مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران

مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران، جلد ۱، شمارهٔ ۵، زمستان ۱۳۷۷

محاسبهٔ انرژی اولین حالت برانگیخته یک چاه پتانسیل سه گانه با استفاده از ابر تقارن

مریم خلج، محسن سربیشه‌ای و علی‌رضا مختاری

دانشگاه فردوسی مشهد

(دریافت مقاله: ۷۶/۳/۲۱ دریافت نسخهٔ نهایی: ۷۷/۱۱/۲۴)

چکیده

یکی از مسائل مهم فیزیک و شیمی اختلاف انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته چاههای پتانسیل چندگانه است. به خاطرپیچیدگی این پتانسیلها برای محاسبهٔ ترازهای انرژی و توابع موج آنها، اغلب باید به روشهای عددی متوسل شد. در این مقاله با معرفی هامیلتونیهای ابر تقارن در مکانیک کوانتومی و مروری بر حل چاه پتانسیل دوگانه، با استفاده از ابر تقارن در مکانیک کوانتومی اختلاف انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته را برای یک چاه پتانسیل سه‌گانه محاسبه می‌کنیم.

۱. مقدمه

یکی از مسایل مهم فیزیک و شیمی اختلاف انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته چاههای پتانسیل چندگانه است. این نوع پتانسیلها می‌توانند، به عنوان مثال متناظر با ملکولهای چند اتمی باشند. به خاطر پیچیدگی این پتانسیلها برای محاسبهٔ ترازهای انرژی و توابع موج هامیلتونی آنها، اغلب باید به روشهای عددی متوسل شد. اختلاف انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیختهٔ چاههای پتانسیل چندگانه معمولاً کوچک و محاسبهٔ آن به صورت عددی مشکل می‌باشد. این اختلاف انرژی وقتی که ارتفاع سد پتانسیل بین چاهها بزرگ باشد کوچکتر هم می‌شود، به همین دلیل اخیراً با استفاده از مکانیک کوانتومی ابرتقارن، این اختلاف انرژی در چاه پتانسیل دوگانه محاسبه شده است [۱ و ۲]. در این مقاله با مروری بر حل چاه پتانسیل دوگانه، مسئله چاه پتانسیل سه‌گانه را با استفاده از ابر تقارن در مکانیک کوانتومی حل می‌کنیم.

۲. هامیلتونیهای ابر تقارن در مکانیک کوانتومی

هامیلتونیهای H_1 و H_2 را به صورت زیر در نظر می‌گیریم ($\frac{\hbar^2}{2m} = 1$):

$$H_1 = -\frac{d^2}{dx^2} + V_1(x) \quad \text{و} \quad H_2 = -\frac{d^2}{dx^2} + V_2(x) \qquad (1)$$

که در آنها V_1 و V_2 عبارتند از:

$$V_1 = w^2 - w' \quad \text{و} \quad V_2 = w^2 + w' \qquad (2)$$

در روابط فوق $w(x)$ ابر پتانسیل نامیده می‌شود و علامت پریم نماد مشتق‌گیری نسبت به x است. این دو هامیلتونی را هامیلتونیهای همباز و پتانسیلهای V_1 و V_2 را پتانسیلهای همباز می‌نامند [۳ و ۴ و ۵].

H_1 را با تغییر پتانسیل به اندازه یک مقدار ثابت به گونه‌ای انتخاب می‌کنیم که انرژی حالت پایه آن صفر شود. در این حالت می‌توان هامیلتونیهای H_1 و H_2 را به حاصل ضرب دو عملگر به صورت زیر تجزیه کرد:

$$H_1 = A^+A \qquad\qquad H_2 = AA^+ \qquad (۳)$$

که در آنها $A = \frac{d}{dx} + w$ و $A^+ = -\frac{d}{dx} + w$ می‌باشند. چون در این حالت انرژی حالت پایه H_1 صفر است، بنابراین $A\psi_0^{(1)} = 0$ خواهد بود که در آن $\psi_0^{(1)}$ ویژه تابع H_1 در حالت پایه است و می‌توان روابط زیر را بدست آورد:

