\begin{aligned} A &= 2e^{-iqL}\frac{k+q}{4q\cos qL-2ik(1+\frac{q^2}{k^2})\sin qL} \\ B &= -2e^{iqL}\frac{k-q}{4q\cos qL-2ik(1+\frac{q^2}{k^2})\sin qL}. \end{aligned} \qquad (120)$$

با جایگذاری این ضرایب درمعادلات 119،170 ضرایب R و T بدست می آیند. خواهیم داشت:

$$R=\frac{(k^2-q^2)\sin qL}{(k^2+q^2)\sin qL+2iqk\cos qL}, \qquad (121)$$

و

$$T=e^{-ikL}\frac{2iqk}{(k^2+q^2)\sin qL+2iqk\cos qL}. \qquad (122)$$

درنتیجه ضرایب انعکاس و عبور به ترتیب زیربدست می آیند:

$$|R|^2=\frac{(k^2-q^2)^2\sin^2 qL}{(k^2+q^2)^2\sin^2 qL+4q^2k^2\cos^2 qL}, \qquad (123)$$

$$|T|^2=\frac{4q^2k^2}{(k^2+q^2)^2\sin^2 qL+4q^2k^2\cos^2 qL}. \qquad (124)$$

کمیت $|R|^2$ درواقع نسبت تعداد ذرات منعکس شده به ذرات تابیده و کمیت $|T|^2$ نسبت ذرات عبورکرده به ذرات تابیده را نشان می دهند. نخست به مطالب زیر توجه می کنیم:

۱ – یک محاسبه ساده نشان می دهد که شرط زیرهمواره برقراراست

$$|R|^2+|T|^2=1, \qquad (125)$$

که به معنای بقای تعداد ذرات است.

۲ – هرگاه $E \;>> V_0$ ، آنگاه $q\approx k$ و درنتیجه $|R|^2\approx 0$ و $|T|^2\approx 1$. این نتیجه ازنظرفیزیکی نیز مورد انتظاراست زیرا ذرات پرانرژی سد پتانسیل را حس نمی کنند.

۳ — هرگاه $E=V_0$، آنگاه $q=0$. دراین حالت یعنی درحد برخوردهای خراشی ضرایب بالا به صورت زیردرمی آیند:

$$|R|^2=\frac{k^2L^2}{4+k^2L^2}=\frac{1}{1+(\frac{\lambda}{\pi L})^2}$$
$$|T|^2=1-|R|^2=\frac{(\frac{\lambda}{\pi L})^2}{1+(\frac{\lambda}{\pi L})^2}, \tag{126}$$

که درآن از تعریف $k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$ استفاده کرده ایم و بجای تکانه ذرات ورودی نیز از رابطه $\lambda=\frac{h}{p}=\frac{h}{\sqrt{2mE}}$ استفاده کرده ایم.

۴ — ضرایب عبور وانعکاس هردو توابعی تناوبی از پهنای چاه هستند. به این معناکه

$$|T|^2(L+\frac{2\pi}{q})=|T|^2(L),\qquad |R|^2(L+\frac{2\pi}{q})=|R|^2(L). \tag{127}$$

هرگاه شرط $qL=n\pi$ برقرار باشد بدست می آوریم:

$$|R|^2=0,\qquad |T|^2=1. \tag{128}$$

هرگاه شرط $qL=(n+\frac{1}{2})\pi$ برقرارباشد بدست می آوریم:

$$|R|^2=(\frac{k^2-q^2}{k^2+q^2})^2=(\frac{V_0}{2E-V_0})^2$$
$$|T|^2=\frac{4q^2k^2}{(k^2+q^2)^2}=\frac{4E(E-V_0)}{(2E-V_0)^2}. \tag{129}$$

این نتایج از نظر فیزیکی نیز قابل توضیح هستند.

حالت دوم: $0\le E\le V_0$ دراین حالت کافی است که درروابط 121، 122 جایگزینی زیر را انجام دهیم:

$$q\longrightarrow iq,\qquad q=\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}. \tag{130}$$

بااین جایگزینی خواهیم داشت:

$$R=\frac{(k^2+q^2)\sinh qL}{(k^2-q^2)\sinh qL+2iqk\cosh qL}, \tag{131}$$

و

$$T = e^{-ikL}\frac{2iqk}{(k^2-q^2)\sinh qL + 2iqk\cosh qL}. \qquad (132)$$

دراین حالت ضرایب انعکاس و عبور برابرخواهند بود با:

$$|R|^2 = \frac{(k^2+q^2)^2\sinh^2 qL}{(k^2-q^2)^2\sinh^2 qL + 4q^2k^2\cosh^2 qL}, \qquad (133)$$

و

$$|T|^2 = \frac{4q^2k^2}{(k^2-q^2)^2\sinh^2 qL + 4q^2k^2\cosh^2 qL}. \qquad (134)$$

غیر صفر بودن ضریب عبور به این معنی است که ذره بااحتمالی می تواند علیرغم کمتربودن انرژی اش از سد پتانسیل، ازاین ناحیه ممنوعه عبور کند. این پدیده را تونل زنی می گویند و شواهد متعددی برای درستی آن از نظرتجربی وجود دارد.
چند نکته درمورد ضرایب عبور وبازگشت جالب توجه اند:

۱ – دراین حالت هیچ کدام از ضرایب عبود و یا انتقال تابع تناوبی برحسب پهنای پتانسیل نیستند، بلکه با افزایش پهنای پتانسیل ضریب عبور به سمت صفر میل کرده و ضریب بازگشت به سمت یک میل می کند.

۲ – درحد انرژی های بسیارکم یعنی $E \longrightarrow 0$، یا $k \longrightarrow 0$ ، خواهیم داشت $|R|^2 \longrightarrow 1 \qquad |T|^2 \longrightarrow 0,$ که این نتیجه با شهود فیزیکی مانیز سازگاراست.

