

Chapter Nine

معادله شرودینگر در سه بعد

The Schrödinger equation in 3 dimensions

هامیلتونی یک تک ذره در سه بعد به صورت زیر است:

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(x, y, z)$$

که می توان آن را به صورت زیر نوشت:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r})$$

$$\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$$

اندازه حرکت در سه بعد نمایشی به صورت رو به رو دارد:

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

برای دو ذره در سه بعد شکل کلی هامیلتونی به صورت رو به رو است:

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$$

اگر پتانسیل فقط به فاصله بین ذرات بستگی داشته باشد (یعنی نیروی خارجی وجود نداشته باشد که فضا را مرجح کند):

آنگاه هامیلتونی تحت جابه جایی کل دستگاه به صورت $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_1 + \mathbf{a}$ و $\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_2 + \mathbf{a}$ یعنی جابه جایی به اندازه $\mathbf{a}$ ناورداست، که این خود ایجاب می کند که هم قانون بقا اندازه حرکت کل را داشته باشیم و هم متغیرها را نیز بتوانیم از هم جدا کنیم.

$$\mathbf{p} = \text{cte.}$$



$$[H, \mathbf{p}] = \frac{\hbar}{i} \frac{d\mathbf{p}}{dt} = 0$$

پس H و $\mathbf{p}$ ویژه توابع مشترک دارند.

پس برای جداسازی می توان راه ساده تر یافتن توابعی که ویژه تابع مشترک H و p باشند را انتخاب کرد.

معادله ویژه مقدار اندازه حرکت خطی کل به صورت زیر است:

$$p_{op} f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = p f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

$$\frac{\hbar}{i} (\vec{\nabla}_1 + \vec{\nabla}_2) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = p f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

$$f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Psi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \alpha \mathbf{r}_1 + \beta \mathbf{r}_2)$$

با توجه به تقارن انتقالی فرض می کنیم که:

$$\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 = \mathbf{r} \quad \alpha \mathbf{r}_1 + \beta \mathbf{r}_2 = \mathbf{R}$$

با تغییر متغیرهای رو به رو:

$$\vec{\nabla}_1 = \vec{\nabla}_r + \alpha \vec{\nabla}_R$$

$$\vec{\nabla}_2 = -\vec{\nabla}_r + \beta \vec{\nabla}_R$$

می توان نوشت:

چرا؟

چون

$$\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 = \mathbf{r} \quad \alpha \mathbf{r}_1 + \beta \mathbf{r}_2 = \mathbf{R}$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{r}_1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{r}_1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}}$$



$$\vec{\nabla}_1 = \vec{\nabla}_r + \alpha \vec{\nabla}_R$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_2} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{r}_2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{r}_2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}}$$



$$\vec{\nabla}_2 = -\vec{\nabla}_r + \beta \vec{\nabla}_R$$

$$\frac{\hbar}{i} (\vec{\nabla}_1 + \vec{\nabla}_2) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \mathbf{p} f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$



$$\vec{\nabla}_1 + \vec{\nabla}_2 = (\alpha + \beta) \vec{\nabla}_R$$

$$f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Psi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \alpha \mathbf{r}_1 + \beta \mathbf{r}_2)$$

$$\frac{\hbar}{i} (\alpha + \beta) \vec{\nabla}_R \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \mathbf{p} \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R})$$

و این یعنی این که متغیرهای $\mathbf{r}$ و $\mathbf{R}$ از هم جدا شده اند.