$$\psi_0^{(1)} = N\exp\left(-\int w(x)dx\right) \qquad (۴)$$

که در آن N ضریب بهنجارش است. از رابطه فوق داریم :

$$w(x) = -\frac{\psi_0^{(1)\prime}}{\psi_0^{(1)}} \qquad (۵)$$

با توجه به ۳ می‌توان ثابت کرد که H_1 و H_2 دارای ویژه مقادیر یکسان هستند (بجز در انرژی حالت پایه H_1 که در طیف H_2 حذف می‌شود) و ویژه توابع آنها به صورت زیر به یکدیگر مربوطند [۵]:

$$\psi_n^{(2)} \propto A\psi_{n+1}^{(1)}$$
$$\psi_n^{(1)} \propto A^+\psi_{n-1}^{(2)} \qquad (۶)$$

که در آنها $\psi_n^{(1)}$ و $\psi_n^{(2)}$ به ترتیب ویژه توابع تراز nام H_1 و H_2 می‌باشند.

۳. حل چاه پتانسیل دوگانه

برای به دست آوردن اختلاف انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیختهٔ یک چاه پتانسیل چندگانه یعنی شکاف انرژی t، ابتدا یک ویژه تابع به عنوان ویژه تابع حالت پایه H_1 انتخاب می‌کنیم، به گونه‌ای که چاه پتانسیل چندگانه مورد نظر را نتیجه دهد. این ویژه تابع دارای انرژی صفر خواهدبود.

اکنون چاه پتانسیل دوگانه را مرور می‌کنیم [۱ و ۲]. دو چاه پتانسیل را در نظر می‌گیریم، این چاهها مربوط به نوسانگرهایی هستند که حول x_0 و $-x_0$ نوسان می‌کنند. احتیاج داریم که ویژه تابع حالت پایه $\psi_0^{(1)}(x)$ را بدانیم. برای این کار ویژه تابع حالت پایه هر یک از چاهها را بدست آورده و با جمع آنها، ویژه تابع حالت پایه چاه پتانسیل دوگانه نامتقارن را به صورت زیر به‌دست می‌آوریم:

$$\psi_0^{(1)}(x) = e^{-(x+x_0)^2} + e^{-a(x-x_0)^2} \qquad (۷)$$

که در آن مقدار a، میزان نامتقارن بودن چاه را تنظیم می‌کند و اگر $a = ۱$ باشد، چاه متقارن خواهد بود.

ساده‌تر آن است که به جای به دست آوردن انرژی اولین حالت برانگیخته H_1، انرژی حالت پایه H_2 را به دست آوریم.

اگر $\psi_0^{(1)}$ ویژه تابع حالت پایه H_1 باشد آنگاه می‌توانیم ثابت کنیم که $H_2(1/\psi_0^{(1)})$ باید صفر باشد، ولی $1/\psi_0^{(1)}$ هنجار پذیر نیست زیرا در حد اگر $x \to \infty$ میل کند آنگاه $1/\psi_0^{(1)} \to \infty$ میل خواهد کرد، اما از این تابع می‌توانیم یک تابع هنجارپذیر به صورت زیر بسازیم.

$$\phi(x) = \frac{\int_x^{\infty}[\psi_0^{(1)}(y)]^2dy}{2I_+\psi_0^{(1)}(x)} \qquad x>0$$

$$= \frac{\int_{-\infty}^{x}[\psi_0^{(1)}(y)]^2dy}{2I_-\psi_0^{(1)}(x)} \qquad x>0 \qquad (۸)$$

که در آن I_+ و I_- به صورت زیر تعریف شده‌اند.

$$I_- = \int_{-\infty}^{0} [\psi_0^{(1)}(y)]^2 dy$$
$$I_+ = \int_{0}^{\infty} [\psi_0^{(1)}(y)]^2 dy \qquad (۹)$$