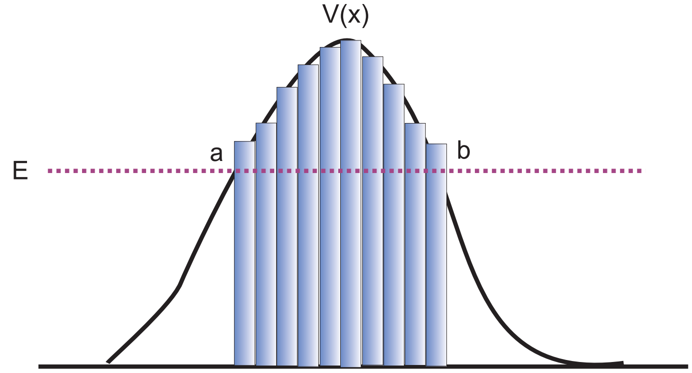
۳ – درحدی که ارتفاع سد نسبت به انرژی ذره خیلی زیاد باشد، به عبارت دقیق تر وقتی که شرطِ $qL = \sqrt{\frac{2m(v_0-E)}{\hbar^2}}L >> 1$، برآورده شود، می توان ضریب عبور را به صورت زیر تقریب زد:

$$|T|^2 \approx \frac{16q^2k^2}{(k^2+q^2)^2}e^{-2qL} = (\frac{4qk}{k^2+q^2})^2 e^{-2qL}. \qquad (135)$$

در نتیجه

$$\log|T|^2 = 2\log(\frac{4qk}{2+q^2}) - 2qL \approx -2qL = -2\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}L. \qquad (136)$$

این نتیجه برای یک سد پتانسیل مربعی بدست آمده است. حال اگر یک سد پتانسیل دلخواه داشته باشیم که ذرات کم انرژی به آن می تابند می توانیم سد پتانسیل را به صورت دنباله ای ازسد های پتانسیل مربعی با ارتفاع های متفاوت و پهناهای



شکل ۹۱: محاسبه تونل زنی از یک پتانسیل دلخواه

یکسان Δx درنظرگرفته و باضرب کردن ضرایب عبورازهرکدام ازاین سدهای مربعی ضریب عبود کلی را بدست آوریم. درنتیجه

$$\log |T|^2 \approx -2\sum_x q(x)\Delta x = -2\int \sqrt{\frac{2m(V(x)-E)}{\hbar^2}}dx, \tag{137}$$

و درنتیجه

$$\boxed{|T|^2 \approx e^{-2\int_a^b dx\sqrt{\frac{2m(V(x)-E)}{\hbar^2}}}.} \tag{138}$$

که درآن حدودانتگرال یعنی a و b نقاطی هستند که شرط $V(a)=V(b)=E$ برآورده می شود. این نقاط درشکل (۹۲) نشان داده شده اند. عبارت بالا تقریب خوبی برای محاسبه احتمال تونل زنی ازیک سد پتانسیل دلخواه است.

درزیربخش بعدی مثال هایی از پدیده تونل زنی را مطالعه می کنیم.

۱۲ مثالهایی از پدیده تونل زنی

۱.۱۲ کندن الکترون از فلز

یک قطعه فلزازکنارهم قرارگرفتن تعداد زیادی بلورهای خالص باابعاد کوچک درحدود میکرون یا میلی متر تشکیل شده است. هرمیکرو بلور ساختمان هندسی کاملاً منظمی دارد که از تکرار یک سلول درفضای سه بعدی تشکیل شده است. شکل هندسی سلول بستگی به نوع فلز دارد. میکروبلورها ازیکدیگر با صفحاتی که نظم بلوری را به هم می زنند جدا می شوند. هرقطعه بلور خالص از یون های مثبتی تشکیل شده است که درآرایه ای سه بعدی مرتب شده اند. هرکدام ازاین یون ها یک یا چند الکترون آزاد کرده اند. این الکترون ها درمحیط سه بعدی تقریباً آزاد هستند و به هیچ یون خاصی وابسته نیستند. دراولین تقریب می

توان ازبرهم کنش الکترون ها بایکدیگر نیز صرف نظرکرد. تنهاچیزی که الکترون ها رامقید می کند دیواره های فلزاست والکترون ها باوجودی که آزاد هستند نمی توانند ازمحیط فلز فرارکنند. بنابراین درساده ترین تقریب می توان محیط فلز را مثل یک چاه پتانسیل سه بعدی و عمیق درنظرگرفت که ابعاد آن با ابعاد فلز برابراست. دردرس فیزیک حالت جامد خواننده می تواند توصیف دقیق تری از ساختمان فلز و حرکت الکترون ها درون آن را دنبال کند. بااین وجود بسیاری از خواص مهم فلز را باهمین تصویر ساده نیز می توان فهمید. دراین جا بازهم برای تطابق با عنوان این درس و برای سادگی فلز را یک بعدی درنظرمی گیریم و آن را با یک چاه پتانسیل به عمق V_0 و پهنای L نشان می دهیم. سطوح انرژی یک الکترون به جرم $m = 9.11 \times 10^{-11}$ دراین چاه که ابعاد آن برای یک بلور خالص ازمرتبه $L \approx 10^{-3}\ m$ می گیریم از مرتبه

$$\epsilon \approx \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{L^2} \approx \frac{10^{-68}}{10^{-30}} \times 10^6 \approx 10^{-32} Joule \approx 10^{-13}\ electron\ volt \tag{139}$$

است. برای کندن یک الکترون ازسطح فلز به اشعه x یا فرابنفش حتیاج داریم که طول موج آن ازمرتبه چند ده آنگستروم است. انرژی این فوتون هاازمرتبه زیراست

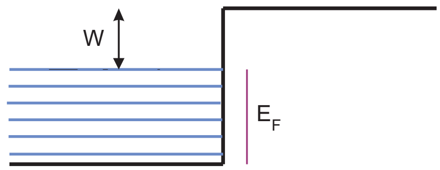
$$h\nu \approx \hbar\frac{c}{\lambda} \approx \frac{10^{-34} \times 10^8}{10 \times 10^{-10}} \approx 10^{-17}\ Joule \approx 100\ \ electron\ volt \tag{140}$$

است. بنابراین درمقایسه باترازهای انرژی یک الکترون عمق چاه بسیاربسیاربزرگ است و مامی توانیم برای محاسبه سطوح انرژی الکترون درچاه، عمق چاه را عملاً بی نهایت بگیریم. برای چنین چاهی می دانیم که سطوح انرژی تنهابایک عدد کوانتومی مشخص می شوند و عبارتنداز:

$$\epsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m}(\frac{n\pi}{L})^2. \tag{141}$$

