

a.nemati@ph.iut.ac.ir :

(دریافت مقاله: ۱۳۹۲/۳/۲۵ ؛ پذیرش: ۱۳۹۲/۵/۱۹)

D_6

را نیز مدل سازی کرد. می توان یک شش ضلعی منزوی در نظر گرفت که حل معادله شرودینگر تنها در داخل آن مد نظر باشد. اما اگر قرار باشد تابع موج حلی تحلیلی و خوش رفتار از معادله شرودینگر در صفحه باشد، باید ادامه تحلیلی آن در خارج از محدوده شش ضلعی نیز معنی دار و متضمن تقارن های هندسی سیستم باشد. بنابراین، حتی اگر دستگاه فیزیکی مورد نظر یک شش ضلعی منتظم منزوی باشد، تابع موج در کل صفحه به طور گریز ناپذیر دارای تقارن های انتقالی یک آرایه شش ضلعی است و به عبارت ساده تر، تکرار پذیر است.

به این لحاظ می توان گفت آنچه در این مقاله به طور تحلیلی حل شده است، یافتن کلی ترین حل های معادله شرودینگر در دو بعد است که نمایش های گروه تقارن دی هدرال D_6 باشند. اما اینکه کاربردهای این مسئله کجا است، در یک جمله می توان گفت که در هر مسئله دو بعدی که به نوعی با

حل معادله شرودینگر با شرایط مرزی گوناگون و تحت تقارن های متفاوت، چه از زاویه دید نظری و چه از نگاه کاربردی، موضوعی دیرپا در مکانیک کوانتومی است. به عنوان یک مثال آشنا، تقارن کروی باعث می شود معادله شرودینگر کلاس محدودی از حل ها که شامل هارمونیک های کروی هستند را پذیرا باشد. همچنین حضور پتانسیل های با تقارن دوره ای در این معادله منجر به ایده باندهای انرژی می گردد.

در این مقاله هدف بررسی گروه تقارن های یک شش ضلعی (گروه دی هدرال D_6) و اثر آن بر حل های معادله شرودینگر و طیف حالت ها و انرژی های آن است. مسئله بنا به طبیعت خود دو بعدی است، اما با افزودن یک تقارن پیوسته انتقالی در امتداد عمود بر صفحه شش ضلعی می توان مسایلی سه بعدی، نظیر انتشار تابع موج شرودینگری در یک موجبر با مقطع شش ضلعی

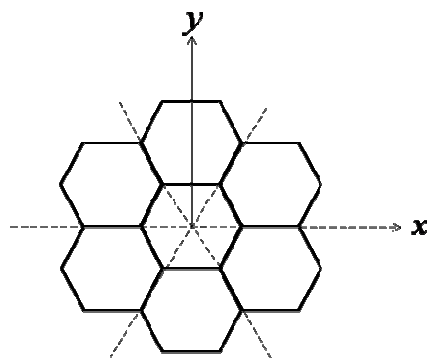
تحلیلی، مثل دایره، چنان دگر دیسی می شود که با شرایط مرزی یک چند ضلعی منتظم تطبیق داده شوند [۱۱]. در اینجا نیز آنچه حاصل می شود شرایط مرزی را ارضاء می کند اما دیگر حل معادله شرودینگر نیست. در مورد دیگری نیز که در متن توضیح داده می شود مؤلفه های تصویری یک تابع تحت عملگرهای گروه تقارن با فازهای دلخواه با هم جمع شده اند [۱۲]، سپس با روش های عددی این فازها را تنظیم کرده اند تا شرط مرزی ارضاء شود. این کار بنا بر نظریه گروه ها درست نیست و ما تنها مجاز هستیم مؤلفه های تصویری یاد شده را با ضرایب معینی با هم ترکیب کنیم تا تابع موج حاصله نمایش گروه تقارن باشد.

در این مقاله، پس از مرور مختصری از گروه تقارنی دی هدرال D_6 ما سعی کرده ایم ابتدا کلی ترین تابع موجی که تقارن های انتقالی سیستم را در بر داشته باشد را در نظر بگیریم و سپس با اعمال عملگرهای تصویر مناسب در نمایش های مختلف، از روی آن تابع موجی را به دست آوریم، که هم حل معادله شرودینگر باشد و هم نمایش گروه تقارنی شش ضلعی. توابعی که به این ترتیب به دست می آیند هرکدام ممکن است برای نوع خاصی از شرایط مرزی (دیریشله، نویمن) روی دیواره ها مناسب باشند که در متن توضیح داده شده است. در پایان مقاله نتایج مورد بحث قرار گرفته اند.

آرایه دوره ای از شش ضلعی منتظم به طول ضلع a را طبق شکل ۱ در نظر می گیریم. پتانسیل درون شش ضلعی ها صفر است. می خواهیم معادله شرودینگر را با شرط دوره ای در چنین آرایه ای حل کنیم. در حالت خاص این شرط دوره ای می تواند شرط مرزی دیریشله یا نویمن باشد.

ابتدا توضیح کوتاهی درباره گروه تقارنی شش ضلعی منتظم می دهیم.

گروه تقارن های یک شش ضلعی منتظم گروه دی هدرال D_6 نام دارد. این گروه ۱۲ عضو دارد که شامل چرخش های $C_6^j = j\pi/3$ با j صحیح از یک تا شش حول مرکز شش



شکل ۱. آرایه دوره ای از شش ضلعی منتظم. خطوط نقطه چین و عمود بر آنها محورهای تقارن شش ضلعی هستند. گروه اعمال تقارنی در بخش ۱.۲ توضیح داده شده است.

تقارن های دستگاه شش ضلعی منتظم سر و کار داشته باشد، از جمله در نانو ساختارهای کوانتومی [۱]، موجبرهای با مقطع شش ضلعی منتظم [۲ و ۳] و بسیاری نمونه های دیگر. البته نکته دیگری که قابل اشاره است، ساختار دو بعدی زیبای گرافین است [۴] که در سال های اخیر به شدت مورد توجه قرار گرفته است و در آن گروه تقارن های شش ضلعی به نحوی دخیل است.

پیش از این مشابه این مسئله برای ذره کوانتومی محصور در یک چاه پتانسیل دو بعدی به شکل مثلث متساوی الاضلاع حل شده است [۵]. استفاده از حل های معادله شرودینگر مستقل از زمان و به طور مشابه معادله هلمهولتز در چنین ساختاری در مراجع [۶ - ۹] مورد توجه قرار گرفته است. که خود انگیزه ای برای در نظر گرفتن مسائل مطرح شده با ساختار شش ضلعی منتظم می باشد.

