

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

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

D_6

را نیز مدل سازی کرد. می‌توان یک شش ضلعی منزوی در نظر گرفت که حل معادله شروдинگر تنها در داخل آن مد نظر باشد. اما اگر قرار باشد تابع موج حلی تحلیلی و خوش رفتار از معادله شروینگر در صفحه باشد، باید ادامه تحلیلی آن در خارج از محدوده شش ضلعی نیز معنی دار و متنضم تقارن‌های هندسی سیستم باشد. بنابراین، حتی اگر دستگاه فیزیکی مورد نظر یک شش ضلعی مستظم منزوی باشد، تابع موج در کل صفحه به طور گریز ناپذیر دارای تقارن‌های انتقالی یک آرایه شش ضلعی است و به عبارت ساده‌تر، تکرار پذیر است.

به این لحاظ می‌توان گفت آنچه در این مقاله به طور تحلیلی حل شده است، یافتن کلی ترین حل‌های معادله شروینگر در دو بعد است که نمایش‌های گروه تقارن دی‌هدرال D_6 باشند. اما اینکه کاربردهای این مسئله کجا است، در یک جمله می‌توان گفت که در هر مسئله دو بعدی که به نوعی با

حل معادله شروینگر با شرایط مرزی گوناگون و تحت تقارن‌های متفاوت، چه از زاویه دید نظری و چه از نگاه کاربردی، موضوعی دیرپا در مکانیک کوانتمی است. به عنوان یک مثال آشنا، تقارن کروی باعث می‌شود معادله شروینگر کلاس محدودی از حل‌ها که شامل هارمونیک‌های کروی هستند را پذیرا باشد. همچنین حضور پتانسیل‌های با تقارن دوره‌ای در این معادله منجر به ایده باندهای انرژی می‌گردد.

در این مقاله هدف بررسی گروه تقارن‌های یک شش ضلعی (گروه دی هدرال D_6) و اثر آن بر حل‌های معادله شروینگر و طیف حالتها و انرژی‌های آن است. مسئله بنا به طبیعت خود دو بعدی است، اما با افزودن یک تقارن پیوسته انتقالی در امتداد عمود بر صفحه شش ضلعی می‌توان مسایلی سه بعدی، نظیر انتشار تابع موج شروینگری در یک موجبر با مقطع شش ضلعی

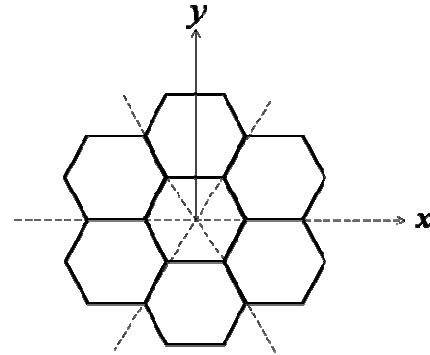
تحلیلی، مثل دایره، چنان دگردیسی می‌شود که با شرایط مرزی یک چند ضلعی منتظم تطبیق داده شوند [۱۱]. در اینجا نیز آنچه حاصل می‌شود شرایط مرزی را ارضاء می‌کند اما دیگر حل معادله شروдинگر نیست. در مورد دیگری نیز که در متن توضیح داده می‌شود مؤلفه‌های تصویری یکتابع تحت عملگرهای گروه تقارن با فازهای دلخواه با هم جمع شده‌اند [۱۲]، سپس با روش‌های عددی این فازها را تنظیم کرده‌اند تا شرط مرزی ارضاء شود. این کار بنا بر نظریه گروه‌ها درست نیست و ما تنها مجاز هستیم مؤلفه‌های تصویری یاد شده را با ضرایب معینی با هم ترکیب کنیم تاتابع موج حاصله نمایش گروه تقارن باشد.

در این مقاله، پس از مرور مختصری از گروه تقارنی دی هدرال D_6 ما سعی کرده‌ایم ابتدا کلی‌ترین تابع موجی که تقارن‌های انتقالی سیستم را در بر داشته باشد را در نظر بگیریم و سپس با اعمال عملگرهای تصویر مناسب در نمایش‌های مختلف، از روی آن تابع موجی را به دست آوریم، که هم حل معادله شروдинگر باشد و هم نمایش گروه تقارنی شش ضلعی. توابعی که به این ترتیب به دست می‌آیند هرکدام ممکن است برای نوع خاصی از شرایط مرزی (دیریشله، نویمن) روی دیواره‌ها مناسب باشند که در متن توضیح داده شده است. در پایان مقاله نتایج مورد بحث قرار گرفته‌اند.

