

فاز بری برای ذره در چاه پتانسیل کروی بی نهایت با دیواره متحرک

رضا معظمی

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه قم، قم

پست الکترونیکی: r.moazzemi@qom.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۷/۰۳/۰۷؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۷/۰۷/۲۵)

چکیده

در این مقاله فاز بری برای توابع موج ذره در یک چاه پتانسیل کروی بی نهایت که شعاع آن به صورت بی دررو تغییر می کند را محاسبه می کنیم. برای این منظور لازم است که جواب های معادله شرودینگر مربوط، که هامیلتونی آن با زمان متغیر است، را داشته باشیم که برای اولین بار در اینجا به دست خواهد آمد. همچنین فاز بری را در حالت یک بعدی برای چاه پتانسیل بی نهایت را نیز به دست می آوریم. دیده می شود که این فاز کاملاً قابل مقایسه با فاز دینامیکی معمول تابع موج است و البته با علامت مخالف، بنابراین این لازم است که در محاسبات مکانیک کوانتومی مورد لحاظ قرار گیرد.

واژه های کلیدی: فاز بری، فاز هندسی، چاه پتانسیل کروی بی نهایت

۱. مقدمه

بسیاری از کاربردهای فاز بری زمانی است که این کمیت های دینامیکی مقداری درجات آزادی داشته باشند، به ویژه هنگامی که تغییرات زمانی آرام و تغییرات فضایی هموار باشد. چارچوب های نظری این زمینه فیزیک را می توانید به عنوان مثال در [۲ و ۳] ببینید. تأثیرات فاز بری بر خواص الکترونیکی ماده نیز بسیار اهمیت دارد که برای مرور می توان منبع [۴] را دید. فاز بری همچنین بر چگالی حالت های الکترونی تأثیر می گذارد، طوری که قضیه لیوویل در خصوص پایداری حجم فضای فاز با وجود این فاز نقض می شود که این خود موجب اصلاحاتی روی چگالی حالت های فضای فاز می شود [۵].

فاز بری در مورد تحول بی درروی یک ویژه حالت انرژی هنگامی که همه کمیت های خارجی یک دستگاه کوانتومی به آرامی تغییر می کنند، می باشد. اگر این تحول در طی یک حلقه بسته در فضای کمیت ها صورت پذیرد، در غیاب تبهگنی، ویژه حالت در انتهای حلقه به خودش باز می گردد، اما یک اختلاف فاز متناسب با انتگرال انرژی و همچنین اختلاف فاز دیگری که اولین بار بری در سال ۱۹۴۸ مطرح کرد [۱]، خواهد گرفت. اختلاف فاز اول را فاز دینامیکی و دومی را فاز بری می گویند. فاز بری یک فاز هندسی است، یعنی می توان آن را بر حسب کمیت های هندسی موضعی در فضای فاز نوشت.

است، که در آن $\Phi_n(x, t)$ جواب‌های معادله شرویدینگر وابسته به زمان،

$$H(t)\Phi_n(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Phi_n(x, t)}{\partial t}, \quad (3)$$

هستند. برای پتانسیل (۱) یعنی چاه پتانسیل بی نهایت با دیواره متحرک، $\Phi_n(x, t)$ ها به شکل زیرند [۶]:

$$\begin{aligned} \Phi_n(x, t) &= \sqrt{\frac{2}{a(t)}} \sin\left(\frac{n\pi}{a(t)}\right) \\ &\exp\left\{i\left(\frac{mx^2}{2\hbar a(t)} - \frac{n^2\pi^2\hbar}{2mv}\left(\frac{1}{a_0} - \frac{1}{a(t)}\right)\right)\right\} \\ &= \sqrt{\frac{2}{a(t)}} \sin\left(\frac{n\pi}{a(t)}\right) \exp\left\{i\frac{mx^2}{2\hbar a(t)} e^{i\theta_n(t)}\right\} \\ &= \varphi_n(x, t) \exp\{i\theta_n(t)\} \end{aligned} \quad (4)$$

که در آن $E_n(t) = n^2\pi^2\hbar^2/2ma^2(t)$ انرژی تراز n ام است و $\theta_n(t)$ فاز دینامیکی نامیده می‌شود و از رابطه زیر به دست می‌آید

$$\begin{aligned} \theta_n(t) &= -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt' \\ &= -\frac{1}{\hbar} \int_0^t \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m(a_0 + vt)^2} dt' \\ &= -\frac{n^2\pi^2\hbar}{2mv} \left(\frac{1}{a_0} - \frac{1}{a(t)} \right), \end{aligned} \quad (5)$$