تلاش های مفصل و زیادی نیز برای تعمیم های دیگر مسئله به سایر چند ضلعی ها صورت گرفته که عمدتاً بر روش های عددی مبتنی است [۱۰ - ۱۲]. اغلب حل های ارائه شده به لحاظ ریاضی قابل خدشه اند. برای مثال در پاره ای موارد حل های معادله شرودینگر برای ذره آزاد چنان با هم ترکیب می شوند که در یک مجموعه متناهی از نقاط مرزی صفر شوند (برای شرط مرزی دیریشله) [۱۰] در این حالت شرط مرزی ارضاء می شود، اما آنچه به دست می آید دیگر حل معادله شرودینگر یعنی تابع موجی با یک ویژه مقدار معین انرژی نیست، بلکه ترکیبی از آنها است. در موارد دیگری حل تحلیلی معادله شرودینگر برای یک مسئله دارای حل

انتقالی در راستاهای x و y که به عنوان شرایط دوره‌ای از آنها یاد می‌کنیم، وجود دارد. بنابراین در قدم اول پاسخ‌هایی از معادله شرویدینگر در فضای آزاد (یعنی امواج تخت) را در نظر می‌گیریم که تقارن‌های انتقالی دستگاه را در بر داشته باشند. این دسته تابع را با نماد $u_{p,q}(x,y)$ معرفی می‌کنیم که p و q دو عدد کوانتومی صحیح هستند. طبق شکل ۱ می‌بینیم که شرایط حفظ تقارن‌های انتقالی توسط تابع موج به این صورت هستند:

$$u_{p,q}(x,y) = u_{p,q}[x+\sqrt{3}a, y] \\ = u_{p,q}[x, y+\sqrt{3}a]. \quad (1)$$

با در نظر گرفتن موج تختی که این شرایط را برآورده می‌کند، $u_{p,q}(x,y)$ را به این صورت پیشنهاد می‌دهیم:

$$u_{p,q}(x,y) = \exp\left[\frac{2\pi i}{a}\left[p\frac{x}{\sqrt{3}} + q\frac{y}{\sqrt{3}}\right]\right]. \quad (2)$$

اکنون به تقارن‌های گروه D_6 می‌پردازیم. ابتدا تابع موجی را به دست می‌آوریم که علاوه بر انتقال‌ها تحت چرخش‌ها نیز ناوردا باشد. این تابع را $v_{p,q}(x,y)$ می‌نامیم و آن را به این صورت پیشنهاد می‌دهیم:

$$v_{p,q}(x,y) = \sum_{j=1}^6 c_{\epsilon}^j u_{p,q}(x,y), \quad (3)$$

که در آن اثر عملگر c_{ϵ}^j متناظر با چرخش $j\pi/3$ روی یک تابع دلخواه $u_{p,q}(x,y)$ را به صورت زیر معرفی می‌کنیم

$$c_{\epsilon}^j u_{p,q}(x,y) = u_{p,q}((c_{\epsilon}^j)^{-1}(x,y)) \equiv u_{p_j, q_j}(x,y). \quad (4)$$

در اینجا اعداد کوانتومی p_j و q_j را متناظر با چرخش‌های $j\pi/3$ تعریف کرده‌ایم. می‌توان رابطه (۴) را به شکل زیر نیز نوشت

$$u_{p_j, q_j}(c_{\epsilon}^j(x,y)) = u_{p,q}(x,y); j=1,2,\dots,6 \quad (5)$$

منظور از عملگر c_{ϵ}^j وقتی که روی بردار (x,y) در شناسه تابع $u_{p,q}$ (در روابط (۴) و (۵)) اثر می‌کند، اثر ماتریس چرخش $j\pi/3$ در فضای دو بعدی (x,y) است، مثلاً $c_{\epsilon}^1(x,y) = (x/2 + \sqrt{3}y/2, -\sqrt{3}x/2 + y/2)$ با قرار دادن توابع $u_{p,q}(x,y)$ از رابطه (۲) در رابطه (۵) اعداد کوانتومی p_j و

ضلعی، بازتاب‌های $\sigma_{1d}, \sigma_{2d}, \sigma_{3d}$ نسبت به قطرهای و بازتاب‌های $\sigma_{1v}, \sigma_{2v}, \sigma_{3v}$ نسبت به عمود منصف اضلاع است. در این نماد گذاری چرخش‌های $2\pi/n$ حول مبدأ را با C_n ، بازتاب نسبت به قطرهای را با σ_d و بازتاب نسبت به عمود منصف اضلاع را با σ_v نشان داده‌ایم. همچنین نماد C_k^n نشان دهنده چرخش به اندازه $2\pi n/k$ برای n و k صحیح است. نمایش‌های یک بعدی که نسبت به چرخش‌ها متقارن هستند را با A و نمایش‌های پادمقارن را با B نشان می‌دهیم. همچنین نمایش‌های کاهش ناپذیر دو بعدی را با E نشان می‌دهیم. با در نظر گرفتن یک عنصر چرخش و یک عنصر بازتاب به عنوان مولدهای گروه می‌توان تمامی عناصر گروه را با استفاده از حاصل ضرب‌های آنها بازنویسی کرد به این صورت که $D_6 = \{(\sigma_{1d})^n (c_{\epsilon}^j)^j; n=0,1; j=1,\dots,6\}$ که در اینجا بازتاب نسبت به محور x و چرخش 60° درجه حول مبدأ را به عنوان دو مولد در نظر گرفته‌ایم. حاصل ضرب دو عمل چرخشی و همین طور حاصل ضرب دو عمل بازتاب یک عنصر چرخشی است در حالی که حاصل ضرب اعمال چرخشی و بازتابی یک عنصر بازتاب است. برای این گروه تقارنی ۶ کلاس هم ارزی به این ترتیب وجود دارد

$$E \equiv \{e\}, \\ 3\sigma_d \equiv \{\sigma_{1d}, \sigma_{2d}, \sigma_{3d}\}, \\ 2\sigma_v \equiv \{\sigma_{1v}, \sigma_{2v}, \sigma_{3v}\}, \\ C_6 \equiv \{c_{\epsilon}^3\}, \\ 2C_3 \equiv \{c_{\epsilon}^2, c_{\epsilon}^4\}, \\ 2C_2 \equiv \{c_{\epsilon}^1, c_{\epsilon}^5\},$$

که در آن کلاس عناصر چرخشی (بازتابی) با نماد $(N\sigma)NC_n$ نشان داده شده‌اند و N تعداد عناصر در کلاس مربوطه است. بنابر قضایای متعارف در نظریه نمایش‌های گروه‌های محدود [۱۳]، این گروه تقارنی ۴ نمایش یک بعدی و ۲ نمایش دوبعدی کاهش ناپذیر به نام‌های A_1, A_2, B_1, B_2, E_1 و E_2 دارد. مشخصات گروه تقارنی D_6 در جدول ۱ آمده است [۱۴].