آرایه دوره‌ای از شش ضلعی منتظم به طول ضلع a را طبق شکل ۱ در نظر می‌گیریم. پتانسیل درون شش ضلعی‌ها صفر است. می‌خواهیم معادله شروдинگر را با شرط دوره‌ای در چنین آرایه‌ای حل کنیم. در حالت خاص این شرط دوره‌ای می‌تواند شرط مرزی دیریشله یا نویمن باشد.

ابتدا توضیح کوتاهی درباره گروه تقارنی شش ضلعی منتظم می‌دهیم.

گروه تقارن‌های یک شش ضلعی منتظم گروه دی هدرال D_6 نام دارد. این گروه ۱۲ عضو دارد که شامل چرخش‌های $j\pi/3$ با z صحیح از یک تا شش حول مرکز شش



شکل ۱. آرایه دوره‌ای 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.

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

پیش از این مشابه این مسئله برای ذره کوانتمومی محصور در یک چاه پتانسیل دو بعدی به شکل مثلث متساوی‌الاضلاع حل شده است [۵]. استفاده از حل‌های معادله شروдинگر مستقل از زمان و به طور مشابه معادله هلمهولتز در چنین ساختاری در مراجع [۶ - ۹] مورد توجه قرار گرفته است. که خود انگیزه‌ای برای در نظر گرفتن مسائل مطرح شده با ساختار شش ضلعی منتظم می‌باشد. تلاش‌های مفصل و زیادی نیز برای تعیین‌های دیگر مسئله به سایر چند ضلعی‌ها صورت گرفته که عمدتاً بر روش‌های عددی مبتنی است [۱۰ - ۱۲]. اغلب حل‌های ارائه شده به لحاظ ریاضی قابل خدشه‌اند. برای مثال در پاره‌ای موارد حل‌های معادله شروдинگر برای ذره آزاد چنان با هم ترکیب می‌شوند که در یک مجموعه متناهی از نقاط مرزی صفر شوند (برای شرط مرزی دیریشله) [۱۰] در این حالت شرط مرزی ارضاء می‌شود، اما آنچه به دست می‌آید دیگر حل معادله شروдинگر یعنی تابع موجی با یک ویژه مقدار معین انرژی نیست، بلکه ترکیبی از آنها است. در موارد دیگری حل تحلیلی معادله شروдинگر 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:

$$\begin{aligned} u_{p,q}(x,y) &= u_{p,q}[x+3a,y] \\ &= u_{p,q}\left[x,y+\sqrt{3}a\right]. \end{aligned} \quad (1)$$

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

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

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 $(x/2 + \sqrt{3}y/2, -\sqrt{3}x/2 + y/2)$. با قرار دادن توابع $u_{p,q}(x,y)$ از رابطه (۲) در رابطه (۵) اعداد کوانتومی p_j و

ضلعی، بازتاب‌های σ_{1d} , σ_{2d} و σ_{3d} نسبت به قطرها و بازتاب‌های σ_{1v} , σ_{2v} و σ_{3v} نسبت به عمود منصف اصلاح است. در این نماد گذاری چرخش‌های $2\pi/n$ حول مبدأ را با C_n ، بازتاب نسبت به قطرها را با σ_d و بازتاب نسبت به عمود منصف اصلاح را با σ_v نشان داده‌ایم. همچنین نماد C_k^n نشان دهنده چرخش به اندازه $k\pi n/k$ برای n و صحیح است. نمایش‌های یک بعدی که نسبت به چرخش‌ها متقارن هستند را با A و نمایش‌های پادمتقارن 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 $D_6 = \{(\sigma_{1d})^n (c_\epsilon)^j; n = 0, 1; j = 1, \dots, 6\}$ 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