برای ادامه بحث می بایست به اصل طرد پاوولی اشاره کنیم. این اصل که ناشی از تلفیق مکانیک کوانتومی و نسبیت خاص است بیان می کند که ذراتی که اسپین آنها نیمه صحیح است مثل الکترون که اسپین آن $\frac{1}{2}$ است نمی توانند ترازهای انرژی یکسانی اشغال کنند وهرکدام ازآنها می بایست دریک ترازانرژی قراربگیرد. این خاصیت را اصل طرد پاوولی می خوانیم. شکل دقیق این اصل را دردرس های آینده خواهیم آموخت. بنابراین دردرون چاه درهرسطح انرژی ϵ_n تنها یک الکترون قرارخواهدگرفت. ازآنجا که درحالت تعادل بلور فلزی مثل هرسیستم دیگری تمایل دارد که به کمترین انرژی خود برسد، الکترون ها سطوح انرژی را از پایین به بالا اشغال می کنند (شکل ۰۲). بالاترین سطح انرژی که اشغال می شود سطح فرمی نام دارد و با E_F نشان داده می شود. دریک بعد انرژی فرمی را براحتی می توان بدست آورد. ازآنجا که سطح انرژی فرمیِ E_F توسط N اُمین الکترون اشغال شده است داریم

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\pi}{L})^2 N^2. \tag{142}$$



شکل ۲۰: سطوح انرژی الکترون ها درغیاب میدان الکتریکی – تمام سطوح انرژی تازیرتراز فرمی پرهستند.

بنابراین سطح انرژی فرمی توسط چگالی الکترون ها درفلز تعیین می شود. بهتراست تخمینی از سطح انرژی فرمی داشته باشیم.
هرگاه یون ها که به فاصله ای ازمرتبه یک آنگستروم ازیکدیگر جداشده اند هرکدام یک الکترون به محیط فلز واگذارکنند چگالی الکترون ها برابر با $10^{10}\ m^{-1}$ خواهد بود. بنابراین برای یک فلز انرژی فرمی از مرتبه زیراست

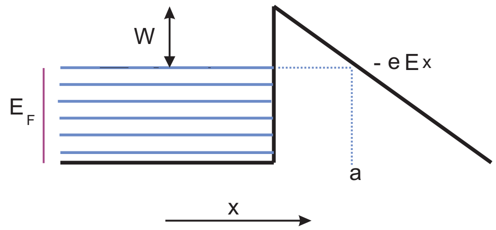
$$E_F \approx \frac{10^{-68}}{10^{-30}} 10^{20} \approx 10^{-18}\ Joule \approx 10\ \ electron\ \ volt. \tag{143}$$

آیا ممکن است که بعضی از ترازهای زیرسطح فرمی خالی باشند و درعوض الکترون ها بعضی از ترازهای بالاتراز سطح فرمی را اشغال کرده باشند؟ الکترون هامی توانند دراثر برهم کنش با یکدیگر و یا برخورد با یون ها و یا تابش اشعه خارجی و هم چنین دراثراختلالات گرمایی به سطوح خالی بالاتراز سطح فرمی صعود کنند. دردمای معمولی اتاق که آن را درحدود $300\ K^{\circ}$ می گیریم
میزان انرژی گرمایی ازمرتبه

$$kT \approx 1.38 \times 10^{-23} \times 300 \approx 4 \times 10^{-21}\ Joule \approx 3 \times 10^{-2}\ \ electron\ volt \tag{144}$$

است که یکهزارم انرژی فرمی است. به همین دلیل الکترون ها ی سطوح زیرین دراثراختلالات گرمایی معمول نمی توانند به بالای سطح فرمی صعود کنند. دردمای معمولی اتاق تنها تعداد کمی از الکترون های نزدیک سطح فرمی به سطوح بالاتر تحریک می شوند.
هرگاه عمق چاه را V_0 و سطح انرژی فرمی را E_f بگیریم تفاوت این دو یعنی $V_0 - E_f$ عبارت است از مقدارانرژی که برای کندن الکترون های نزدیک سطح فرمی ازفلز لازم است. این مقدارانرژی همان چیزی است که به آن تابع کارمی گوییم و آن را با W نشان می دهیم. بنابراین $W = V_0 - E_F \approx 100\ \ ev.$.

حال نشان می دهیم که چگونه دراثراعمال یک میدان الکتریکی درنزدیکی یک فلز می توان امکان تونل زنی برای الکترون های نزدیک سطح فرمی را فراهم کرده و آن هارا از چاهی که درآن گیرافتاده اند آزادکرد. شکل ۱۲ انرژی پتانسیل را درحضورمیدان الکتریکی درنزدیکی فلز نشان می دهد. لبه سمت راست چاه درنقطه $x = 0$ قرار دارد. میدان الکتریکی درناحیه



شکل ۱۲: سطوح انرژی الکترون ها درحضور میدان الکتریکی — الکترون های نزدیک تراز فرمی به خارج ازفلز تونل می زنند.

$x > 0$ تعریف شده است وجهت آن نیز روبه طرف چپ است. پتانسیل الکتریکی که این میدان ایجادمی کند برابراست با $\phi(x) = Ex$. E را اندازه میدان گرفته ایم. بنابراین انرژی یک الکترون دراین میدان برابراست با $V(x) = -eEx$. درنتیجه چاه پتانسیل به صورت زیرتغییرشکل می دهد:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x \leq 0, \\ 0 & 0 \leq x \leq L, \\ V_0 - eEx & L \leq x. \end{cases} \tag{145}$$

حال الکترون های نزدیک سطح فرمی می توانند ازاین پتانسیل به سمت راست تونل بزنند و ازفلز رها شوند. ازروی شکل معلوم است که $V_0 - eEa = E_F$ و یا $a = \frac{W}{eE}$.

احتمال تونل زنی الکترونی که انرژی آن برابر با E_F است، یعنی الکترونی که درنزدیکی سطح فرمی است برابراست با

$$|T|^2 = e^{-2\int_0^a dx\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E_F)}} = e^{-2\int_0^a dx\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-eEx-E_F)}} = e^{-2\int_0^a dx\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(W-eEx)}}. \tag{146}$$

بامحاسبه این انتگرال احتمال تونل زنی برابرمی شود با:

$$|T|^2 = e^{-\frac{4}{3}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\frac{W^{\frac{3}{2}}}{eE}}. \tag{147}$$

این رابطه به رابطه $Fowler - Nordheim$ مشهوراست.