همان طور که در شکل ۱ دیده می‌شود در این آرایه دو تقارن

جدول ۱. جدول مشخصه گروه تقارنی D_6 .

D_6	E	C_2	σ_C	σ_C	σ_V	σ_D
A_1	۱	۱	۱	۱	۱	۱
A_2	۱	۱	۱	۱	-۱	-۱
B_1	۱	-۱	۱	-۱	۱	-۱
B_2	۱	-۱	۱	-۱	-۱	۱
E_1	۲	-۲	-۱	۱	۰	۰
E_2	۲	۲	-۱	-۱	۰	۰

جدول ۲. تعیین اعداد کوانتومی p_j و q_j .

چرخش 60° درجه حول مبدأ	$\nu p_1 = p + 2q, \nu q_1 = -p + q$
چرخش 120° درجه حول مبدأ	$\nu p_2 = -p + 2q, \nu q_2 = -p - q$
چرخش 180° درجه حول مبدأ	$p_3 = -p, q_3 = -q$
چرخش 240° درجه حول مبدأ	$\nu p_4 = -p - 2q, \nu q_4 = p - q$
چرخش 300° درجه حول مبدأ	$\nu p_5 = p - 2q, \nu q_5 = p + q$

q_j مطابق جدول ۲ به دست می‌آیند.

بنابراین تابع موج $\nu_{p,q}(x,y)$ از رابطه زیر به دست می‌آید که در آن اعداد کوانتومی (p_j, q_j) مطابق جدول ۲ است،

$$\nu_{p,q}(x,y) = \sum_{j=1}^6 \exp\left[\frac{2\pi i}{a}(p_j x/3 + q_j y/\sqrt{3})\right]. \quad (6)$$

نکته مهمی که وجود دارد این است که برای اینکه تابع موج، شرط تناوب را طبق آنچه در رابطه (۱) بیان شد ارضا کند باید تمامی اعداد کوانتومی معرفی شده اعداد صحیح باشند. بنابراین طبق جدول ۲، دو عدد کوانتومی p و q هر دو باید عدد صحیح زوج یا هر دو عدد صحیح فرد باشند. همچنین می‌بینیم که اعداد به دست آمده دو به دو قرینه هم هستند، یعنی

$$\begin{cases} p = -p_3 \\ q = -q_3 \end{cases}, \begin{cases} p_1 = -p_4 \\ q_1 = -q_4 \end{cases}, \begin{cases} p_2 = -p_5 \\ q_2 = -q_5 \end{cases} \quad (7)$$

به این مفهوم که اعداد کوانتومی متناظر با چرخش‌هایی که 180° درجه با یکدیگر تفاوت دارند، قرینه همدیگرند.

حال نوبت به این می‌رسد که ناوردایی تابع موج تحت تقارن‌های بازتابی را نیز اعمال کنیم. برای این کار کافی است که یکی از بازتاب‌ها، مثلاً σ_D را در نظر بگیریم که نحوه اثر آن به صورت $\sigma_D(x,y) = (x,-y)$ است. دلیل این امر آن است که اعضای دوازده گانه گروه D_6 با ضرب کردن فقط یک بازتاب، مثلاً σ_D ، در شش چرخش که نتیجه آن شش عنصر بازتاب است به همراه شش عنصر چرخش به دست می‌آید. بنابراین کافی است تابع $\nu_{p,q}(x,y)$ در رابطه (۶) که در آن ناوردایی تحت چرخش‌ها لحاظ شده است را با اثر انعکاس σ_D روی آن جمع کنیم تا تابع موج نهایی $\psi_{p,q}(x,y)$ به

دست آید، که تحت انتقال‌های دوره‌ای تمام اعضای گروه D_6 ناورد است. داریم

$$\begin{aligned} \psi_{p,q}(x,y) &= \nu_{p,q}(x,y) + \nu_{p,q}(x,-y) \\ &= \nu_{p,q}(x,y) + \nu_{p,-q}(x,y), \end{aligned} \quad (8)$$

با قرار دادن تابع موج در معادله شرودینگر ویژه مقادیر انرژی از رابطه زیر به دست می‌آیند

$$E = \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \left(\frac{(2\pi)^2}{3a^2}\right) \left(\frac{p^2}{3} + q^2\right). \quad (9)$$

در این رابطه، دو عدد کوانتومی (p,q) هر دو عدد صحیح زوج یا هر دو عدد صحیح فرد هستند.

در این بخش تابع موجی را بنا کردیم که تحت تقارن‌های انتقالی، دورانی و انعکاسی آرایه شش بعدی ناورد باشد. اما نکته مهم این است که حل‌های معادله شرودینگر در حضور یک تقارن مشخص، محدود به حل ناورد تحت گروه تقارن نیست. مثال آشنای این امر معادله شرودینگر برای پتانسیل دارای تقارن کروی است. در این حالت تنها حالت‌های s تحت دوران ناورد هستند. حل‌های دیگر سازگار با تقارن، در نمایش‌های دیگر کاهش ناپذیر گروه دوران طبقه بندی می‌شوند.

در مسئله حاضر باید متناظر با کلیه نمایش‌های کاهش ناپذیر گروه D_6 ، توابع موجی را یافت که تحت اثر اعضای گروه D_6 مشابه نمایش مورد نظر تبدیل شوند. ابزار ریاضی این کار در چارچوب نظریه گروه‌ها، استفاده از عملگرهای تصویر است که در بخش بعد توضیح داده خواهد شد. تابع موج ناوردایی که در این قسمت معرفی شد متناظر با نمایش بدیهی است که به تمام اعضای گروه عدد ۱ را نسبت می‌دهد. نتیجه

ماتریسی کاهش ناپذیر مربوط به عنصر g در نمایش کاهش ناپذیر μ است، که در نمایش‌های یک بعدی همان مشخصه عناصر می‌باشد. n_μ بعد نمایش μ و n_G تعداد عناصر گروه است.

به این ترتیب در هر نمایش کاهش ناپذیر عملگر تصویر را می‌نویسیم و با اثر دادن آن روی تابع پایه $u_{p,q}(x,y)$ ، تابع موج را به دست می‌آوریم. سپس با اعمال شرایط مرزی دیریشله و نویمن، مجموعه محدودتری از اعداد کوانتومی خواهیم یافت، به گونه‌ای که این شرایط را ارضا کنند.