رابطه‌ای که برای محاسبه فاز هندسی ارائه داد به صورت

$$\begin{aligned} \gamma_n(t) &= i \int_0^t \left\langle \varphi_n(x, t') \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| \varphi_n(x, t') \right\rangle dt' \\ &= i \int_{R_i}^{R_f} \left\langle \varphi_n \left| \frac{\partial \varphi_n}{\partial R} \right\rangle dR, \end{aligned} \quad (6)$$

است، که در آن R کمیت هندسی دستگاه است که با زمان تغییر می‌کند. البته اگر تعداد کمیت‌های هندسی متغیر با زمان بیش از یکی باشد، مشتق نسبت به R در رابطه (۶) به گرادیان تبدیل می‌شود. در مسئله ما $R(t) = a(t)$. با استخراج $\varphi_n(x, t)$ از رابطه (۴) و قرار دادن در رابطه (۶) می‌توان فاز هندسی محاسبه نمود. بدین منظور خواهیم داشت

$$\begin{aligned} \left\langle \varphi_n \left| \frac{\partial \varphi_n}{\partial R} \right\rangle &= \int_0^a \varphi_n^*(x, t) \frac{\partial}{\partial a} \varphi_n(x, t) dx, \\ &= -i \frac{m(n^2\pi^2 - \pi^2)}{2\hbar^2\pi^2} v, \end{aligned} \quad (7)$$

در این مقاله ما قصد داریم فاز بری را برای یک چاه پتانسیل کروی بی نهایت با دیواره های متحرک محاسبه نماییم. این مساله تا کنون بررسی نشده است و می‌تواند در دسته‌ای از مسائل مکانیک کوانتومی که با چاه بی نهایت کروی سر و کار دارند به کار رود. بدین منظور ابتدا لازم است که تابع موج جواب معادله شرویدینگر وابسته به زمان پتانسیل کروی بی نهایت با دیواره متحرک را بیابیم که خود این مسئله نیز جالب توجه و با اهمیت می‌باشد. سپس، از این تابع موج استفاده کرده و فاز هندسی را طبق فرمول بری محاسبه خواهیم کرد. به منظور آشنایی بیشتر با فاز هندسی و نحوه محاسبه آن، ما ابتدا فاز بری توابع موج در یک چاه پتانسیل بی نهایت یک‌بعدی را محاسبه خواهیم کرد. این مورد نیز برای اولین بار به صورت صحیح در این مقاله محاسبه خواهد شد.

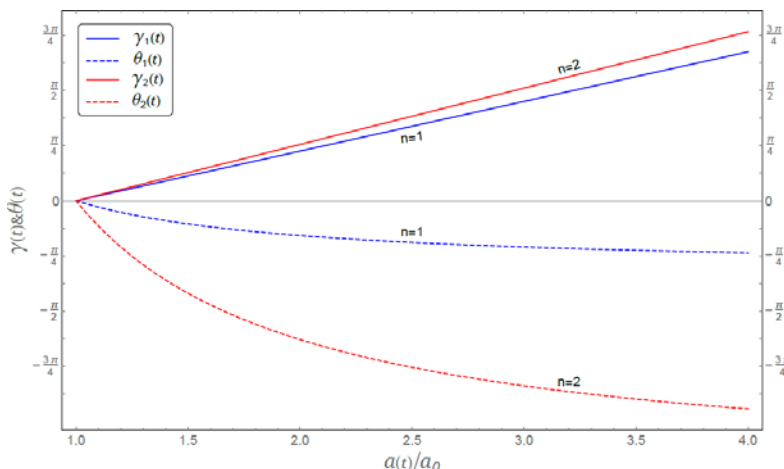
۲. مورد یک‌بعدی

در این بخش فاز بری توابع موج یک چاه پتانسیل یک‌بعدی بی نهایت با دیواره متحرک را، که به صورت زیر تعریف می‌شود:

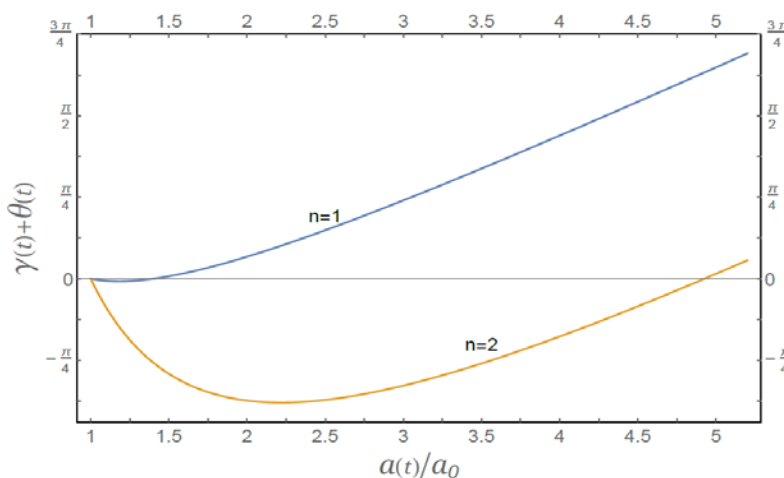
$$V(x, t) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq a(t) \\ \infty, & \text{بقیه جاها} \end{cases} \quad (1)$$

را محاسبه خواهیم نمود، که در آن $a(t) = a_0 + vt$ محل یکی از دیواره های جعبه است که با سرعت v حرکت می‌کند. فرض ما اینجا این است که سرعت حرکت دیواره به اندازه‌ای کند است که بتوان از تقریب بی‌دررو استفاده نمود. در تقریب بی‌دررو فرض بر این است که تغییرات هامیلتونی $H(t)$ برحسب زمان به اندازه‌ای کند است که شماره حالت کوانتومی دستگاه تغییر نمی‌کند؛ یعنی اگر دستگاه در حالت n ام هامیلتونی بوده است همچنان با تغییر هامیلتونی در همان حالت n ام هامیلتونی جدید باقی می‌ماند، هر چند که سایر کمیت‌های آن ممکن است با زمان تغییر نماید. جواب عمومی مسئله به صورت

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n \Phi_n(x, t), \quad (2)$$



شکل ۱. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمودار تغییرات فاز دینامیکی $\theta_n(t)$ و فاز هندسی $\gamma_n(t)$ بر حسب $a(t)/a_0$ برای مقادیر $n=1, 2$.



شکل ۲. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمودار تغییرات فاز کل $\gamma_n(t) + \theta_n(t)$ بر حسب $a(t)/a_0$ برای مقادیر $n=1, 2$.

۳. مورد سه‌بعدی

هر چند که جواب‌های معادله شرودینگر برای چاه بی‌نهایت کروی ایستا شناخته شده هستند، اما جواب‌های آن هنگامی که پتانسیل متغیر با زمان داریم تا کنون معرفی نشده‌اند. ما اینجا قصد داریم این کار را انجام دهیم و این جواب‌ها را به دست آوریم. در مورد ایستا، جواب‌ها به صورت

$$\Phi_{nlm}(r) = \frac{1}{j_{l+1}(\beta_{nl})} \sqrt{\frac{2}{a^3}} j_l(\beta_{nl} r/a) Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (9)$$

می‌باشند، که در آن a شعاع کره پتانسیل و β_{nl} ، n امین ریشه تابع بسل کروی $j_l(x)$ و $Y_l^m(\theta, \varphi)$ هماهنگ‌های کروی‌اند. همچنین انرژی ترازهای مختلف‌ها به صورت

و در نهایت

$$\begin{aligned} \gamma_n(t) &= i \int_{a_0}^a \left\langle \varphi_n \left| \frac{\partial \varphi_n}{\partial R} \right. \right\rangle dR \\ &= \frac{mva_0}{12\hbar n^2 \pi^2} \left(2n^2 \pi^2 - 3 \right) \left[\frac{a(t)}{a_0} - 1 \right] \\ &= \frac{mv^2}{12\hbar n^2 \pi^2} \left(2n^2 \pi^2 - 3 \right) t. \end{aligned} \quad (8)$$

شکل ۱ نمودار تغییرات هردو فاز هندسی و دینامیکی را بر حسب a/a_0 برای دو مقدار اولیه n نشان می‌دهد. همچنین در شکل ۲ تغییرات فاز کل، مجموع هر دو فاز، آورده شده است. در همه نمودارها کمیت‌ها طوری انتخاب شده‌اند که $ma_0 v / \hbar \sim 5$.