بیایید تخمین بزنیم که برای یک میدان الکتریکی متعارف از قبیل $100 \ \ volt \ m^{-1}$ احتمال تونل زنی چقدراست ؟ برای این محاسبه تابع کار را برابر با $100 \ ev$ می گیریم. درنتیجه باجایگذاری مقادیر عددی و صرف نظرکردن از ضرایبی که ازمرتبه ۱

هستند خواهیم داشت:

$$|T|^2 \approx exp(-\frac{4}{3}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\frac{W^{\frac{3}{2}}}{eE}) \approx exp(-\sqrt{\frac{10^{-30}}{10^{-68}}}\frac{(100\times 10^{-19})^{3/2}}{10^{-19}\times 100}) \approx exp(-10^{11}). \qquad (148)$$

این عدد به اندازه غیرقابل تصوری کوچک است. درواقع عددی است که حدود ۱۰۰ میلیارد صفر بعدازممیزدارد. البته باید دقت کرد که یک الکترون دریک ثانیه بارها و بارها به دیواره پتانسیل برخورد می کند . هم چنین دردرون فلز الکترون های بسیاری درنزدیک سطح فرمی وجود دارند که می توانند این تونل زنی را انجام دهند. این دو کمیت را تخمین می زنیم. سرعت الکترون درون فلز ازمرتبه $v \approx \sqrt{\frac{2E_F}{m}} \approx \sqrt{\frac{10\times 10^{-19}}{10^{-30}}} \approx 10^6$ متربرثانیه است. هرگاه ابعاد میکرو بلور را یک میلی متر یا 10^{-3} متر بگیریم، می توانیم تخمین بزنیم که دریک ثانیه یک الکترون چند بار به دیواره چاه پتانسیل برخورد می کند. این تعداد ازمرتبه زیراست:

$$n \approx \frac{v}{2L} \approx \frac{10^6}{10^{-3}} \approx 10^9. \qquad (149)$$

حتی اگر تعداد الکترون هایی را که درنزدیک سطح فرمی قرار دارند وامکان تونل زنی دارند عددی از مرتبه 10^{10} هم بگیریم بازباتوجه به کوچکی بی اندازهٔ $|T|^2$ جریانی که بدست می آید تقریباً برابر باصفراست. برای یک جریان قابل ملاحظه می بایست یامیدان الکتریکی فوق العاده بزرگ باشد و یا اینکه فاصله a خیلی کم باشد. اگرچه نمی توان میدان های فوق العاده قوی ای آنچنان ایجادکرد که ضریب احتمال $|T|^2$ قابل ملاحظه شود، ولی می توان شرایطی ایجاد کرد که درآن فاصله تونل زنی یعنی a بسیارکم شود. برای این کارمی توان سطح صیقلی دوفلز را بالایه ای ازاکسید به هم چسپاند. ضخامت لایه اکسید درآزمایشی از این نوع بالایه های $Ni - NiO - Pb$ درحدود ۵۰ آنگستروم است. قبل ازاعمال میدان الکتریکی سطوح انرژی دوفلز به ترتیب نشان داده شده درشکلِ ۲۲ هستند. ازآنجا که سطوح فرمی درهردوفلز هم تراز هستند درغیاب میدان الکتریکی هیچ نوع تونل زنی اتفاق نمی افتد. بعدازاعمال میدان الکتریکی سطوح انرژی به صورت نشان داده شده درشکل ۳۲ درمی آیند.

درنتیجه احتمال تونل زنی برابراست با:

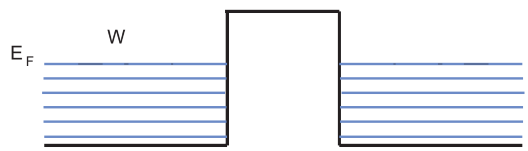
$$\begin{aligned} &|T|^2 \approx e^{-2\int_0^a dx\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E_F)}} = e^{-2\int_0^a dx\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(W-eEx)}} \\ = \quad & e^{-2\sqrt{\frac{2mW}{\hbar^2}}\int_0^a dx\sqrt{1-\frac{eE}{W}x}} = e^{-2\sqrt{\frac{2mW}{\hbar^2}}\int_0^a dx\sqrt{1-\frac{x}{a_0}}} = e^{-\frac{4}{3}\sqrt{\frac{2mW}{\hbar^2}}a_0(1-(1-\frac{a}{a_0})^{\frac{3}{2}})}. \end{aligned} \qquad (150)$$

که درآن $a_0 := \frac{W}{eE}$. ازآنجا که برای یک میدان الکتریکی متعارف، $a << a_0$، می توانیم بنویسیم

$$|T|^2 \approx e^{-2\sqrt{\frac{2mW}{\hbar^2}}a} \qquad (151)$$

برای مقادیر

$$W \approx 10\ ev \approx 10^{-17}\ Joule, \qquad a \approx 50A^\circ = 5\times 10^{-9}\ meter, \qquad m \approx 10^{-30}\ Kg, \qquad (152)$$



شکل ۲۲: سطوح انرژی الکترون ها ی دو فلز درغیاب میدان الکتریکی – سطوح فرمی دردوفلز هم تراز هستند.

بدست می آوریم

$$|T|^2 \approx e^{-40}. \tag{153}$$

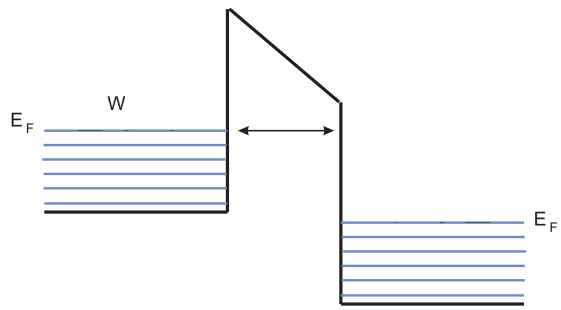
حال می توانیم جریانی را که ازاین تونل زنی حاصل می شود حساب کنیم. اگر تعداد دفعاتی را که الکترون به دیواره پتانسیل برخورد می کند را مطابق با محاسبات قبلی برابر با $n \approx 10^9\ s^{-1}$ قرار دهیم و تعداد الکترون هایی را که تونل زنی انجام می دهند برابر با $r = 10^{10}$ قرار دهیم، جریانی که بدست می آید برابرخواهد بود با

$$I \approx |T|^2 ner \approx e^{-40} \times 10^9 \times 10^{10} \approx 10^{-17} \times 10^{-19} \times 10^{19} = 10^{-17}\ Amp = 10^{-11}\ \mu Amp. \tag{154}$$

همانطورکه مشاهده می شود مقداراین جریان بسیارکوچک است.