A_1

با توجه به جدول ۱ می‌بینیم که در این نمایش، مشخصه تمامی عناصر $+1$ است. بنابراین ضرایب $D_\mu^{-1}(g)_i^j$ برای ۱۲ عنصر گروه تقارنی $+1$ خواهد بود. با صرف نظر کردن از ضریب کلی (n_μ/n_G) در رابطه (۱۰) عملگر تصویر به صورت زیر خواهد بود:

$$p(A_1) = E + c_x^+ + c_x^- + c_y^+ + c_y^- + c_z^+ + c_z^- + \sigma_{xd} + \sigma_{yd} + \sigma_{zd} + \sigma_{xy} + \sigma_{yz} + \sigma_{zx}. \quad (11)$$

با اثر دادن این عملگر روی تابع پایه $u_{p,q}(x,y)$ ، استفاده از رابطه (۷) و کمی ساده سازی، تابع موج نهایی به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} \frac{\psi_{p,q}^{(A_1)}(x,y)}{\psi} = & \cos\left[\frac{\sqrt{2}\pi}{a}\left(\frac{p}{2}\frac{x}{\sqrt{3}}\right)\right] \cos\left[\frac{\sqrt{2}\pi}{a}\left(q\frac{y}{\sqrt{3}}\right)\right] \\ & + \cos\left[\frac{\sqrt{2}\pi}{a}\left(\frac{p+\sqrt{3}q}{2}\frac{x}{\sqrt{3}}\right)\right] \cos\left[\frac{\sqrt{2}\pi}{a}\left(\frac{-p+q}{2}\frac{y}{\sqrt{3}}\right)\right] \\ & + \cos\left[\frac{\sqrt{2}\pi}{a}\left(\frac{-p+\sqrt{3}q}{2}\frac{x}{\sqrt{3}}\right)\right] \cos\left[\frac{\sqrt{2}\pi}{a}\left(\frac{p+q}{2}\frac{y}{\sqrt{3}}\right)\right]. \end{aligned} \quad (12)$$

تابع موج در این نمایش، حقیقی محض است. با دقت در روند این محاسبه دیده می‌شود که تابع موجی که در رابطه (۸) در بخش قبل به دست آمد، تابع موج مربوط به نمایش کاهش ناپذیر A_1 است؛ زیرا ضریب فازی برای تمامی عناصر $+1$ در نظر گرفته شد.

برای برقراری رابطه (۱)، دو عدد کوانتومی p و q هر دو باید عدد صحیح زوج یا فرد باشند. برای اینکه به شرط مرزی نویمن روی مرزهای شش ضلعی دست یابیم، باید یکی از این روابط برقرار باشد: $p=0$ و q زوج، $q=0$ و p زوج، $p=\pm q$ و یا $p=\pm 3q$.

کار تابع موج $\psi_{p,q}(x,y)$ است که از جمع کردن اثر اعضای گروه (با ضرایب یکسان واحد) روی $u_{p,q}(x,y)$ به دست آمد. برای سایر نمایش‌های یک بعدی به جای عدد یک باید مشخصه عنصر مورد نظر در نمایش مربوطه را در $u_{p,q}(x,y)$ ضرب کرده و حاصل را با هم جمع کرد. در نمایش‌های دو بعدی نیز باید توابع موج دو مؤلفه‌ای را در نظر گرفت و متناظر با هر عضو گروه، دوگانه مورد نظر را در ماتریس مشخصی ضرب کرد. این توضیحات را در نقد روش عددی مرجع [۱۲] آورده‌ایم که در آن آرایه‌ای از شش ضلعی‌ها با در نظر گرفتن تنها تقارن‌های چرخشی بررسی شده و اثرات عناصر چرخشی روی یک تابع موج $u_{p,q}(x,y)$ با فازهای متنوع با هم جمع شده‌اند. سپس به کمک روش‌های عددی تلاش شده که این فازها به نحوی تنظیم شوند که تابع موج حاصل در بیشترین نقاط ممکن روی مرز شرط مرزی دیریشله را برآورده کند. اما نتیجه جالب آن است که در نهایت نویسندگان نتیجه گرفته‌اند که برقراری کامل این شرط امکان پذیر نیست! اساسی‌ترین نقد به این روش آن است که اصولاً ضرب فازهای دلخواه در جملاتی که در ساختن تابع موج وارد می‌شوند مجاز نیست و این فازها (یا عملگرها در نمایش‌های دو بعدی) باید طوری تنظیم شوند که تابع موج حاصل، نمایش گروه باشد.

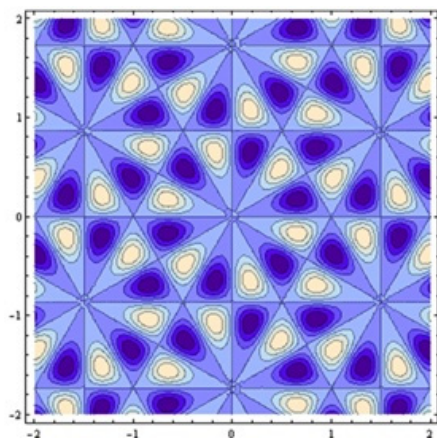
در بخش بعد ما این کار را برای یک به یک نمایش‌های کاهش ناپذیر گروه D_6 انجام خواهیم داد. سپس بررسی خواهیم کرد که کدام نوع شرایط مرزی (دیریشله یا نویمن) با نمایش مورد نظر سازگار است.

D_6

برای به دست آوردن تابع موج به طوری که به صورت کاهش ناپذیر طبق نمایش μ تبدیل شود، از عملگر تصویر استفاده می‌کنیم [۱۳]

$$P_{\mu i}^j = (n_\mu/n_G) \sum_g D_\mu^{-1}(g)_i^j U(g). \quad (10)$$

در این رابطه $U(g)$ نمایشی از گروه G بر روی فضای برداری مورد نظر است، که در اینجا فضای توابع است. $D_\mu(g)$ نمایش



شکل ۳. تابع $\psi_{1,3}$ در نمایش A_4 با انرژی $E = \frac{28}{3} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \left(\frac{(2\pi)^2}{3a^2} \right)$

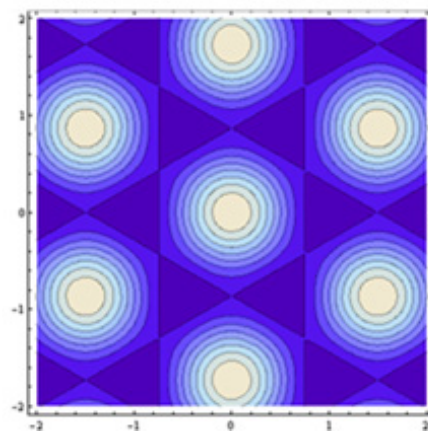
برای آرایه شش ضلعی به طول ضلع واحد رسم شده است. رنگ روشن نشان دهنده بزرگترین مقدار مثبت است و با تیره شدن مقدار منفی می شود. شرط مرزی دیریشله روی آرایه شش ضلعی به طول ضلع واحد برقرار است.