$\phi(x)$ برای همه مقادیر x تعریف شده است و $\phi(0) = \left(1/2\psi_0^{(1)}(0)\right)$ می‌باشد. ولی می‌توان نشان داد که اگر $x \neq 0$ باشد آنگاه $H_2\phi(x) = 0$ خواهد شد. مشتق $\phi(x)$ در $x = 0$ ناپیوسته است.

$$\phi'\Big|_{\varepsilon} - \phi'\Big|_{-\varepsilon} = -\frac{\psi_0^{(1)}(x)}{2}\left[\frac{1}{I_+} + \frac{1}{I_-}\right] \qquad (۱۰)$$

بنابراین $\phi(x)$ ویژه تابع H_2 نمی‌باشد بلکه با استفاده از رابطه فوق، می‌توانیم یک هامیلتونی تکین دیگر مانند H_0 بسازیم که ویژه تابع حالت پایه آن ϕ باشد.

$$H_0 = H_2 - [\psi_0^{(1)}(0)]^2\left[\frac{1}{I_+} + \frac{1}{I_-}\right]\delta(x) \qquad (۱۱)$$

که در آن ناپیوستگی را با $\delta(x)$ بیان کرده‌ایم. در این صورت داریم.

$$H_2 = H_0 + [\psi_0^{(1)}(0)]^2\left[\frac{1}{I_+} + \frac{1}{I_-}\right]\delta(x) \qquad (۱۲)$$

همان طور که ملاحظه می‌شود، ویژه مقدار و ویژه تابع حالت پایه هامیلتونی H_2 می‌توانند از طریق وارد کردن اختلال $[\psi_0^{(1)}(0)]^2[1/I_+ + 1/I_-]\delta(x)$ در هامیلتونی H_0 محاسبه شوند. در رابطه فوق، $\psi_0^{(1)}(0)$ نقش ثابت بر همکنش را دارد.
اولین تصحیح انرژی از طریق بسط اختلالی رایلی - شرودینگر به صورت زیر به دست می‌آید:

$$E^{(1)} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(x)\,(\delta H)\phi(x)dx}{\int_{-\infty}^{+\infty}\phi^2(x)dx}$$
$$= \frac{1}{4}\left[\frac{1}{I_+} + \frac{1}{I_-}\right]\frac{1}{\int_{-\infty}^{+\infty}\phi^2(x)\,dx} \qquad (۱۳)$$