$$f(r, t) = \frac{mvr^2}{2\hbar(a_0 + vt)} + g(t), \quad (16)$$

بوده و جالب این که همین عبارت جواب معادله دوم نیز هست. با قراردادن این جواب در معادله (۱۵) برای بخش موهومی خواهیم داشت، $g(t) = C$ که یک فاز ثابت است و می توان آن را صفر گرفت. بنابر این جواب کلی معادله شرودینگر برای یک پتانسیل کروی با دیواره متحرک با سرعت ثابت به شکل

$$\Psi(r, t) = \sum_{nlm} c_{nlm} \Phi_{nlm}(r, t), \quad (17)$$

است، که در آن

$$\Phi_{nlm}(r, t) = \frac{1}{j_{l+1}(\beta_{nl})} \left(\frac{r}{(a_0 + vt)^3} \right)^{1/2} j_l \left[\frac{\beta_{nl} r}{(a_0 + vt)} \right] \exp \left\{ i \left[\frac{mvr^2}{2\hbar(a_0 + vt)} - \frac{\hbar\beta_{nl}^2}{2mv} \left(\frac{1}{a_0} - \frac{1}{a_0 + vt} \right) \right] \right\} Y_l^m(\theta, \varphi). \quad (18)$$

فاز بری

برای محاسبه فاز بری ابتدا رابطه (۱۸) را به شکل مناسب زیر بازنویسی می کنیم

$$\Phi_{nlm}(r, t) = \varphi_{nlm}(r, t) e^{i\theta_{nl}(t)}, \quad (19)$$

که در آن

$$\varphi_{nlm}(r, t) = \frac{1}{j_{l+1}(\beta_{nl})} \sqrt{\frac{r}{a(t)^3}} j_l[\beta_{nl} r / a(t)] \exp \left\{ i \frac{mvr^2}{2\hbar a(t)} Y_l^m \right\}(\theta, \varphi). \quad (20)$$

در نتیجه خواهیم داشت

$$\left\langle \varphi_{nlm} \left| \frac{\partial \varphi_{nlm}}{\partial R} \right. \right\rangle = \int_0^a \varphi_{nlm}^*(r, t) \frac{\partial}{\partial a} \varphi_{nlm}(r, t) r^2 dr = -i \frac{mv}{2\hbar\beta_{nl}^2} \left[\frac{j_{l-1}(\beta_{nl})}{j_{l+1}(\beta_{nl})} \right]^2 \left[2l(l+1) - 3 + 2\beta_{nl}^2 \right]. \quad (21)$$

برای محاسبه رابطه فوق از انتگرال زیر استفاده کرده ایم:

$E_{nl}(t) = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \beta_{nl}^2$ می باشد. اما ما می خواهیم معادله شرودینگر وابسته به زمان

$$H(t) \Phi_{nlm}(r, t) = i\hbar \frac{\partial \Phi_{nlm}(r, t)}{\partial t} \quad (10)$$

با پتانسیل کروی

$$V(r, t) = \begin{cases} 0, & r < a(t) \\ \infty, & r \geq a(t) \end{cases} \quad (11)$$

را حل نماییم که در آن شعاع پتانسیل با سرعت ثابت v و به صورت بی دررو تغییر می کند. برای این منظور بعد از جداسازی بخش زاویه ای از معادله (۱۰)، برای معادله شرودینگر شعاعی وابسته به زمان

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 u_{nl}(r, t)}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} u_{nl}(r, t) = i\hbar \frac{\partial u_{nl}(r, t)}{\partial t}, \quad (12)$$

جواب

$$u_{nl}(r, t) = \frac{1}{j_{l+1}(\beta_{nl})} \left(\frac{r}{a^3(t)} \right)^{1/2} j_l[\beta_{nl} r / a(t)] e^{i\theta_{nl}(t)}, \quad (13)$$

را امتحان می کنیم، که در آن

$$\theta_{nl}(t) = -\frac{\hbar\beta_{nl}^2}{2mv} \left(\frac{1}{a_0} - \frac{1}{a_0 + vt} \right)$$