با انجام محاسباتی همچون آنچه در نمایش واحد انجام شد، تابع موج حقیقی به صورت زیر به دست می آید

$$\begin{aligned} \frac{\psi_{p,q}^{(A_4)}(x,y)}{4} = & -\sin\left[\frac{2\pi}{a}\left(\frac{p}{3}x\right)\right] \sin\left[\frac{2\pi}{a}\left(q\frac{y}{\sqrt{3}}\right)\right] \\ & -\sin\left[\frac{2\pi}{a}\left(\frac{p+2q}{2}\frac{x}{3}\right)\right] \sin\left[\frac{2\pi}{a}\left(\frac{-p+q}{2}\frac{y}{\sqrt{3}}\right)\right] \\ & +\sin\left[\frac{2\pi}{a}\left(\frac{-p+2q}{2}\frac{x}{3}\right)\right] \sin\left[\frac{2\pi}{a}\left(\frac{p+q}{2}\frac{y}{\sqrt{3}}\right)\right]. \end{aligned} \quad (14)$$

در صورتی که یکی از شرایط $p = \pm q$ ، $q = 0$ ، $p = 0$ یا $p = \pm 3q$ برقرار باشند، تابع موج به طور کلی صفر خواهد بود. در غیر این صورت هنگامی که هر دو عدد کوانتومی p و q عدد صحیح زوج یا فردی باشند که از این روابط پیروی نمی کنند، شرط مرزی دیریشله را روی مرز شش ضلعی برآورده می کنند.

تابع $\psi_{1,3}$ در شکل ۳ رسم شده است. تغییر رنگ از تیره به روشن نشان دهنده تغییر علامت تابع موج و ارضای شرط مرزی دیریشله می باشد. همان طور که در این شکل دیده می شود علامت تابع موج تحت ۶ عمل بازتاب تغییر می کند، اما تحت ۶ عمل چرخش ثابت است که مطابق با مشخصه این عناصر در جدول ۱ است.



شکل ۲. اندازه تابع موج $\psi_{1,-1}$ در نمایش A_4 با انرژی

$$E = \frac{4}{3} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \left(\frac{(2\pi)^2}{3a^2} \right)$$

رسم شده است. رنگ روشن نشان دهنده بزرگترین مقدار مثبت است و با تیره شدن مقدار منفی می شود. شرط مرزی نویمان روی آرایه شش ضلعی که رأس هایش در مرکز مثلثها قرار دارد، برقرار می باشد.

تابع $\psi_{1,-1}$ در شکل ۲ رسم شده است. مقدار بیشینه تابع موج در مرکز شش ضلعی (مبدأ مختصات) رخ می دهد و از آنجا طی یک کاهش یکنوا به مقدار کمینه اش در مرکز مثلث می رسد. رنگ روشن نشان دهنده بزرگترین مقدار مثبت است و با تیره شدن مقدار تابع موج منفی می شود. به این ترتیب شرط مرزی نویمان روی شش ضلعی که رأس هایش در مرکز مثلثها قرار دارد، برقرار می باشد.

همان طور که در شکل دیده می شود تابع موج تحت اثر اعمال تقارنی شش ضلعی شامل چرخش و بازتاب تغییر علامت نمی دهد به این دلیل که در نمایش A_4 مشخصه تمامی عناصر +۱ است.

A_4

با توجه به جدول ۱ می بینیم که در این نمایش مشخصه عناصر چرخش +۱ است و مشخصه عناصر بازتاب -۱ می باشد بنابراین عملگر تصویر در این نمایش به صورت زیر است:

$$\begin{aligned} p(A_4) = & E + c_6 + c_6^2 + c_6^3 + c_6^4 + c_6^5 - \sigma_{1d} - \sigma_{2d} \\ & - \sigma_{3d} - \sigma_{1v} - \sigma_{2v} - \sigma_{3v} \end{aligned} \quad (13)$$

می‌شود که تابع موج تحت ۳ عمل چرخش و ۳ عمل بازتاب که در جدول ۱ در نمایش B_1 مشخصه منفی دارند تغییر علامت می‌دهد، اما تحت ۶ عمل دیگر با مشخصه $+1$ علامت آن ثابت است.

B_7

با توجه به جدول ۱ می‌بینیم که در این نمایش مشخصه عناصر چرخش 120° درجه و 240° درجه و ۳ عمل بازتاب نسبت به قطره‌های شش ضلعی $+1$ است و مشخصه ۶ عنصر دیگر -1 می‌باشد. بنابراین عملگر تصویر در این نمایش به صورت زیر است:

$$p(B_7) = E - c_6 + c_6^2 - c_6^3 + c_6^4 - c_6^5 + \sigma_{1d} + \sigma_{2d} + \sigma_{3d} - \sigma_{1v} - \sigma_{2v} - \sigma_{3v} \quad (17)$$

با انجام محاسبات، تابع موج در این نمایش به صورت زیر به دست می‌آید:

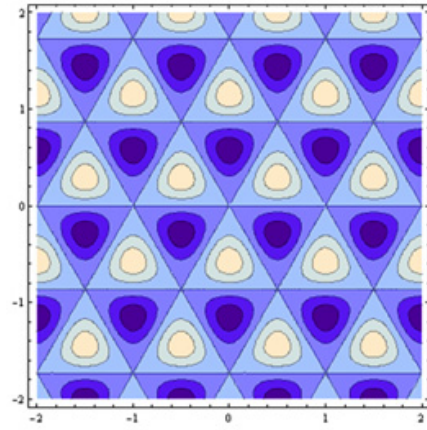
$$\frac{\psi_{p,q}^{(B_7)}(x,y)}{\psi_i} = \sin\left[\frac{2\pi}{a}\left(p\frac{x}{3}\right)\right] \cos\left[\frac{2\pi}{a}\left(q\frac{y}{\sqrt{3}}\right)\right] - \sin\left[\frac{2\pi}{a}\left(\frac{p+2q}{2}\frac{x}{3}\right)\right] \cos\left[\frac{2\pi}{a}\left(\frac{-p+q}{2}\frac{y}{\sqrt{3}}\right)\right] + \sin\left[\frac{2\pi}{a}\left(\frac{-p+2q}{2}\frac{x}{3}\right)\right] \cos\left[\frac{2\pi}{a}\left(\frac{p+q}{2}\frac{y}{\sqrt{3}}\right)\right] \quad (18)$$

در صورتی که $p=0$ یا $q=0$ یا $p=\pm 3q$ باشد، تابع موج به طور کلی صفر خواهد بود. اما شرط مرزی نویمن با برقراری $p=\pm q$ روی مرزهای شش ضلعی که رأس‌هایش در مرکز مثلث‌ها قرار دارد، برآورده می‌شود.

تابع $\psi_{1,-1}$ در شکل ۵ رسم شده است و مطابقت رفتار علامت تابع موج تحت عمل‌های تقارنی با مشخصه عناصر در جدول ۱ را می‌توان دید.