$$E \equiv \{e\},$$

$$3\sigma_d \equiv \{\sigma_{1d}, \sigma_{2d}, \sigma_{3d}\},$$

$$3\sigma_v \equiv \{\sigma_{1v}, \sigma_{2v}, \sigma_{3v}\},$$

$$C_1 \equiv \{c_\epsilon^1\},$$

$$2C_2 \equiv \{c_\epsilon^1, c_\epsilon^2\},$$

$$2C_3 \equiv \{c_\epsilon^1, c_\epsilon^3\},$$

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 قضايای متعارف در نظریه نمایش‌های گروه‌های محدود [۱۳]، این گروه تقارنی ۴ نمایش یک بعدی و ۲ نمایش دو بعدی کاهش ناپذیر به نام‌های B_2, B_1, A_4, A_1 و E_1 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 ۲. تعیین اعداد کوانتومی p_j و q_j .

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

جدول ۱. جدول مشخصه گروه تقارنی D_6 .

D_6	E	C_2	$2C_2$	$2C_3$	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
A_1	1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	1	-1	-1
B_1	1	-1	1	-1	1	-1
B_2	1	-1	1	-1	-1	1
E_1	2	-2	-1	1	0	0
E_2	2	2	-1	-1	0	0

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

$$\psi_{p,q}(x,y) = v_{p,q}(x,y) + v_{p,q}(x,-y) \quad (8)$$

$$= v_{p,q}(x,y) + v_{p,-q}(x,y),$$

با قرار دادن تابع موج در معادله شرو Diong و پیژه مقادیر انرژی از رابطه زیر به دست می‌آیند

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

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 ناوردا باشد. اما نکته مهم این است که حل‌های معادله شرو Diong در حضور یک تقارن مشخص، محدود به حل ناوردا تحت گروه تقارن نیست. مثال آشنا این امر معادله شرو Diong برای پتانسیل دارای تقارن کروی است. در این حالت تنها حالت‌های σ تحت دوران ناوردا 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 ، تابع 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 ناوردا ای که در این قسمت معرفی شد متناظر با نمایش بدیهی است که به تمام اعضای گروه عدد ۱ را نسبت می‌دهد. نتیجه

q_j مطابق جدول ۲ به دست می‌آیند.

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

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

نکته مهمی که وجود دارد این است که برای اینکه تابع موج، شرط تناوب را طبق آنچه در رابطه (1) 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

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

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

حال نوبت به این می‌رسد که ناوردا ای تابع موج تحت تقارن‌های بازتابی را نیز اعمال کنیم. برای این کار کافی است که یکی از بازتاب‌ها، مثلاً σ_{1d} را در نظر بگیریم که نحوه اثر آن به صورت $\sigma_{1d}(x,y) = (x,-y)$ است. دلیل این امر آن است که اعضای دوازده گانه گروه D_6 با ضرب کردن فقط یک بازتاب، مثلاً σ_{1d} ، در شش چرخش که نتیجه آن شش عنصر بازتاب است به همراه شش عنصر چرخش به دست می‌آید. بنابراین کافی است تابع $v_{p,q}(x,y)$ در رابطه (6) که در آن ناوردا ای تحت چرخش‌ها لحاظ شده است را با اثر انعکاس σ_{1d} روی آن جمع کنیم تا تابع موج نهایی $\psi_{p,q}(x,y)$ به

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 $(x, y)_{p,q}$ ، 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 ارضاء کنند.

A

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

$$\begin{aligned} p(A_1) = & E + c_6 + c_6^* + c_6^{\ddagger} + c_6^{\ddagger\ddagger} + c_6^{\ddagger\ddagger\ddagger} + \sigma_{1d} \\ & + \sigma_{2d} + \sigma_{3d} + \sigma_{1v} + \sigma_{2v} + \sigma_{3v}. \end{aligned} \quad (11)$$

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

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

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 ۱+ 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 شش‌ضلعی دست یابیم، باید یکی از این روابط برقرار باشد: $p = q$ و $q = p$ زوج، $p = \pm q$ و $q = \pm p$ ناپذیر.

کار تابع موج $(x, y)_{p,q}$ است که از جمع کردن اثربخشی گروه (با ضرایب یکسان واحد) روی $(x, y)_{p,q}$ به دست آمد. برای سایر نمایش‌های یک بعدی به جای عدد یک باید مشخصه عنصر مورد نظر در نمایش مربوطه را در $(x, y)_{p,q}$ 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 شش‌ضلعی‌ها با در نظر گرفتن تنها تقارن‌های چرخشی بررسی شده و اثرات عناصر چرخشی روی یک تابع موج $(x, y)_{p,q}$ 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 نویسنده‌گان 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.