۲.۱۲ واپاشی آلفا

یکی دیگر از پدیده هایی که تونل زنی درآنها نقش ایفامی کند واپاشی هسته های سنگین رادیواکتیو ازطریق گسیل خودبخودی ذرات آلفاست. یک ذره آلفا یا هسته هلیوم از دونوترون و دو پروتون تشکیل شده است. بدون اینکه بخواهیم به جزییات نیروهای بین اجزای هسته بپردازیم می خواهیم بایک مدل ساده گسیل خودبخود ذرات آلفا را ازهسته های سنگین مطالعه کنیم. می خواهیم بدانیم احتمال گسیل یک ذره آلفا دریک مدت زمان معین ازیک هسته چقدراست؟ براساس پاسخ به این سوال می خواهیم نیمه عمرآن هسته را تخمین بزنیم. می دانیم که نیروی هسته ای فوق العاده قوی و درعین حال بسیارکوتاه برداست. بنابراین می توانیم تصورکنیم که ذره آلفا دردرون یک چاه بسیارعمیق وپهنای کم گیرافتاده است. ازآنجا که عمق چاه بی



شکل ۳۲: سطوح انرژی الکترون ها ی دوفلز درحضور میدان الکتریکی — الکترون های نزدیک سطح فرمی ازیک فلز به فلز دیگر تونل می زنند.

نهایت نیست این ذره می تواند بااحتمالی از دیواره های چاه به بیرون تونل بزند و از چاه بگریزد. البته به محض بیرون آمدن ازچاه این ذره گرفتار نیروی جاذبه الکترومغناطیسی می شود که با نیروی $F=\frac{2(Z-2)e^2}{r^2}$ آن را به درون چاه جذب می کند. این نیرو برخلاف نیروی هسته ای بلند برداست. شکل کامل پتانسیل به صورت نشان داده شده درشکل ۴۲ است. دراین شکل و در محاسبات زیر بار ذرهٔ آلفا را با Z_1 وهسته سنگین باقیمانده را با Z_2 نشان می دهیم.

ذره آلفامی تواند از سد پتانسیلی که دربرابرآن است تونل بزند. احتمال تونل زنی برابراست با

$$|T|^2=e^{-G} \qquad G=\int_R^b 2\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E)}. \tag{155}$$

پتانسیل $V(x)$ را به شکل نشان داده شده در ۵۲ تقریب می زنیم.

درنتیجه خواهیم داشت

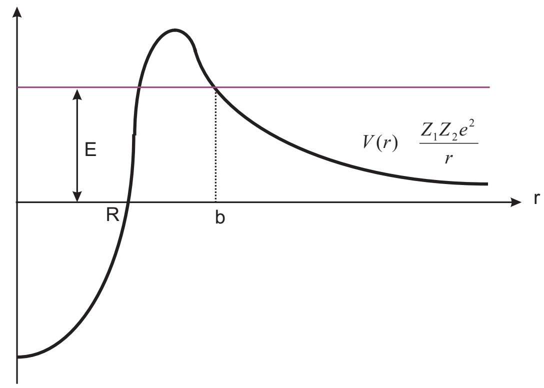
$$G=2\int_R^b 2\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(\frac{Z_1Z_2e^2}{r}-E)}=2\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}Z_1Z_2e^2}\int_R^b\sqrt{\frac{1}{r}-\frac{1}{b}}dr \tag{156}$$

با محاسبه انتگرال بدست می آوریم:

$$\begin{aligned} I &= \int_R^b\sqrt{\frac{1}{r}-\frac{1}{b}}dr=\frac{1}{\sqrt{b}}\int_R^b\sqrt{b-r}\frac{dr}{r^{\frac{1}{2}}} \\ &= 2\sqrt{b}\int_{\theta_0}^{\frac{\pi}{2}}\cos^2\theta d\theta=\sqrt{b}\left(\frac{\pi}{2}-\sin^{-1}\sqrt{\frac{R}{b}}-\sqrt{\frac{R}{b}(1-\frac{R}{b})}\right). \end{aligned} \tag{157}$$

ودرنتیجه

$$G=2\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}Z_1Z_2e^2}\sqrt{b}\left(\cos^{-1}\sqrt{\frac{R}{b}}-\sqrt{\frac{R}{b}(1-\frac{R}{b})}\right). \tag{158}$$



شکل ۴۲: پتانسیلی که ذره آلفا می بیند.

درانرژی های پایین داریم $R << b$ و بنابراین G را می توان به شکل زیرتقریب زد:

$$G \approx \sqrt{\frac{2mZ_1Z_2e^2b}{\hbar^2}}\pi. \tag{159}$$

ازآنجاکه انرژی ذره آلفا برابراست با E و باهمین انرژی نیز آزاد می شود و به بی نهایت می رود می توان بااستفاده ازقانون بقای انرژی مقدار b را برحسب انرژی نهایی ذره آلفا حساب کرد. درواقع داریم

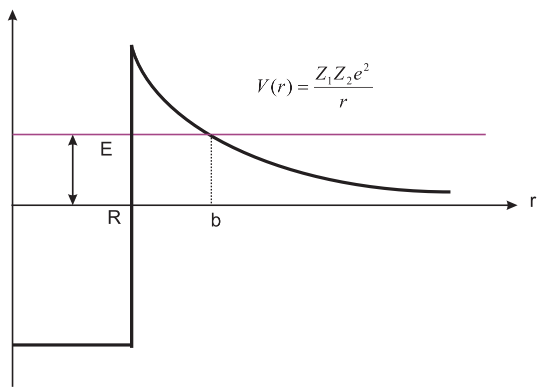
$$E = \frac{Z_1Z_2e^2}{b} \qquad \longrightarrow \qquad b = \frac{Z_1Z_2e^2}{E}, \tag{160}$$

وباجایگذاری این مقدار درعبارت G نهایتاً خواهیم داشت،

$$G \approx \frac{\pi Z_1Z_2e^2}{\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}}. \tag{161}$$

احتمال عبور از یک سد دریک برخورد برابراست با e^{-G}. بنابراین تعداد برخوردهای لازم برای یک بارعبور برابراست با $n = e^G$. زمان بین هر دو برخورد تقریباً برابر است با فاصله زمانی که ذره آلفا یک بارفاصله R را طی می کند یعنی $\tau \approx \frac{R}{v}$ که درآن v سرعت ذره آلفا درون هسته اتم است. بنابراین مدت زمان لازم برای صدور یک ذره آلفا برابر است با

$$T \approx \frac{R}{v}e^G = \frac{R}{\sqrt{2E/m}}e^{\frac{\pi Z_1Z_2e^2}{\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}}}.$$



شکل ۵۲: تقریب ساده ا ی از پتانسیلی که ذره آلفا می بیند.