E_1

در نمایش‌های دو بعدی به منظور اجتناب از دشواری کار با ماتریس‌های دو بعدی از فضای مختلط استفاده می‌کنیم. به این منظور به x عدد ۱ و به y عدد موهومی i را نسبت می‌دهیم. بنابراین متغیر $c_1x + c_2y$ به $c_1 + c_2i$ تبدیل می‌شود. این عبارت را به صورت یک ماتریس ستونی که مؤلفه اول آن بخش



شکل ۴. تابع $\psi_{0,2}$ در نمایش B_1 با انرژی $E = 4 \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \left(\frac{2\pi}{3a} \right)^2$ برای آرایه شش ضلعی به طول ضلع واحد رسم شده است. رنگ روشن نشان دهنده بزرگ‌ترین مقدار مثبت است و با تیره شدن مقدار منفی می‌شود. شرط مرزی دیریشله روی آرایه شش ضلعی به طول ضلع واحد برقرار است.

B_1

با توجه به جدول ۱ می‌بینیم که در این نمایش مشخصه عناصر چرخش 120° درجه و 240° درجه و ۳ عمل بازتاب نسبت به عمود منصف اضلاع $+1$ است و مشخصه ۶ عنصر دیگر -1 می‌باشد. بنابراین عملگر تصویر در این نمایش به صورت زیر است:

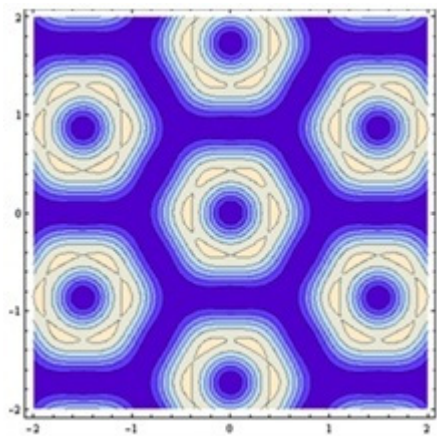
$$p(B_1) = E - c_6 + c_6^2 - c_6^3 + c_6^4 - c_6^5 - \sigma_{1d} - \sigma_{2d} - \sigma_{3d} + \sigma_{1v} + \sigma_{2v} + \sigma_{3v} \quad (15)$$

و تابع موج در این نمایش مطابق نتیجه زیر موهومی محض می‌باشد:

$$\frac{\psi_{p,q}^{(B_1)}(x,y)}{\psi_i} = \cos\left[\frac{2\pi}{a}\left(p\frac{x}{3}\right)\right] \sin\left[\frac{2\pi}{a}\left(q\frac{y}{\sqrt{3}}\right)\right] - \cos\left[\frac{2\pi}{a}\left(\frac{p+2q}{2}\frac{x}{3}\right)\right] \sin\left[\frac{2\pi}{a}\left(\frac{-p+q}{2}\frac{y}{\sqrt{3}}\right)\right] - \cos\left[\frac{2\pi}{a}\left(\frac{-p+2q}{2}\frac{x}{3}\right)\right] \sin\left[\frac{2\pi}{a}\left(\frac{p+q}{2}\frac{y}{\sqrt{3}}\right)\right] \quad (16)$$

این تابع موج در صورتی که $p=\pm q$ باشد، صفر خواهد بود و در صورتی که p و q هر دو عدد صحیح زوج یا فرد باشند، تابع موج شرط مرزی دیریشله را روی مرزهای شش ضلعی ارضاء می‌کند.

تابع $\psi_{0,2}$ در شکل ۴ رسم شده است. در شکل دیده



شکل ۶. اندازه تابع مختلط $\psi_{1,-1}$ در نمایش E_1 با انرژی

$$E = \frac{4}{3} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \left(\frac{(2\pi)^2}{3a^2} \right)$$

رسم شده است. رنگ روشن نشان دهنده بزرگترین مقدار مثبت است و با تیره شدن اندازه تابع کاهش می‌یابد. تابع موج در این نمایش تنها شرط دوره‌ای را برآورده می‌کند.

$$+ 2\sqrt{3} \sin \left[\frac{2\pi}{a} \left(\frac{-p+2q}{2} \frac{x}{3} \right) \right] \cos \left[\frac{2\pi}{a} \left(\frac{-p-q}{2} \frac{y}{\sqrt{3}} \right) \right]. \quad (20)$$

در این نمایش، هیچ کدام از شرایط مرزی دیریشله و نویمن روی مرز شش ضلعی ارضا نمی‌شوند اما تابع موج تناوب را در راستاهای تقارنی حفظ می‌کند که در شکل ۶ می‌توان دید.

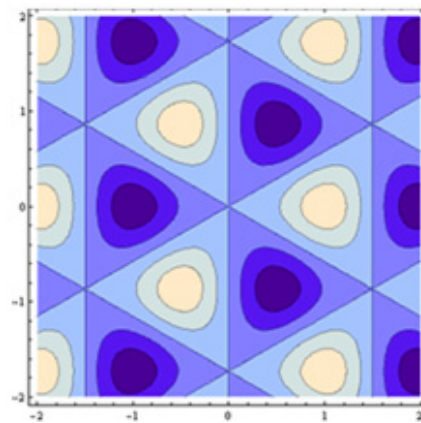
$$E_7$$

در این نمایش، محاسبات همچون نمایش دو بعدی پیشین انجام می‌شود. عملگر تصویر در این نمایش به صورت زیر است:

$$p(E_7) = E + \varepsilon^* c_\phi + \varepsilon c_\phi^* + c_\phi^* + \varepsilon^* c_\phi^* + \varepsilon c_\phi^0 + \sigma_{\phi d} \eta + \varepsilon \sigma_{\phi d} \eta + \varepsilon^* \sigma_{\phi d} \eta + \varepsilon^* \sigma_{\phi v} \eta + \sigma_{\phi v} \eta + \varepsilon \sigma_{\phi v} \eta \quad (21)$$

و تابع موج به صورت رابطه (۲۲) خواهد بود.

مانند قبل، تابع موج به دست آمده مختلط است و به هیچ صورتی، شرایط مرزی دیریشله و نویمن روی آرایه شش ضلعی در شکل ۱ ارضا نمی‌شوند، اما تابع موج، تناوب را در راستاهای تقارنی حفظ می‌کند. این نکته را می‌توان در شکل ۷ دید.



شکل ۵. اندازه تابع موج $\psi_{1,-1}$ در نمایش B_7 با انرژی

$$E = \frac{4}{3} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \left(\frac{(2\pi)^2}{3a^2} \right)$$

رسم شده است. رنگ روشن نشان دهنده بزرگترین مقدار مثبت است و با تیره شدن مقدار منفی می‌شود. شرط مرزی نویمن روی آرایه شش ضلعی که راس‌هایش در مرکز مثلث‌ها قرار دارد، برقرار می‌باشد.