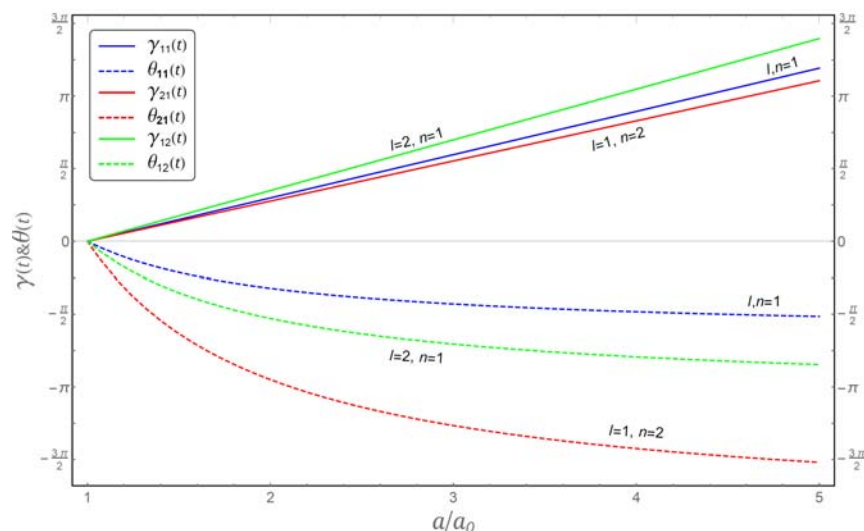
درست شبیه معادله (۵) به دست می آید، فقط به جای ریشه تابع سینوس ریشه تابع بسل کروی قرار می گیرد. با قرار دادن جواب (۱۳) در معادله (۱۲) دو معادله جداگانه برای بخش های حقیقی و موهومی به دست می آید. برای بخش حقیقی آن کافی است دو معادله زیر، همزمان برقرار باشند:

$$\begin{cases} \hbar(a_0 + vt) \frac{\partial f(r, t)}{\partial r} - mvr = 0, \\ \hbar(a_0 + vt) \left(2(l+1) \frac{\partial f(r, t)}{\partial r} + r \frac{\partial^2 f(r, t)}{\partial r^2} \right) - (3 + 2l)mvr = 0, \end{cases} \quad (14)$$

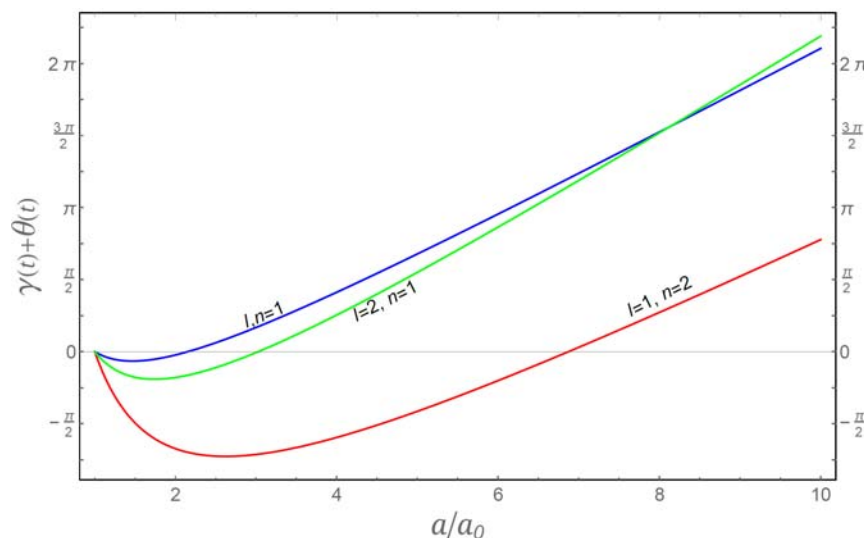
و برای بخش موهومی لازم است که داشته باشیم

$$\left(\frac{\partial f(r, t)}{\partial r} \right)^2 + \frac{2m}{\hbar} \frac{\partial f(r, t)}{\partial t} = 0. \quad (15)$$

جواب معادله اول از سری معادلات (۱۴) به صورت



شکل ۳. (رنگی در نسخه الکترونیکی) فاز بری فاز دینامیکی $\theta_{nl}(t)$ و فاز هندسی $\gamma_{nl}(t)$ بر حسب $a(t)/a_0$ برای چند مقدار اول l و n .