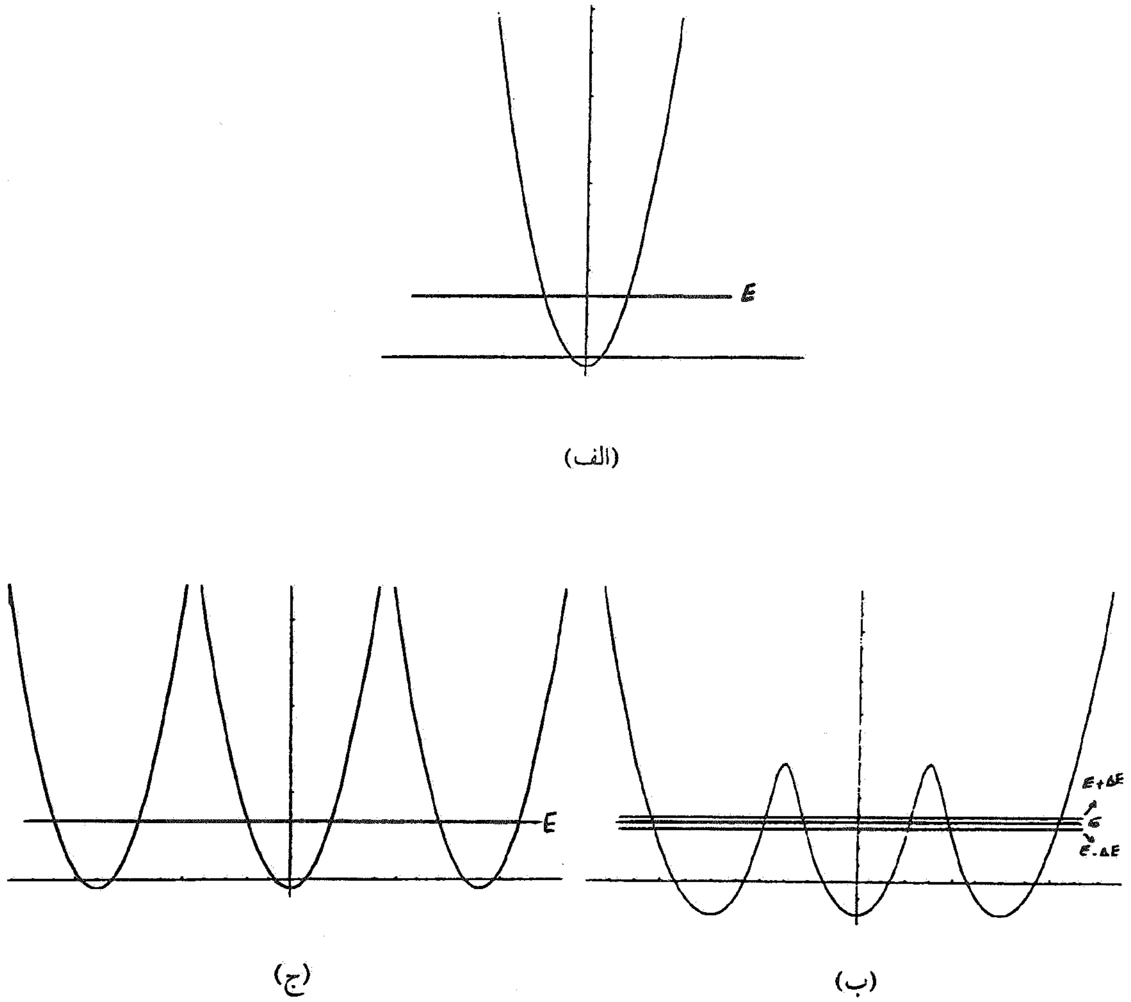
به علت آنکه ویژه تابع حالتهای برانگیخته را نداریم لازم است برای بدست آوردن تقریب دوم از نظریه اختلال لگاریتمی [۷] استفاده کنیم.

$$E^{(2)} = -\left\{\int_{-\infty}^{0} dx\left[\frac{E^{(1)}\int_{-\infty}^{x}\phi^2(y)dy}{\phi(x)}\right]^2 + \int_{0}^{\infty} dx\left[\frac{E^{(1)}\int_{x}^{\infty}\phi^2(y)dy}{\phi(x)}\right]^2\right\} \qquad (۱۴)$$

بنابراین تا تقریب مرتبه دوم، شکاف انرژی t برابر $E^{(1)} + E^{(2)}$ می‌باشد.

۴. حل چاه پتانسیل سه‌گانه

سه چاه پتانسیل نوسانی سادهٔ یکسان منطبق بر یکدیگر را مطابق شکل ا. الف در نظر می‌گیریم. در این وضعیت انرژیهای حالت پایهٔ هر سه چاه پتانسیل بر هم منطبق خواهند بود. حال اگر یک چاه پتانسیل ثابت بماند و دو چاه پتانسیل دیگر را در دو جهت مخالف، کمی از هم دور کنیم، یک چاه پتانسیل سه‌گانه مطابق شکل ا. ب تشکیل خواهد شد. در این وضعیت تراز انرژی حالت پایه به سه تراز انرژی نزدیک به هم شکافته می‌شود. با افزایش فاصلهٔ چاهها از یکدیگر، از یک طرف این سه تراز انرژی حالت پایه به یکدیگر نزدیکتر می‌شوند و از طرف دیگر سد پتانسیل بین چاهها بلندتر می‌شود به طوری که می‌توان به تدریج در ترازهای برانگیخته انرژی دوم، سوم و بالاتر نیز شکافتگی انرژی هر تراز برانگیخته را به سه تراز نزدیک به‌هم مشاهده کرد. در فواصل خیلی دور حالت پایه تبهگنی سه‌گانه خواهد داشت و چاه پتانسیل سه گانه مطابق شکل ا.ج عملاً به سه چاه مجزای یکسان دور از هم با طیفهای یکسان تبدیل خواهد شد.