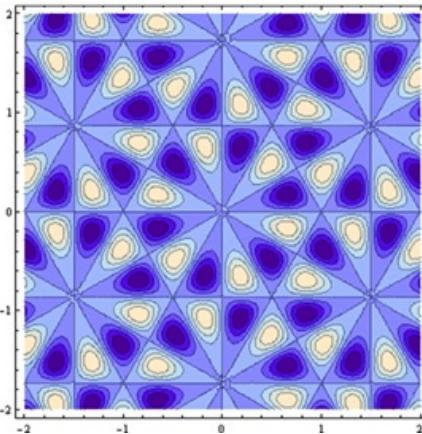
در بخش بعد ما این کار را برای یک به یک نمایش‌های کاهش ناپذیر گروه D_6 انجام خواهیم داد. سپس بررسی خواهیم کرد که کدام نوع شرایط مرزی (دیریشله یا نویمن) با نمایش مورد نظر سازگار است.

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

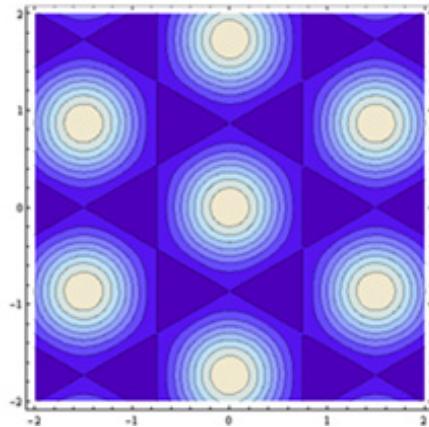
برای آرایه شش ضلعی به طول ضلع واحد رسم شده است. رنگ روشن نشان دهنده بزرگ‌ترین مقدار مثبت است و با تیره شدن مقدار منفی می‌شود. شرط مرزی دیریشله روی آرایه شش ضلعی به طول ضلع واحد برقرار است.

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

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

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

تابع $\psi_{A_4}^{\pm,\pm}$ در شکل ۳ رسم شده است. تغییر رنگ از تیره به روشن نشان دهنده تغییر علامت تابع موج و ارضای شرط مرزی دیریشله می‌باشد. همان‌طور که در این شکل دیده می‌شود علامت تابع موج تحت ۶ عمل بازتاب تغییر می‌کند، اما تحت ۶ عمل چرخش ثابت است که مطابق با مشخصه این عناصر در جدول ۱ است.



شکل ۴. اندازه تابع موج $\psi_{A_4}^{\pm,-}$ در نمایش A_4 با انرژی

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

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 رأس‌هایش در مرکز مثلث‌ها قرار دارد، برقرار می‌باشد.

تابع $\psi_{A_4}^{\pm,-}$ در شکل ۴ رسم شده است. مقدار بیشینه تابع موج در مرکز شش ضلعی (مبدأ مختصات) رخ می‌دهد و از آنجا طی یک کاهش یکنوا به مقدار کمینه‌اش در مرکز مثلث می‌رسد. رنگ روشن نشان دهنده بزرگ‌ترین مقدار مثبت است و با تیره شدن مقدار مقدار تابع موج منفی می‌شود. به این ترتیب شرط مرزی نویمن روی شش ضلعی که رأس‌هایش در مرکز مثلث‌ها قرار دارد، برقرار می‌باشد.

همان‌طور که در شکل دیده می‌شود تابع موج تحت اثر اعمال تقارنی شش ضلعی شامل چرخش و بازتاب تغییر علامت نمی‌دهد به این دلیل که این نمایش A_4 مشخصه تمامی عناصر ۱+ است.