پس یک هسته اتم بعداززمان T ثانیه بطور تقریبی تبدیل به یک هسته سبک ترمی شود، و فرایندی شبیه به فرایند زیررا طی می کند:

$$\cdots \quad N_z^A \longrightarrow N_{z-2}^{A-4} \longrightarrow N_{z-4}^{A-8} \longrightarrow \cdots . \tag{162}$$

مدت زمان T همان نیمه عمر هسته مادر با عدداتمی Z است. برای ذره α ، داریم $Z_2 = 2$ ، $Z_1 = Z-2$. بنابراین نیمه عمر هسته هایی که ازطریق گسیل ذره α واپاشی می کنند ازرابطه نیز بدست می آید:

$$T \approx \frac{R}{\sqrt{2E/m}} e^{\frac{2\pi(Z-2)e^2}{\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}}}. \tag{163}$$

می توانیم مدت زمان T را تخمین بزنیم. ازآنجاکه‌پتانسیل الکتریکی را به صورت $\frac{Z_1Z_2e^2}{r}$ نوشته ایم می بایست واحد های دستگاه گاووسی را به کارببریم.

برای ذره α ، داریم $Z_2 = 2$ ، $Z_1 = Z-2$ و $m \approx 4\times 2\times 10^{-24}\ g$. هرگاه هسته مادر را اورانیوم بگیریم داریم $Z = 92$. انرژی ذرات آلفا را درحدود ϵ میلیون الکترون ولت می گیریم که انرژی نمونه هسته ای است. بنابراین $E \approx \epsilon\times 10^6\times 10^{-12} = \epsilon\times 10^{-4}\ erg$. شعاع هسته یا R نیز درحدود یک فرمی یا $10^{-13}\ cm$ فرمی است. هم چنین داریم $e = 4.8\times 10^{-10}\ esu$ بنابراین خواهیم داشت

$$G \approx e^{37/\sqrt{\epsilon}} \approx 10^{16/\sqrt{\epsilon}}. \tag{164}$$

و

$$\frac{R}{v} = \frac{10^{-13}}{\sqrt{\frac{2\times\epsilon\times 10^{-4}}{8\times 10^{-24}}}} \approx \frac{2}{\sqrt{\epsilon}}\times 10^{-23}\ sec \approx \frac{0.6}{\sqrt{\epsilon}}\times 10^{-30}\ \text{سال}. \tag{165}$$

درنتیجه نیمه عمر برحسب سال به ترتیب زیر بدست می آید:

$$T \approx \frac{0.6}{\sqrt{\epsilon}} 10^{16/\sqrt{\epsilon}} \times 10^{-30} \ \text{سال}. \quad (166)$$

۱۳ پتانسیل پریودیک

دراین زیر بخش یک پتانسیل پریودیک را مطالعه می کنیم. دریک بلور یون ها دریک آرایه سه بعدی که ازتکرار یک سلول بنیادی ایجاد شده است جای گرفته اند. هریون یک یاچند الکترون درمحیط جامد آزاد کرده است و این الکترون ها تحت تاثیر جاذبه تمام یون های جامد هستند. درساده ترین تقریب می توان ازبرهم کنش الکترون ها بایکدیگر صرف نظرکرد و تنها برهم کنش یک الکترون را با شبکه یون ها درنظرگرفت. چنین شبکه ای یک پتانسیل پریودیک درتمام فضا ایجادمی کند. هدف ما دراین بخش آن است که ساده ترین مدل ازیک پتانسیل پریودیک را مطالعه کنیم و ببینیم که دریک پتانسیل پریودیک طیف انرژی چه ویژگی های متمایزی پیدامی کند. برای سادگی پتانسیلی به شکل زیردرنظرمی گیریم که از چاه های پتانسیل دلتا درفواصل a ازیکدیگر تشکیل شده است و این چاه ها از $-\infty$ تا ∞ گسترده شده اند:

$$V(x) = -\sum_{n=0}^{N-1} V_0 \delta(x - na). \quad (167)$$

خصلت ممتازاین پتانسیل وجود تقارن انتقالی است یعنی

$$V(x + a) = V(x). \quad (168)$$

می دانیم که عملگر انتقال به شکل زیرتعریف می شود:

$$T_a := e^{i\frac{a}{\hbar}P} \quad (169)$$

این عملگر دارای خواص زیراست:

$$T_a X T_a^{-1} = X + a, \qquad T_a|x\rangle = |x - a\rangle, \qquad \langle x|T_a = \langle x + a|. \quad (170)$$

ازاین رابطه می توان نتیجه گرفت که برای هر پتانسیل $V(X)$

$$T_a V(X) T_a^{\dagger} = V(X+a) \tag{171}$$

ازآنجا که پتانسیل ما متقارن است بنابراین نتیجه می گیریم

$$[T_a, H] = 0. \tag{172}$$

بنابراین می توانیم ویژه حالت های مشترک این دوعملگر را پیداکنیم یعنی ویژه حالت های انرژی را ویژه حالت های T_a نیز بگیریم. برای این کار بهتراست ویژه حالت های T_a را مطالعه کنیم. ازآنجا که T_a یک عملگر یکانی است ویژه مقدارهای آن فازهای خالص هستند. هم چنین باتوجه به رابطه 170 می دانیم که

$$\langle x|T_a|\psi\rangle = \langle x+a|\psi\rangle, \longrightarrow T_a\psi(x) = \psi(x+a). \tag{173}$$

بنابراین ویژه توابع مشترک انرژی و عملگر T_a دارای خاصیت اضافی زیرهستند:

$$\psi(x+a) = e^{i\theta}\psi(x). \tag{174}$$

حال برای حل معادله شرودینگر مطابق معمول معادله را درفاصله بین چاه های دلتا حل می کنیم و سپس شرایط مرزی را درمحل چاه ها بکارمی بریم. می نویسیم

$$\Psi(x) = \begin{cases} \cdots \\ \psi_n(x) = A_n e^{-qx} + B_n e^{qx} & na \leq x \leq (n+1)a, \\ \cdots . \end{cases} \tag{175}$$