شکل ۱. الف) سه چاه پتانسیل یکسان منطبق برهم. ب) یک چاه پتانسیل سه‌گانه. ج) سه چاه پتانسیل یکسان دور از هم

برای بدست آوردن اولین شکاف انرژی t ویژه تابع حالت پایه $V_1(x)$ را به صورت زیر انتخاب می‌کنیم.

$$\psi_0^{(1)}(x) = e^{-(x-x_0)^2} + e^{-x^2} + e^{-a(x+x_0)^2} \qquad (۱۵)$$

که در آن جمله اول، تابع موج حالت پایهٔ یک نوسانگر هماهنگ ساده است که کمینهٔ پتانسیل آن در x_0 است و جملهٔ دوم مربوط به نوسانگری است که مرکز آن در مبدأ مختصات قرار دارد و جملهٔ سوم مربوط به نوسانگری است که حول $-x_0$ نوسان می‌کند و ضریب a میزان نامتقارن بودن چاه را تنظیم می‌کند. اگر $a = 1$ باشد، چاه متقارن خواهد بود.

با استفاده از روابط ۲ و ۴، ابر پتانسیل $w(x)$ و سپس $V_1(x)$ و $V_2(x)$ را بدست می‌آوریم:

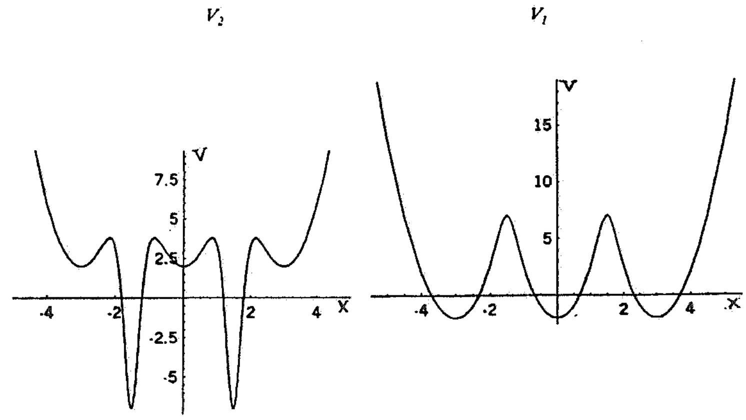
$$w(x) = -\frac{\psi_0(x)'}{\psi_0(x)}$$

$$= \frac{2(x-x_0)e^{-(x-x_0)^2} + 2x\,e^{-x^2} + 2a(x+x_0)\,e^{-a(x+x_0)^2}}{e^{-(x-x_0)^2} + e^{-x^2} + e^{-a(x+x_0)^2}} \qquad (۱۶)$$

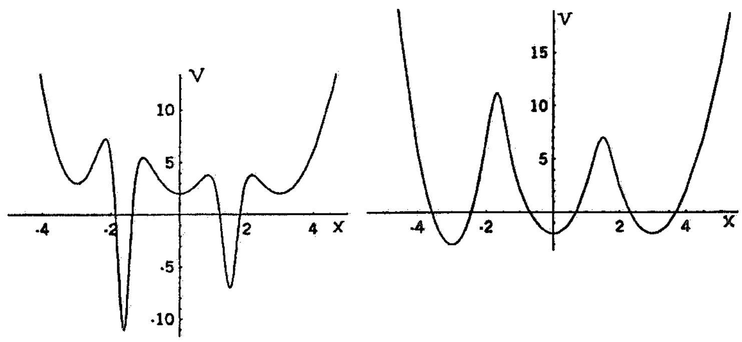
$$V_1(x) = w^2(x) - w'(x)$$

$$(۱۷)$$

$$V_2(x) = w^2(x) + w'(x)$$



(الف)



(ب)

شکل ۲. نمایش تغییرات پتانسیلهای V_1 و V_2 برحسب x به ازای $x_0 = 3$، الف) $a = 1$ و ب) $a = 1/5$

پتانسیلهای V_1 و V_2 به ازای $a = 1$ و $x_0 = 3$ در شکل ۲. الف و به ازای $a = 1/5$ و $x_0 = 3$ در شکل ۲. ب نشان داده شده‌اند.