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = u(\mathbf{r})R(\mathbf{R})$$

$$\frac{\hbar}{i}(\alpha + \beta) \cancel{u(\mathbf{r})} \vec{\nabla}_{\mathbf{R}} R(\mathbf{R}) = \mathbf{p} \cancel{u(\mathbf{r})} R(\mathbf{R})$$

$$\frac{\vec{\nabla}_{\mathbf{R}} R(\mathbf{R})}{R(\mathbf{R})} = \frac{i\mathbf{p}}{\hbar(\alpha + \beta)}$$



$$R(\mathbf{R}) = \exp \left\{ i \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{R}}{\hbar(\alpha + \beta)} \right\}$$

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \exp \left\{ i \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{R}}{\hbar(\alpha + \beta)} \right\} u(\mathbf{r})$$

حال معادله اخیر را در معادله شرودینگر قرار می دهیم:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 + V(|\mathbf{r}|) - E_{\text{tot}} \right] u(\mathbf{r}) \exp \left\{ i \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{R}}{\hbar(\alpha + \beta)} \right\} = 0$$

$$\nabla_1^2 = \nabla_{\mathbf{r}}^2 + 2\alpha \vec{\nabla}_{\mathbf{R}} \cdot \vec{\nabla}_{\mathbf{r}} + \alpha^2 \nabla_{\mathbf{R}}^2$$

تمرین: با استفاده از سه رابطه
اخیر نشان دهید که:

$$\nabla_2^2 = \nabla_{\mathbf{r}}^2 - 2\beta \vec{\nabla}_{\mathbf{R}} \cdot \vec{\nabla}_{\mathbf{r}} + \beta^2 \nabla_{\mathbf{R}}^2$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 + V(|\mathbf{r}|) - E_{\text{tot}} \right] u(\mathbf{r}) \exp \left\{ i \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{R}}{\hbar(\alpha + \beta)} \right\} = 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \left[\nabla_{\mathbf{r}}^2 u(\mathbf{r}) + \frac{2i\alpha}{(\alpha + \beta)\hbar} \mathbf{p} \cdot \vec{\nabla}_{\mathbf{r}} u(\mathbf{r}) - \frac{\alpha^2 p^2}{(\alpha + \beta)^2 \hbar^2} u(\mathbf{r}) \right]$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2} \left[\nabla_{\mathbf{r}}^2 u(\mathbf{r}) - \frac{2i\beta}{(\alpha + \beta)\hbar} \mathbf{p} \cdot \vec{\nabla}_{\mathbf{r}} u(\mathbf{r}) - \frac{\beta^2 p^2}{(\alpha + \beta)^2 \hbar^2} u(\mathbf{r}) \right]$$

$$+ V(|\mathbf{r}|) u(\mathbf{r}) = E_{\text{tot}} u(\mathbf{r})$$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\hbar^2}{2m_1} \left[\nabla_{\mathbf{r}}^2 u(\mathbf{r}) + \frac{2i\alpha}{(\alpha + \beta)\hbar} \mathbf{p} \cdot \vec{\nabla}_{\mathbf{r}} u(\mathbf{r}) - \frac{\alpha^2 p^2}{(\alpha + \beta)^2 \hbar^2} u(\mathbf{r}) \right] \\
 & -\frac{\hbar^2}{2m_2} \left[\nabla_{\mathbf{r}}^2 u(\mathbf{r}) - \frac{2i\beta}{(\alpha + \beta)\hbar} \mathbf{p} \cdot \vec{\nabla}_{\mathbf{r}} u(\mathbf{r}) - \frac{\beta^2 p^2}{(\alpha + \beta)^2 \hbar^2} u(\mathbf{r}) \right] \\
 & + V(|\mathbf{r}|) u(\mathbf{r}) = E_{\text{tot}} u(\mathbf{r})
 \end{aligned}$$

$$\alpha = \gamma m_1 \text{ \& \; } \beta = \gamma m_2$$

حال α و β را طوری انتخاب می کنیم که
جملات مخلوط $\mathbf{p} \cdot \vec{\nabla}$ وجود نداشته باشد.