A_4

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

$$\begin{aligned} p(A_4) = & E + c_4 + c_4^2 + c_4^3 + c_4^4 + c_4^5 - \sigma_{1d} - \sigma_{2d} \\ & - \sigma_{2d} - \sigma_{1v} - \sigma_{2v} - \sigma_{3v} \end{aligned} \quad (13)$$

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_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 قطرهای شش‌ضلعی $+1$ است و مشخصه ۶ عنصر دیگر -1 می‌باشد. بنابراین عملگر تصویر در این نمایش به صورت زیر است:

$$p(B_1) = E - c_6 + c_6^* - c_6^3 + c_6^5 + \sigma_{1d} + \sigma_{2d} + \sigma_{2d} - \sigma_{1v} - \sigma_{2v} - \sigma_{3v}. \quad (17)$$

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

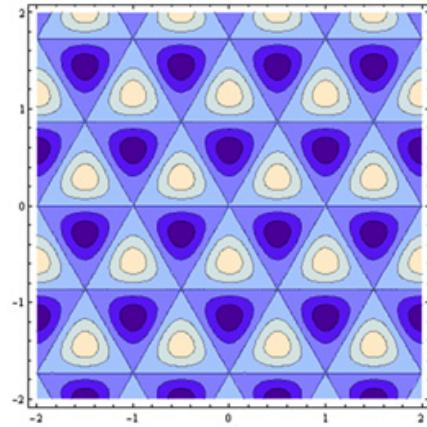
$$\begin{aligned} \psi_{p,q}^{(B_1)}(x,y) = & \sin\left[\frac{\pi}{a}\left(p\frac{x}{2}\right)\right] \cos\left[\frac{\pi}{a}\left(q\frac{y}{\sqrt{3}}\right)\right] \\ & - \sin\left[\frac{\pi}{a}\left(\frac{p+2q}{2}\frac{x}{2}\right)\right] \cos\left[\frac{\pi}{a}\left(\frac{-p+q}{2}\frac{y}{\sqrt{3}}\right)\right] \\ & + \sin\left[\frac{\pi}{a}\left(\frac{-p+2q}{2}\frac{x}{2}\right)\right] \cos\left[\frac{\pi}{a}\left(\frac{p+q}{2}\frac{y}{\sqrt{3}}\right)\right]. \end{aligned} \quad (18)$$

در صورتی که $p=0$ یا $q=0$ باشد، تابع موج به طور کلی صفر خواهد بود. اما شرط مرزی نویمن با برقراری $p=\pm q$ روی مرزهای شش‌ضلعی که رأس‌هاییش 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 $c_6x + c_6^*y$ به $c_6 + c_6^*i$ تبدیل می‌شود. این عبارت را به صورت یک ماتریس ستوانی که مؤلفه اول آن بخشن



شکل ۴. تابع $\psi_{1,-1}$ در نمایش B_1 با انرژی

برای آرایه شش‌ضلعی به طول ضلع واحد رسم شده است. رنگ روشن نشان دهنده بزرگترین مقدار مثبت است و با تپه شدن مقدار منفی می‌شود. شرط مرزی دیریشله روی آرایه شش‌ضلعی 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 اصلاح $+1$ است و مشخصه ۶ عنصر دیگر -1 می‌باشد.

بنابراین عملگر تصویر در این نمایش به صورت زیر است:

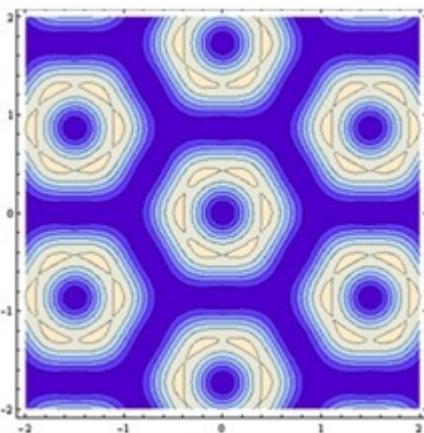
$$p(B_1) = E - c_6 + c_6^* - c_6^3 + c_6^5 - \sigma_{1d} - \sigma_{2d} - \sigma_{2d} + \sigma_{1v} + \sigma_{2v} + \sigma_{3v}, \quad (15)$$

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

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

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 شش‌ضلعی ارضاء می‌کند.