حقیقی و مؤلفه دوم آن بخش موهومی است می‌نویسیم و نمایش ماتریسی عناصر در این نمایش کاهش ناپذیر را روی این بردار ستونی اعمال می‌کنیم. در این صورت تأثیر تمامی ۱۲ ماتریس را می‌توان به صورت ترکیب‌هایی از عملگر $\varepsilon = \exp(2\pi i/3)$ و عملگر مزدوج مختلط کننده η نوشت. به این ترتیب عملگر تصویر در رابطه (۱۰) به صورت زیر به دست می‌آید [۱۴].

$$p(E_1) = E - \varepsilon c_\phi + \varepsilon^* c_\phi^* - c_\phi^* + \varepsilon c_\phi^* - \varepsilon^* c_\phi^0 + \varepsilon \sigma_{\phi d} \eta + \sigma_{\phi d} \eta + \varepsilon^* \sigma_{\phi d} \eta - \varepsilon^* \sigma_{\phi v} \eta - \varepsilon \sigma_{\phi v} \eta - \sigma_{\phi v} \eta. \quad (19)$$

با تأثیر این عملگر روی تابع $u_{p,q}(x,y)$ تابع موج در این نمایش که یک تابع مختلط است به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} \psi_{p,q}^{E_1}(x,y) = & \varepsilon i \cos \left[\frac{2\pi}{a} \left(\frac{p}{2} \frac{x}{3} \right) \right] \sin \left[\frac{2\pi}{a} \left(q \frac{y}{\sqrt{3}} \right) \right] \\ & + \varepsilon i \cos \left[\frac{2\pi}{a} \left(\frac{p+2q}{2} \frac{x}{3} \right) \right] \sin \left[\frac{2\pi}{a} \left(\frac{-p+q}{2} \frac{y}{\sqrt{3}} \right) \right] \\ & - \varepsilon i \cos \left[\frac{2\pi}{a} \left(\frac{-p+2q}{2} \frac{x}{3} \right) \right] \sin \left[\frac{2\pi}{a} \left(\frac{-p-q}{2} \frac{y}{\sqrt{3}} \right) \right] \\ & + 2\sqrt{3} \sin \left[\frac{2\pi}{a} \left(\frac{p+2q}{2} \frac{x}{3} \right) \right] \cos \left[\frac{2\pi}{a} \left(\frac{-p+q}{2} \frac{y}{\sqrt{3}} \right) \right] \end{aligned}$$

عدد صحیح زوج یا هردو عدد صحیح فرد باشند.

شرایط مرزی دیریشله یا نویمن روی آرایه شش ضلعی در شکل ۱، محدودیت‌های دیگری علاوه بر شرطی که تقارن دوره‌ای ایجاد می‌کند را روی اعداد کوانتومی p و q می‌گذارد که در مورد هر یک از نمایش‌ها به شرح زیر است:

۱. نمایش A_1 : شرط مرزی نویمن: یکی از شرایط $p = 0$ و $q = 0$ زوج، $p = \pm q$ زوج، یا $p = \pm 3q$ برقرار شود.

شرط مرزی دیریشله: روی آرایه شش ضلعی ارضاء نمی‌شود.

۲. نمایش A_2 : شرط مرزی نویمن: روی آرایه شش ضلعی ارضاء نمی‌شود. شرط مرزی دیریشله: شرایط $p, q \neq 0$ ، $p \neq \pm q$ و $p \neq \pm 3q$ برقرار باشند.

۳. نمایش B_1 : شرط مرزی نویمن: روی آرایه شش ضلعی ارضاء نمی‌شود. شرط مرزی دیریشله: رابطه $p \neq \pm q$ برقرار باشد.

۴. نمایش B_2 : شرط مرزی نویمن: شرط $p = \pm q$ که $p, q \neq 0$ هستند، برقرار باشد. شرط مرزی دیریشله: روی آرایه شش ضلعی ارضاء نمی‌شود.

۵. نمایش‌های دو بعدی E_1 و E_2 : هیچ کدام از دو شرط مرزی دیریشله و نویمن را ارضاء نمی‌کنند. حالت پایه برای ذره محصور در آرایه شش ضلعی با شرط مرزی دیریشله در نمایش کاهش ناپذیر B_1 در ویژه حالت ($p = 0, q = 2$)

با ویژه مقدار انرژی $E = \frac{4}{3} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \left(\frac{(2\pi)^2}{3a^2} \right)$ و برای شرط

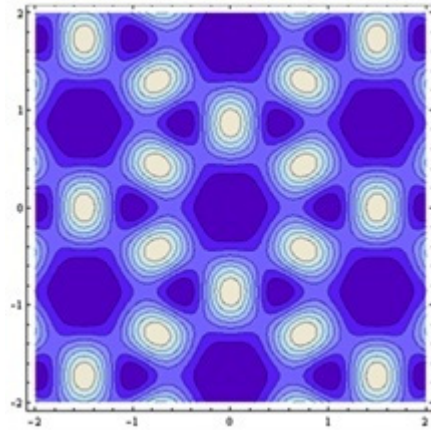
مرزی نویمن ویژه حالت ($p = 1, q = -1$) در دو نمایش کاهش ناپذیر A_1 و B_2 با ویژه مقدار انرژی

$$E = \frac{4}{3} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \left(\frac{(2\pi)^2}{3a^2} \right) \quad (\text{حالت پایه تبهگن}) \text{ می‌باشد.}$$

در بحث تبهگنی ویژه توابع، می‌توان مشابه با نامگذاری

مرجع [۵] برای مثلث به دو نوع تبهگنی اشاره کرد:

الف: تبهگنی که به دلیل تقارن هندسی ساختار ایجاد می‌شود و به نام تبهگنی روش مند^۱ شناخته می‌شود. در این نوع تبهگنی باید به حالت (p, q) توجه کرد که در چند نمایش متفاوت مجاز است. در این صورت یک حالت (p, q) با چندین تابع



شکل ۷. اندازه تابع $\psi_{p,q}$ در نمایش E_2 با انرژی

$$E = \frac{4}{3} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \left(\frac{(2\pi)^2}{3a^2} \right)$$

رسم شده است. رنگ روشن نشان دهنده بزرگترین مقدار است و با تیره شدن اندازه تابع کاهش می‌یابد. تابع موج در این نمایش تنها شرط دوره‌ای را برآورده می‌کند.