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\hbar^2}{2} \left\{ \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \nabla_{\mathbf{r}}^2 u(\mathbf{r}) + \left(\frac{2i\cancel{\gamma}}{(\alpha \cancel{+} \beta)\hbar} - \frac{2i\cancel{\gamma}}{(\alpha \cancel{+} \beta)\hbar} \right) \mathbf{p} \cdot \vec{\nabla}_{\mathbf{r}} \right. \\
 & \left. - \left(\frac{\gamma^2 m_1 p^2}{(\alpha + \beta)^2 \hbar^2} + \frac{\gamma^2 m_2 p^2}{(\alpha + \beta)^2 \hbar^2} \right) u(\mathbf{r}) \right\} + V(|\mathbf{r}|) u(\mathbf{r}) = E_{\text{tot}} u(\mathbf{r})
 \end{aligned}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}}^2 u(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})u(\mathbf{r}) = \left(E_{\text{tot}} - \frac{\gamma^2 (m_1 + m_2) p^2}{2(\alpha + \beta)^2} \right) u(\mathbf{r})$$

$$(\gamma m_1 + \gamma m_2)^2$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}}^2 u(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})u(\mathbf{r}) = \left(E_{\text{tot}} - \frac{p^2}{2(m_1 + m_2)} \right) u(\mathbf{r})$$

که این یک معادله شرودینگر تک ذره با انرژی $E = E_{\text{tot}} - p^2/(2(m_1 + m_2))$ است.

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}}^2 u(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})u(\mathbf{r}) = E u(\mathbf{r})$$

$$E = E_{\text{tot}} - \frac{p^2}{2(m_1 + m_2)}$$

که در آن E انرژی کل منهای انرژی جنبشی یک دستگاه دو ذره ای به جرم $m_1 + m_2$ که مرکز جرم آن با اندازه حرکت p در حال حرکت است.

کمیت γ با معادلات بالا هنوز تعیین نشده است، که می توان آن را به صورت زیر تعیین کرد:

$$[p_x, R_x] = \frac{\hbar}{i}$$

چون $\nabla_1 + \nabla_2 = \alpha \nabla_R$ یعنی $\mathbf{p}$ فقط به ∇_R (نه به ∇_r) بستگی دارد.

$$[p_{1x} + p_{2x}, \alpha x_1 + \beta x_2] = \cancel{\frac{\hbar}{i}} (\alpha + \beta) = \cancel{\frac{\hbar}{i}} \Rightarrow (\alpha + \beta) = 1$$

$$\alpha + \beta = \gamma(m_1 + m_2) = 1$$

$$\alpha = \gamma m_1 \text{ \& } \beta = \gamma m_2$$

$$\gamma = \frac{1}{m_1 + m_2}$$

$$\alpha = \frac{m_1}{m_1 + m_2}$$

$$\beta = \frac{m_2}{m_1 + m_2}$$

$$\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 = \mathbf{r} \quad \alpha \mathbf{r}_1 + \beta \mathbf{r}_2 = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2} = \mathbf{R}$$

پس $\alpha \mathbf{r}_1 + \beta \mathbf{r}_2$ همان مختصات مرکز جرم می شود.

دلیل این که چرا به شکل نسبتاً پیچیده فوق متغیرها را برای رسیدن از معادله دو ذره به معادله تک ذره از هم جدا کردیم این است که روش فوق در جدا کردن متغیرهای یک معادله شرودینگر تک ذره هم قابل استفاده است.

چنین جداسازی متغیرهایی امکان پذیر است وقتی که پتانسیل فقط به جدایی بین ذرات بستگی داشته باشد، که در این صورت هامیلتونی را می توان به صورت زیر نوشت:

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + V(r)$$

نکته: هامیلتونی فوق تحت دوران ناورد است.

زیرا (1) پتانسیل $V(r)$ در این صورت تابعی از فاصله از مبدا است.

پس پتانسیل بستگی به متغیرهای زاویه ای که جهت بردار $\mathbf{r}$ را نسبت به مبدا تعیین می کنند ندارد.

(2) p^2 نیز یک اسکالر، یعنی طول بردار $\mathbf{p}$ است و بنابراین مستقل از جهت گیری بردار $\mathbf{p}$ می باشد.