که درآن $q = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}$. یادآوری می کنیم که E منفی است بنابراین q حقیقی است.
شرط پیوستگی تابع موج درنقطه na منجر به رابطه زیرمی شود:

$$\psi_{n-1}(na) = \psi_n(na), \tag{176}$$

ویا

$$A_{n-1}e^{-qna} + B_{n-1}e^{-qna} = A_n e^{-qna} + B_n e^{qna}, \tag{177}$$

ویا

$$(A_{n-1} - A_n)e^{-qna} = (B_n - B_{n-1})e^{qna}. \tag{178}$$

حال مشتق تابع موج را درمحل چاه های پتانسیل بررسی می کنیم. درنقطه $x = na$ داریم:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi'_n(na) - \psi'_{n-1}(na)) - V_0\psi_n(na) = 0. \tag{179}$$

باجایگذاری توابع ψ_n و ψ_{n-1} دراین رابطه بدست می آوریم

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[-qA_ne^{-qna} + qB_ne^{qna} - (-qA_{n-1}e^{-qna} + qB_{n-1}e^{qna})\right] - V_0[A_ne^{-qna} + B_ne^{qna}] = 0 \tag{180}$$

که پس ازمرتب کردن به صورت زیردرمی آید:

$$\left[(q - \frac{2mV_0}{\hbar^2})A_n - qA_{n-1}\right]e^{-qna} + \left[qB_{n-1} - (q + \frac{2mV_0}{\hbar^2})B_n\right]e^{qna} = 0. \tag{181}$$

حال شرط 174 را اعمال می کنیم که براساس آن باید داشته باشیم:

$$\psi_{n+1}(x+a) = e^{i\theta}\psi_n(x), \tag{182}$$

ویا

$$A_{n+1}e^{-q(x+a)} + B_{n+1}e^{q(x+a)} = e^{i\theta}(A_ne^{-qx} + B_ne^{qx}) \qquad \forall\, x \in (na, (n+1)a). \tag{183}$$

ازآنجا که این شرط می بایست برای تمام x های درون بازه فوق برقرارباشد نتیجه می گیریم که بین ضرایب A_n و B_n می بایست رابطه زیربرقرارباشد:

$$A_{n+1}e^{-qa} = e^{i\theta}A_n \qquad B_{n+1}e^{qa} = e^{i\theta}B_n. \tag{184}$$

باتوجه به این شرط رابطه 178 به شکل زیردرمی آید:

$$(e^{-i\theta}e^{-qa} - 1)e^{-qna}A_n = (1 - e^{-i\theta}e^{qa})e^{qna}B_n. \tag{185}$$

هم چنین باتوجه به همین شرط رابطه 186 به شکل زیردرمی آید:

$$e^{-qna}\left[q(1-e^{-qa-i\theta})-\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right]A_n=e^{qna}\left[q(1-e^{qa-i\theta})+\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right]B_n. \tag{186}$$

این دورابطه تنهاوقتی منجر به یک مقدار غیرصفر برای A_n و B_n و درنتیجه یک تابع موج غیرصفر می شوند که دترمینان ماتریس ضرایب برابر با صفرباشد، یعنی :

$$\frac{e^{-qa}-e^{i\theta}}{q(1-e^{-qa-i\theta})-\frac{2mV_0}{\hbar^2}}=-\frac{e^{qa}-e^{i\theta}}{q(1-e^{qa-i\theta})+\frac{2mV_0}{\hbar^2}}. \tag{187}$$

این رابطه پس ازکمی مرتب کردن به صورت ساده زیردرمی آید

$$\cosh qa-\cos\theta=\frac{mV_0}{\hbar^2 q}\sinh qa, \tag{188}$$

ویا

$$\cos\theta=\cosh qa-\frac{mV_0}{\hbar^2 q}\sinh qa. \tag{189}$$

به ازای هرمقدار θ این رابطه مقدار q و درنتیجه انرژی ویژه حالت Ψ را مشخص می کند. برای مطالعه این رابطه بهتراست که متغیر بدون بعدِ y را به صورت $y := qa$ تعریف کنیم. درنتیجه رابطه فوق به صورت زیردرمی آید:

$$\cosh y-\frac{\lambda}{y}\sinh y=\cos\theta. \tag{190}$$

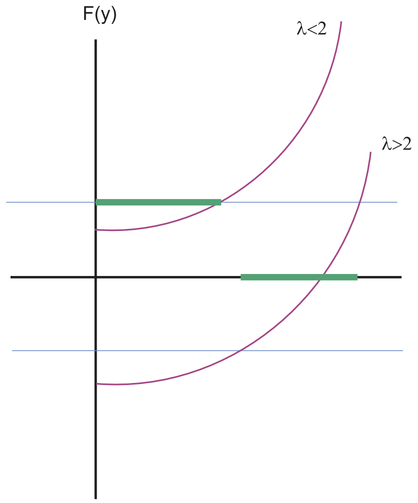
که درآن $\lambda := \frac{mV_0 a}{\hbar^2}$.

باید به یادداشته باشیم که قدرمطلق طرف راست همواره ازیک کوچکتراست. بنابراین قدرمطلق طرف چپ نیز می بایست بین -1 و 1 باشد،یعنی

$$-1\leq\cosh y-\frac{\lambda}{y}\sinh y\leq 1. \tag{191}$$

این رابطه مقادیر مجاز y و درنتیجه مقادیر مجاز q ویاانرژی را تعیین می کند. برای این کار ازروش ترسیمی استفاده می کنیم. تعریف می کنیم

$$f(y):=\cosh y-\frac{\lambda}{y}\sinh y. \tag{192}$$



شکل ٦٢: روش ترسیمی برای بدست آوردن نوارهای انرژی درمدل کرونیگ پنی، توضیح شکل درمتن داده شده است.

با کمی محاسبه معلوم می شود که

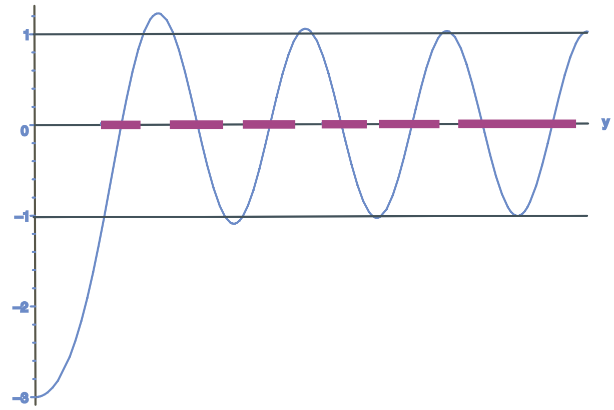
$$f(0) = 1 - \lambda, \qquad f(+\infty) = +\infty \qquad f'(0) = 0, \qquad f''(0) = 1 - \lambda. \tag{193}$$