شکل ۴. (رنگی در نسخه الکترونیکی) فاز کل، مجموع بری فاز دینامیکی و فاز هندسی، بر حسب $a(t)/a_0$ برای چند مقدار اول l و n .

محاسبه انتگرال آن، فاز هندسی به شکل زیر به دست می‌آید

$$\gamma_{nl}(t) = \frac{mv}{\hbar \beta_{nl}} \left(\frac{j_{l-1}(\beta_{nl})}{j_{l+1}(\beta_{nl})} \right)^2 \left[4l(l+1) - 3 + 2\beta_{nl}^2 \right] [a(t) - a_0]. \quad (23)$$

شکل‌های ۳ و ۴ نمودار تغییرات فاز های دینامیکی و بری و همچنین فاز کل بر حسب $a(t)/a_0$ نشان می‌دهند. همان طور که در شکل‌های ۳ و ۴ مشاهده می‌شود علامت فاز بری با فاز دینامیکی در این مسئله متفاوت است. همچنین در فواصل زیاد این

$$\begin{aligned} \int x^{\frac{1}{2}} j_l(x)^2 dx &= \frac{\pi x^{\frac{1}{2}l+5} {}_2F_3 \left(l+1, l+\frac{5}{2}; l+\frac{3}{2}, l+\frac{5}{2}, \frac{1}{2}l+\frac{3}{2}; -x^2 \right)}{{}_2F_3 \left(\frac{1}{2}l+\frac{3}{2}, \frac{1}{2}l+5 \right) \Gamma \left(l+\frac{3}{2} \right)^2} + C \\ &= \frac{1}{\frac{1}{2}l+2} (-\frac{1}{2}l-3) x^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{2}l^2 + \frac{1}{2}x^2 - 1 \right) j_{l-1}(x) j_l(x) \\ &\quad + \frac{1}{\frac{1}{2}l+2} x^{\frac{3}{2}} \left(\frac{1}{2}l^2 + \frac{1}{2}l + \frac{1}{2}x^2 + 3 \right) j_l(x)^2 + \frac{1}{\frac{1}{2}l+2} x^{\frac{3}{2}} \\ &\quad \left(\frac{1}{2}l^2 + \frac{1}{2}l + \frac{1}{2}x^2 - 3 \right) j_{l-1}(x)^2 + C. \end{aligned} \quad (22)$$

با قرار دادن رابطه (۲۱) در فرمول فاز بری، معادله (۶)، و

متحرک را یافته و با استفاده از آن فاز بری را برای این حالت محاسبه کرده‌ایم. نمودار تغییرات فاز دینامیکی و فاز بری و همچنین فاز کل در شکل‌های ۳ و ۴ برای چند مقدار اولیه l و n نشان داده شده است.

قدردانی

نویسنده بر خود لازم می‌داند که از دکتر سید مهدی فاضلی به دلیل بحث‌ها و راهنمایی‌های مفید تشکر نماید.

فاز هندسی است که غالب می‌شود. لذا در نظر گرفتن دقیق این فاز در مسائل مکانیک کوانتومی مربوط بسیار با اهمیت است.

۴. خلاصه و نتیجه‌گیری

در این مقاله، ما فاز بری که یک فاز هندسی می‌باشد را ابتدا برای پتانسیل چاه یک‌بعدی بی نهایت که دیواره آن با سرعت ثابت حرکت می‌کند را به دست آورده‌ایم. سپس برای حالت سه بعدی جواب‌های پتانسیل چاه کروی بی نهایت با دیواره

مراجع

1. M V Berry, *Proc. R. Soc. London A* **392** (1984) 45.
2. A Bohm, A Mostafazadeh, H Koizumi, Q Niu, and J Zwanziger, "The Geometric Phase in Quantum Systems: Foundations, Mathematical Concepts, and Applications in Molecular and Condensed Matter Physics", Springer-Verlag, Berlin (2003).
3. A Shapere and F Wilczek, "Geometric Phase in Physics", World Scientific, Singapore (1989).
4. D Xiao, M C Chang, and Q Niu, *Rev. Mod. Phys.* **82** (2010) 1959.
5. Di Xiao, Shi Junren, and Niu Qian, *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005) 137204.
6. S W Doescher and M H Rice, *Am. J. Phys.* **37** (1969) 1246.