به طور هم ارز $p^2 = -\hbar^2 \nabla^2$ نیز تحت دوران ناورداست.

$$\begin{cases} x' = x \cos \theta - y \sin \theta \\ y' = x \sin \theta + y \cos \theta \end{cases}$$

تمرین: صحت این امر را با در نظر گرفتن حالت خاص یک دوران به اندازه زاویه θ حول محور z-ها تحقیق کنید.

$$r' = \sqrt{x'^2 + y'^2 + z'^2} = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} = r$$

اولا:

ثانیا

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial}{\partial y} \right)^2 = \left(\frac{\partial}{\partial x'} \right)^2 + \left(\frac{\partial}{\partial y'} \right)^2$$



$$= \left(\cos \theta \frac{\partial}{\partial x'} + \sin \theta \frac{\partial}{\partial y'} \right)^2 + \left(-\sin \theta \frac{\partial}{\partial x'} + \cos \theta \frac{\partial}{\partial y'} \right)^2$$

چون هامیلتونی با شرط فقط به فاصله بستگی داشتن پتانسیل تحت دوران ناورداست، ما توقع داریم که یک قانون بقاء دیگر بتوانیم به دست آوریم.

ناوردایی H تحت انعکاس



قانون بقاء زوجیت
و فردیت پاریته

$$[H, P] = 0$$

ناوردایی H تحت انتقال



قانون بقاء اندازه
حرکت خطی

$$[H, P] = 0$$

ناوردایی H تحت جایگشت



قانون بقاء پادفازن
فرمیونی و تقارن
بوزنی

$$[H, P] = 0$$

?

ناوردایی H تحت دوران



قانون بقاء اندازه
حرکت زاویه ای

$$[H, ?] = 0$$

مانند به دست آوردن قانون بقاء اندازه حرکت خطی که انتقال کوچک را در نظر گرفتیم، حال دورانه‌های کوچک یا خرد در نظر می‌گیریم:

دوران کوچک حول حول محور
z-ها:

$$\begin{cases} x' = x - \theta y \\ y' = \theta x + y \end{cases}$$

$$Hu_E(x - \theta y, y + \theta x, z) = Eu_E(x - \theta y, y + \theta x, z)$$

$$Hu_E(x, y, z) = Eu_E(x, y, z)$$

$$H(u_E(x - \theta y, y + \theta x, z) - u_E(x, y, z)) = E(u_E(x - \theta y, y + \theta x, z) - u_E(x, y, z))$$

$$u_E(x - \theta y, y + \theta x, z) = u_E(x, y, z) + \left[(-\theta y) \frac{\partial}{\partial x} + (\theta x) \frac{\partial}{\partial y} \right] u_E(x, y, z) + \dots$$

$$H \left[(-\cancel{\partial y}) \frac{\partial}{\partial x} + (\cancel{\partial x}) \frac{\partial}{\partial y} \right] u_E(x, y, z) = E \left[(-\cancel{\partial y}) \frac{\partial}{\partial x} + (\cancel{\partial x}) \frac{\partial}{\partial y} \right] u_E(x, y, z)$$

$$H \left[x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right] u_E(x, y, z) = E \left[x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right] u_E(x, y, z)$$

$$H \left[x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right] u_E(x, y, z) = \left[x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right] E u_E(x, y, z)$$

$$H \left[x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right] u_E(x, y, z) = \left[x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right] H u_E(x, y, z)$$

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

$$= x p_y - y p_x$$



حال تعریف می کنیم:

$$H L_z u_E(x, y, z) = L_z H u_E(x, y, z)$$

و چون همان طور که قبلا گفته ایم هر تابع موج را می توان بر حسب بردارهای پایه بسط داد، بنابراین

$$[H, L_z] = \frac{\hbar}{i} \frac{dL_z}{dt} = 0$$



$$L_z = \text{cte.}$$

که قانون بقاء مولفه L_z اندازه حرکت زاویه ای است.