حال اگر ویژه تابع حالت پایهٔ H_2 را داشته باشیم، با محاسبهٔ انرژی این تابع، شکاف انرژی t بدست خواهد آمد. می‌توان نشان داد که با اثر H_2 بر $1/\psi_0^{(1)}$ مقدار صفر به دست می‌آید. یعنی به نظر می‌رسد که $1/\psi_0^{(1)}$ ویژه تابع H_2 با ویژه مقدار صفر است. ولی چون تابع $1/\psi_0^{(1)}$ وقتی که $x \to \pm\infty$ میل کند به سمت بینهایت میل می‌کند، لذا این تابع هنجارپذیر نیست و نمی‌تواند یک تابع قابل قبول فیزیکی باشد. بنابراین باید ویژه تابعی معرفی کنیم که در بینهایت به سمت صفر میل کند. برای این منظور تابع زیر را معرفی می‌کنیم:

$$\phi(x) = \frac{\int_x^{\infty} [\psi_0^{(1)}(y)]^2 dy}{2I_1\psi_0^{(1)}(x)} \qquad x>x_0$$

$$= \frac{1}{2\psi_0^{(1)}(x)} \qquad -x_0<x<x_0$$

$$= \frac{\int_{-x}^{\infty} [\psi_0^{(1)}(y)]^2 dy}{2I_2\psi_0^{(1)}(x)} \qquad x<-x_0 \qquad (18)$$

که در آن I_1 و I_2 عبارتند از:

$$I_1 = \int_{x_0}^{\infty} [\psi_0^{(1)}(y)]^2 dy$$

$$I_2 = \int_{-\infty}^{-x_0} [\psi_0^{(1)}(y)]^2 dy \qquad (19)$$

ملاحظه می‌شود که $\phi(x)$ در بینهایت، صفر و در نقاط $x = \pm x_0$

پیوسته است اما مشتق آن در نقاط $x = \pm x_{\circ}$ پیوسته نیست. درنتیجه نمی‌تواند ویژه تابع $H_{۲}$ باشد. ولی می‌توان با وارد کردن توابع پتانسیل دلتا در هامیلتونی $H_{۲}$، یک هامیلتونی دیگر مانند $H_{\circ}$ ساخت به طوری که $\phi(x)$ ویژه تابع آن باشد. برای این کار، مقدار ناپیوستگی $\phi(x)$ را در $x = \pm x_{\circ}$ محاسبه می‌کنیم.

$$\phi' \Big|_{x_{\circ}+\varepsilon} - \phi' \Big|_{x_{\circ}-\varepsilon} = -\frac{\psi_{\circ}^{(۱)}(x_{\circ})}{۲I_{۱}}$$
$$\phi' \Big|_{-x_{\circ}+\varepsilon} - \phi' \Big|_{-x_{\circ}-\varepsilon} = -\frac{\psi_{\circ}^{(۱)}(-x_{\circ})}{۲I_{۲}} \qquad (۲۰)$$

بنابراین می‌توانیم $\phi(x)$ را ویژه تابع هامیلتونی $H_{\circ}$ بدانیم که به صورت زیر ساخته شده است:

$$H_{\circ} = H_{۲} - \frac{[\psi_{\circ}^{(۱)}(x_{\circ})]^{۲}}{I_{۱}}\delta(x - x_{\circ}) - \frac{[\psi_{\circ}^{(۱)}(-x_{\circ})]^{۲}}{I_{۲}}\delta(x + x_{\circ})$$

که در آن با وارد کردن توابع دلتا مشتق را پیوسته کرده‌ایم. در این صورت هامیلتونی $H_{۲}$ به صورت زیر در می‌آید:

$$H_{۲} = H_{\circ} + \Delta H$$

که ΔH یک اختلال برای $H_{\circ}$ می‌باشد و برابر است با:

$$\Delta H = \frac{[\psi_{\circ}^{(۱)}(x_{\circ})]^{۲}}{I_{۱}}\delta(x - x_{\circ}) + \frac{[\psi_{\circ}^{(۱)}(-x_{\circ})]^{۲}}{I_{۲}}\delta(x + x_{\circ}) \qquad (۲۱)$$

در رابطه فوق $\psi_{\circ}^{(۱)}(\pm x_{\circ})$ نقش ثابتهای بر همکنش را دارند و $\phi(x)$ جواب مسئله بدون اختلال است.