$$\begin{aligned} \psi_{p,q}^{E_2}(x,y) = & -2(1+i\sqrt{3}) \cos \left[\frac{2\pi}{a} \left(\frac{p+3q}{2} \frac{x}{3} \right) \right] \\ & \times \cos \left[\frac{2\pi}{a} \left(\frac{-p+q}{2} \frac{y}{\sqrt{3}} \right) \right] + (-1+i\sqrt{3}) \\ & \times \left(\cos \left[\frac{2\pi}{a} \left(\frac{-p+3q}{2} \frac{x}{3} - \frac{p+q}{2} \frac{y}{\sqrt{3}} \right) \right] \right. \\ & \left. + \cos \left[\frac{2\pi}{a} \left(p \frac{x}{3} - q \frac{y}{\sqrt{3}} \right) \right] \right) \\ & + 2 \left(\cos \left[\frac{2\pi}{a} \left(p \frac{x}{3} + q \frac{y}{\sqrt{3}} \right) \right] \right. \\ & \left. + \cos \left[\frac{2\pi}{a} \left(\frac{-p+3q}{2} \frac{x}{3} + \frac{p+q}{2} \frac{y}{\sqrt{3}} \right) \right] \right) \end{aligned} \quad (22)$$

همان طور که در رابطه (۹) بیان شد، ویژه مقادیر انرژی از رابطه

$$E = \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \left(\frac{(2\pi)^2}{3a^2} \right) \left(\frac{p^2}{3} + q^2 \right)$$

شرط دوره‌ای در رابطه (۱) دیدیم که تکانه ذره پیوسته نخواهد بود و تقارن انتقالی باعث گسسته شدن آن و ایجاد شرطی روی دو عدد کوانتومی (p, q) می‌شود به این صورت که باید هر دو

۱. systematic degeneracy

کاهش ناپذیر A_1 و B_1 قابل دستیابی هستند. همچنین با توجه به محدودیت روی اعداد کوانتومی قادر به شناختن حالت پایه سیستم نیز هستیم، که برای شرط مرزی دیریشله ویژه حالت ($q=2$ و $p=0$) در نمایش کاهش ناپذیر B_1 است و برای شرط مرزی نویمن ویژه حالت ($q=-1$ و $p=1$) در دو نمایش کاهش ناپذیر A_1 و B_1 است و حالت پایه تبهگن می‌باشد. با استفاده از این روش علاوه بر اینکه توابع موج طبق تقارن‌های دستگاه دسته‌بندی می‌شوند، تبهگنی‌های هندسی دستگاه نیز به وضوح شناخته می‌شوند.

به لحاظ فیزیکی، شناخت ویژگی‌های هندسی تابع موج حالت پایه و انرژی این حالت می‌تواند اهمیت بیشتری داشته باشد و زمینه‌ای برای برخی اندازه‌گیری‌ها روی دستگاه‌های فیزیکی دارای تقارن D_2 (مثل نقطه کوانتومی هگزاگون) ایجاد کند. همچنین مطالعه طیف حالت‌ها می‌تواند ما را در شناخت خواص آماری مجموعه‌ای از ذرات که در یک قفس شش ضلعی محبوس هستند یاری دهد.

نکته مهم دیگر این است که معادله شرودینگر مستقل از زمان در عمل به یافتن پاسخ‌های معادله هلمهولتز منجر می‌شود. بنابراین در مسائلی که به نوعی با معادله هلمهولتز در ساختاری با تقارن D_2 روبه‌رو باشیم، می‌توانیم از طبقه بندی حاصل در این مقاله بهره ببریم.

موج متناظر خواهد بود. ب: نوع دوم تبهگنی‌ها غیر هندسی هستند و به نام تبهگنی تصادفی^۱ شناخته می‌شوند.

این نوع تبهگنی هنگامی پیش می‌آید که ترکیب‌های متفاوت از (p, q) منجر به ویژه مقدار انرژی یکسانی شوند. مرتبه این تبهگنی تعداد (p, q) است که منجر به عبارت $\frac{p^2}{3} + q^2$ یکسانی شوند. برای مثال می‌توان حالت‌های $(1, -1)$ و $(2, 0)$ را

$$E = \frac{4}{3} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \left(\frac{(2\pi)^2}{3a^2} \right)$$

نام برد که هر دو منجر به انرژی می‌شوند.

در این مقاله حل‌های معادله شرودینگر در حضور گروه تقارن D_2 مورد بحث قرار گرفت. در اینجا ما نوعی ساختار آرایه‌ای را نیز در کنار تقارن‌های چرخشی و بازتابی در نظر گرفته و مجموعه ویژه حالت‌ها و ویژه مقادیر انرژی را طبقه بندی کردیم. این کار به طور تحلیلی (غیر عددی) انجام گرفت و تنها به گزاره‌های ریاضی مبتنی بر روش‌های نظریه گروه‌ها متکی بود. سپس برای حالت‌های خاصی که شرط مرزی دیریشله یا نویمن باشد محدودیت‌های اضافه‌ای که ایجاد می‌شود را به دست آوردیم.

دید شده که شرط مرزی دیریشله در دو نمایش کاهش ناپذیر A_1 و B_1 و شرط مرزی نویمن در دو نمایش

8. G M Wysin, *J. Opt. A: Pure Appl. Opt.* **7** (2005) 502.
9. A V Rozhkov and F Nori, *Phys. Rev. B* **81** (2010) 155401.
10. R S Jones, "The one dimensional three body problem and selected waveguide problems: the solution of the two dimensional Helmholtz Equation", Ph.D. Dissertation, Ohio State University, Columbus (1993).
11. E Lijnen, L F Chibotaru, and A Ceulemans, *Phys. Rev. E* **77** (2008) 016702.
12. R L Liboff and J Greenberg, *J. Stat. Phys.* **105** (2001) 389.
13. W K Tung, "Group Theory in Physics", World Scientific (1985).

۱۴. آ. نعمتی، "حل معادله شرودینگر در چند ضلعی‌های منتظم

با استفاده از نظریه گروه‌ها"، دانشکده فیزیک، دانشگاه

صنعتی اصفهان (۱۳۹۰).

1. U Drodofsky, J Stuhler, Th Schulze, M Drewsen, B Brezger, T Pfau, and J Mlynek, *Appl. Phys. B* **65** (1997) 755.
2. A Szameit, D Blomer, J Burghoff, T Pertsch, S Nolte, and A Tunnermann, *Appl. Phys. B* **82** (2006) 507.
3. J Wiersig, *Phys. Rev. A* **67** (2003) 023807.
4. A K Geim, *Science* **324** (2009) 1530.
5. W-K Li and S M Blinder, *J. Math. Phys.* **26** (1985) 2784.
6. H J Xie and Z W Zuo, *J. Phys.: Condens. Matter* **21** (2009) 499802.
7. H C Chang, G Kioseoglou, E H Lee, J Haetty, M H Na, Y Xuan, H Luo, and A Petrou, *Phys. Rev. A* **62** (2000) 013816.

۱. accidental degeneracy