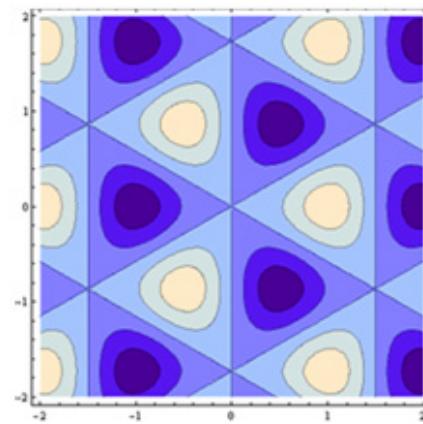
تابع $\psi_{1,1}$ در شکل ۴ رسم شده است. در شکل دیده



شکل ۶. اندازه تابع مختلط E_1 در نمایش B_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 است و با تیره شدن اندازه تابع کاهش می‌یابد. تابع موج در این نمایش تنها شرط دوره‌ای را برآورده می‌کند.



شکل ۵. اندازه تابع موج ψ_1 در نمایش B_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 می‌شود. شرط مرزی نویمن روی آرایه شش ضلعی که راس‌هایی در مرکز مثلث‌ها قرار دارد، برقرار می‌باشد.

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

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

$$E_4$$

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

$$p(E_4) = E + \varepsilon^* c_\zeta + \varepsilon c_\zeta^\dagger + c_\zeta^\dagger + \varepsilon^* c_\zeta^\dagger + \varepsilon c_\zeta^0 + \sigma_{\zeta d} \eta + \varepsilon \sigma_{\zeta d} \eta + \varepsilon^* \sigma_{\zeta d} \eta + \varepsilon^* \sigma_{\zeta v} \eta + \sigma_{\zeta v} \eta + \varepsilon \sigma_{\zeta v} \eta \quad (21)$$

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 ارضاء نمی‌شوند، اما تابع موج، تناوب را در راستاهای تقارنی حفظ می‌کند. این نکته را می‌توان در شکل ۷ دید.

حقیقی و مؤلفه دوم آن بخشن موهمی 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 $\exp(2\pi i/3)$ و عملگر مزدوج مختلط کننده η نوشت. به این ترتیب عملگر تصویر در رابطه (۱۰) به صورت زیر به دست می‌آید [۱۴].

$$p(E_4) = E - \varepsilon c_\zeta + \varepsilon^* c_\zeta^\dagger - \varepsilon c_\zeta^0 + \varepsilon \sigma_{\zeta d} \eta + \sigma_{\zeta d} \eta + \varepsilon^* \sigma_{\zeta d} \eta - \varepsilon^* \sigma_{\zeta v} \eta - \varepsilon \sigma_{\zeta v} \eta - \sigma_{\zeta v} \eta. \quad (19)$$

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:

$$\begin{aligned} \psi_{p,q}^{E_4}(x,y) = & 4i \cos \left[\frac{2\pi}{a} \left(p \frac{x}{3} \right) \right] \sin \left[\frac{2\pi}{a} \left(q \frac{y}{\sqrt{3}} \right) \right] \\ & + 4i \cos \left[\frac{2\pi}{a} \left(\frac{p+2q}{2} \frac{x}{3} \right) \right] \sin \left[\frac{2\pi}{a} \left(\frac{-p+q}{2} \frac{y}{\sqrt{3}} \right) \right] \\ & - 4i \cos \left[\frac{2\pi}{a} \left(\frac{-p+2q}{2} \frac{x}{3} \right) \right] \sin \left[\frac{2\pi}{a} \left(\frac{-p-q}{2} \frac{y}{\sqrt{3}} \right) \right] \\ & + 2\sqrt{3} \sin \left[\frac{2\pi}{a} \left(\frac{p+2q}{2} \frac{x}{3} \right) \right] \cos \left[\frac{2\pi}{a} \left(\frac{-p+q}{2} \frac{y}{\sqrt{3}} \right) \right] \end{aligned}$$

عدد صحیح زوج یا هردو عدد صحیح فرد باشند.

شرایط مرزی دیریشله یا نویمن روی آرایه شش‌ضلعی در شکل ۱، محدودیت‌های دیگری علاوه بر شرطی که تقارن دوره‌ای ایجاب می‌کند را روی اعداد کوانتمومی 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، $p = \pm q$ و $p = \pm 3q$ و یا $p = \pm 2q$ برقرار شود.

شرط مرزی دیریشله: روی آرایه شش‌ضلعی ارضا نمی‌شود.