برای محاسبه مقدار انرژی حالت پایه $H_{۲}$ از نظریه اختلال استفاده می‌کنیم. در تقریب مرتبه اول داریم:

$$E^{(۱)} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \phi(x)\,(\delta H)\,\phi(x)\,dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \phi^{۲}(x)\,dx}$$

$$= \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \phi(x) \left[\frac{[\psi_{\circ}^{(۱)}(x_{\circ})]^{۲}}{I_{۱}}\right] \delta(x - x_{\circ})\phi(x)\,dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} \phi^{۲}(x)\,dx}$$

$$= \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \phi(x) \left[\frac{[\psi_{\circ}^{(۱)}(-x_{\circ})]^{۲}}{I_{۱}}\right] \delta(x + x_{\circ})\phi(x)\,dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} \phi^{۲}(x)\,dx}$$

$$E^{(۱)} = \frac{۱}{۴}\left[\frac{۱}{I_{۱}} + \frac{۱}{I_{۲}}\right]\frac{۱}{\int_{-\infty}^{+\infty} \phi^{۲}(x)\,dx} \qquad (۲۲)$$

از آنجاکه برای محاسبه انرژی، در تقریب مرتبه دوم اختلال، لازم است تمام ویژه توابع هامیلتونی $H_{\circ}$ را بدانیم و این مقدور نیست، به‌جای استفاده از اختلال معمولی از نظریه اختلال لگاریتمی [۷] استفاده می‌کنیم که در آن ویژه تابع حالت پایه کفایت می‌کند در آن صورت داریم:

$$E^{(۲)} = -\left\{\int_{-\infty}^{-x_{\circ}} dx \left[\frac{E^{(۱)}\int_{-\infty}^{x} \phi^{۲}(x)\,dx}{\phi(x)}\right]^{۲} + \int_{-x_{\circ}}^{x_{\circ}} dx \left[\frac{E^{(۱)}\int_{-x_{\circ}}^{x} \phi^{۲}(x)\,dx}{\phi(X)}\right]^{۲} + \int_{x_{\circ}}^{\infty} dx \left[\frac{E^{(۱)}\int_{x}^{\infty} \phi^{۲}(x)\,dx}{\phi(x)}\right]^{۲}\right\} \qquad (۲۳)$$

بنابراین شکاف انرژی t تا تقریب مرتبه دوم اختلال برابر است با:

$$t = E^{(۱)} + E^{(۲)} \quad (۲۴)$$

۵. نتیجه

با استفاده از ابر تقارن می‌توان اختلاف انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته یک چاه پتانسیل سه‌گانه را به صورت تابعی از پـارامـترهای ثـابت بـه دست آورد. ایـن روش را مـی‌توان بـه پتانسیلهای چندگانه تعمیم داد.

مراجع

1. W Y Keung, E Kavacs and V P Sukhatme, *phys. Rev. let* **60**, 41, 1988
2. A Gangopadhyaya, P K Panigrahi and V P Sukhatme, *phys. Rev. A* **47**, 2720, 1993
3. E Witten, *Nucl. phys. B* **188** 513 1981
4. F Cooper and B freedman, *Am - phys* **146**, 262, 1983
5. R Dutt, A Khare and V P Sukhatme, *Am. J. Phys* **56**, 163, 1988
6. E Merzbacher, *Quantum Mechanics,* John Wiley (1970)
7. T Imbo and U Sukhatme, *Am.J. Phys* **52**, 140, 1984