باتوجه به این اطلاعات می توان حل ترسیمی رابطه 196 را مطابق شکل ٦٢ بدست آورد.
درشکل دیده می شود که برای $\lambda = \frac{mV_0\ a}{\hbar^2} < 2$، یعنی وقتی که عمق ویا پهنای چاه ازیک حد بحرانی کمترباشد، سطوح انرژی از لبه چاه شروع می شوند وبرای $\lambda = \frac{mV_0\ a}{\hbar^2} > 2$، یعنی وقتی که عمق یا پهنای چاه ازیک حدبحرانی بیشتر باشد، سطوح انرژی لبه چاه را پرنمی کنند بلکه از پایین تراز لبه شروع می شوند. درهردوحالت نکته مهم آن است که سطوح انرژی یک نوار تشکیل می شوند. تشکیل نوار مشخصه همه پتانسیل های پریودیک است. درواقع یک مسئله مهم درفیزیک حالت جامد تعیین ساختارنواری یا $Band\ Structure$ یا سطوح انرژی الکترون ها درجامدات است.

حال فرض کنید که پتانسیل به صورت زیرباشد:

$$V(x) = \sum_{n=0}^{N-1} V_0 \delta(x - na). \tag{194}$$

فرق این پتانسیل با پتانسیل قبلی آن است که V_0 را به $-V_0$ تبدیل کرده ایم. می بایست انرژی را نیز مثبت درنظربگیریم. هدف ما یافتن ساختار نواری برای این پتانسیل است. لازم نیست محاسبه جدیدی انجام دهیم کافی است که تبدیل $V_0 \longrightarrow -V_0$ و $E \longrightarrow -E$ ویا $q \longrightarrow iq$ را درمحاسبات قبلی اعمال کنیم. توابع موج درفاصله چاه ها به شکل امواج ایستاده خواهند بود:



شکل ۷۲: روش ترسیمی برای بدست آوردن نوارهای انرژی درمدل کرونیگ پنی، برای وقتی که انرژی مثبت است و بجای چاه پتانسیل سد پتانسیل داریم.

$$\Psi(x) = \begin{cases} \cdots \\ \psi_n(x) = A_n e^{-iqx} + B_n e^{iqx} \qquad na \le x \le (n+1)a, \\ \cdots . \end{cases} \tag{195}$$

نوارهای انرژی نیز ازمعادلات زیربدست می آیند:

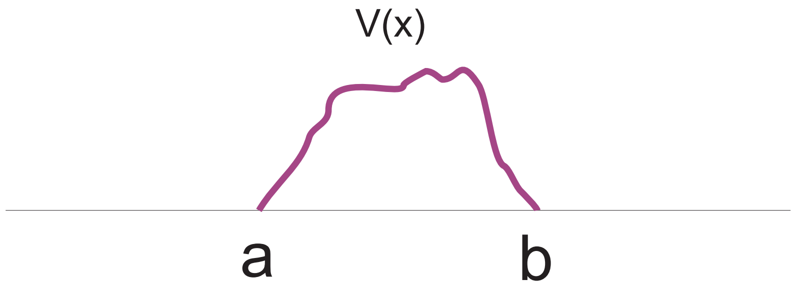
$$-1 \le \cos y - \frac{\lambda}{y} \sin y \le 1. \tag{196}$$

حل ترسیمی این معادلات درشکل ۷۲ نشان داده شده است. دیده می شود که دراین حالت تعداد محدودی نوارانرژی وجود دارد که باافزایش انرژی پهنای آنها زیادتر شده و فاصله آنها بایکدیگر کمتر می شود تاسرانجام طیف به صورت پیوسته درمی آید.

۱۴ مسئله ها

۱ — پتانسیلی در نظر بگیرید که در ناحیه محدودی از محور x مقدار غیر صفر دارد، شکل ۸۲. می دانیم که تابع موج در سمت چپ و راست پتانسیل به صورت زیر است:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \qquad x < a \tag{197}$$



شکل ۸۲: شکل پتانسیل برای مسئله یک.

و

$$\psi(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx} \qquad x > b. \tag{198}$$

هرگاه معادله شرودینگر را حل کنیم به این نتیجه می رسیم که رابطه این ضرایب باهم یک رابطه خطی است که می توان آن را به صورت زیر نوشت:

$$\begin{pmatrix} C \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix}. \tag{199}$$

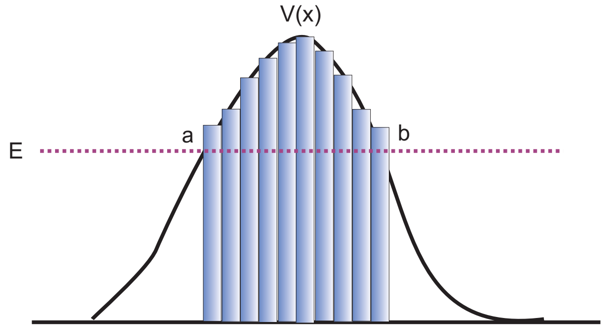
ماتریس S به دلایل واضح ماتریس پراکندگی خوانده می شود. از اصل بقای احتمال استفاده کنید و نشان دهید که روابط زیر برقرارند:

$$\begin{aligned} &|S_{11}|^2 + |S_{21}|^2 = 1 \\ &|S_{12}|^2 + |S_{22}|^2 = 1 \\ &S_{11}S_{12}^* + S_{21}S_{22}^* = 0 \end{aligned} \tag{200}$$

به عبارت دیگر نشان دهید که ماتریس S یک ماتریس یکانی است.

۲ – پتانسیل $V(x) = V_0\delta(x)$ را در نظربگیرید. برای این پتانسیل ماتریس پراکندگی را حساب کنید.

۳ – پتانسیل $V(x) = V_0\delta(x+a) + V_0\delta(x-a)$ را در نظر بگیرید. برای این پتانسیل ماتریس پراکندگی را حساب کنید.



شکل ۹۲: شکل پتانسیل برای مسئله ۴.

۴ – پتانسیل شکل ۹۲ را در نظر بگیرید. پتانسیل $V(x)$ به شکل زیر است:

$$V(x) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mx^2}, \qquad x > R \tag{201}$$

که در آن l یک عدد صحیح است. با استفاده از محاسبه احتمال تونل زنی، طول عمر ذره‌ای را که در درون چاه گیر افتاده است و انرژی $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ دارد تخمین بزنید. نتیجه خود را برحسب پارامتر بدون بعد $\frac{l}{kR}$ بیان کنید.