۲. نمایش A_2 : شرط مرزی نویمن: روی آرایه شش‌ضلعی ارضا 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 شش‌ضلعی ارضا 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 شش‌ضلعی ارضا نمی‌شود.

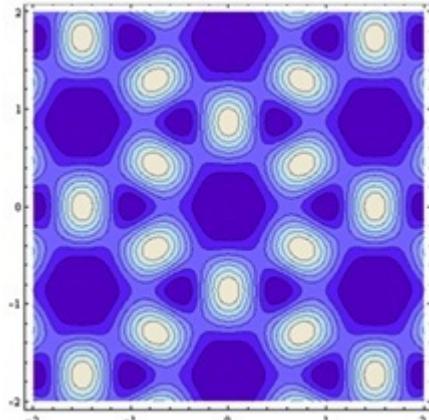
۵. نمایش‌های دو بعدی E_1 و E_2 : هیچ کدام از دو شرط مرزی دیریشله و نویمن را ارضا نمی‌کنند. حالت پایه برای ذره محصور در آرایه شش‌ضلعی با شرط مرزی دیریشله در نمایش کاهش ناپذیر B_1 در ویژه حالت ($p = 0, q = 2$)

$$\text{با ویژه مقدار انرژی } E = \frac{4}{3} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \left(\frac{(2\pi)^2}{2a^2} \right) \text{ و برای شرط مرزی نویمن ویژه حالت } (p = 1, q = -1) \text{ در دو نمایش کاهش ناپذیر } A_1 \text{ و } B_2 \text{ با ویژه مقدار انرژی}$$

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

در بحث تبھگنی ویژه توابع، می‌توان مشابه با نامگذاری مرجع [۵] برای مثلث به دو نوع تبھگنی اشاره کرد:

الف: تبھگنی که به دلیل تقارن هندسی ساختار ایجاد می‌شود و به نام تبھگنی روش‌مند^۱ شناخته می‌شود. در این نوع تبھگنی 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 $\psi_{-1,-1}$ در نمایش E_2 با انرژی

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

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.

$$\begin{aligned} \psi_{p,q}^{E_1}(x,y) = & -\sqrt{1+i\sqrt{3}} \cos \left[\frac{2\pi}{a} \left(\frac{p+3q}{2} \frac{x}{3} \right) \right] \\ & \times \cos \left[\frac{2\pi}{a} \left(\frac{-p+q}{2} \frac{y}{\sqrt{3}} \right) \right] + (-1+i\sqrt{3}) \\ & \times \left(\cos \left[\frac{2\pi}{a} \left(\frac{-p+3q}{2} \frac{x}{3} - \frac{p+q}{2} \frac{y}{\sqrt{3}} \right) \right] \right. \\ & \left. + \cos \left[\frac{2\pi}{a} \left(p \frac{x}{3} - q \frac{y}{\sqrt{2}} \right) \right] \right) \\ & + 2 \left(\cos \left[\frac{2\pi}{a} \left(p \frac{x}{3} + q \frac{y}{\sqrt{2}} \right) \right] \right. \\ & \left. + \cos \left[\frac{2\pi}{a} \left(-p+3q \frac{x}{3} + p+q \frac{y}{\sqrt{3}} \right) \right] \right) \end{aligned} \quad (22)$$

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

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

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 کوانتمومی (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 کوانتموی 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، تبهگن‌های 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 ϵ (مثل نقطه کوانتموی 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 شروودینگر 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 ϵ روبرو باشیم، می‌توانیم از طبقه بندی حاصل در این مقاله بهره بریم.

موج متناظر خواهد بود. ب: نوع دوم تبهگن‌ها 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 $\frac{p^2}{\epsilon} + \frac{q^2}{\epsilon}$ یکسانی شوند. برای مثال می‌توان حالت‌های $(-1, -1)$ و $(0, 0)$ را

نام برد که هر دو منجر به انرژی $E = \frac{4}{3} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \left(\frac{(2\pi)^2}{3a^2} \right)$ می‌شوند.

در این مقاله حل‌های معادله شروودینگر در حضور گروه تقارن ϵ 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.

دیده شد 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 شروودینگر 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 Kiouseoglou, E H Lee, J Haetty, M H Na, Y Xuan, H Luo, and A Petrou, *Phys. Rev. A* **62** (2000) 013816.

۱. accidental degeneracy