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$$

عملگر L_z مولفه z عملگر اندازه حرکت زاویه ای است:

$$[H, L_x] = 0 \quad [H, L_y] = 0$$

اگر ما دوران حول محور x و y را جداگانه در نظر بگیریم، به طور مشابه به دست می آوریم که:

بنابراین هر سه مولفه اندازه حرکت زاویه ای با هم میلتونی جا به جا می شوند و ثابت حرکت اند.

بنابراین خود اندازه حرکت زاویه ای کل ثابت حرکت است. این مشابه کلاسیکی قانون بقاء اندازه حرکت زاویه ای کل در صورت وجود نیروهای مرکزی است.

حال ممکن است که تحریک شویم که ویژه توابع مشترک هامیلتونی و مولفه های اندازه حرکت زاویه ای را به دست آوریم، یعنی ویژه توابع مشترک عملگرهای زیر:

$$H, L_x, L_y, L_z$$

نکته: باید توجه کرد که عملگرهای فوق یک مجموعه کامل از متغیرهای جا به جا شونده را تشکیل نمی دهند، مثلاً:

$$[L_x, L_y] = [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z]$$

$$= [yp_z, zp_x] - [zp_y, zp_x] - [yp_z, xp_z] + [zp_y, xp_z]$$

$$= y[p_z, z]p_x - 0 - 0 + x[z, p_z]p_y$$

$$= \frac{\hbar}{i} yp_x - \frac{\hbar}{i} xp_y$$

$$[L_x, L_y] = \frac{\hbar}{i} (y p_x - x p_y) = i\hbar L_z$$

$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x$$

$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y$$

به
طور
مشابه:

$$[L_i, L_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k$$

یا به
طور
کلی:

بنابراین فقط یک مولفه از L را می توان انتخاب کرد که با H یک مجموعه جابه جا شونده از مشاهده پذیرها را تشکیل دهد.

اما می توانیم که کمی بهتر هم پیش برویم زیرا:

نکته: L^2 با L_x ، L_y و L_z جابه جا می شود.

نکته: پس می توان L^2 و H را با L_x یا L_y یا L_z به عنوان پایه انتخاب کرد.

$$[L_z, L^2] = [L_z, L_x^2 + L_y^2 + L_z^2]$$

$$= [L_z, L_x^2] + [L_z, L_y^2] + [L_z, \cancel{L_z^2}]$$

$$= [L_z, L_x^2] + [L_z, L_y^2]$$

$$= L_x [L_z, L_x] + [L_z, L_x] L_x + L_y [L_z, L_y] + [L_z, L_y] L_y$$

$$= \cancel{L_x} i\hbar L_y + i\hbar \cancel{L_y} L_x - \cancel{L_y} i\hbar L_x - i\hbar \cancel{L_x} L_y = 0$$

پس L^2 ، H و L_z یک مجموعه کامل از جابه جا شونده ها را تشکیل می دهند که می توان البته به آنها عملگر پاریته را نیز اضافه کرد.

اما چون L^2 همان طور که بعدا نشان خواهیم داد خود عملگر پاریته را نیز تعیین می کند، لذا نیازی به اضافه کردن عملگر پاریته نیست.

ما در فصل بعد عملگرهای اندازه حرکت زاویه ای را به طور مفصل مطالعه خواهیم کرد، و در اینجا فقط از آنها استفاده می کنیم تا معادله شرودینگر را ساده کنیم.

$$L^2 = (\mathbf{r} \times \mathbf{p})^2$$

ابتدا ثابت می کنیم
که:

$$L^2 = [(\mathbf{r} \times \mathbf{p})_x]^2 + [(\mathbf{r} \times \mathbf{p})_y]^2 + [(\mathbf{r} \times \mathbf{p})_z]^2$$

$$= -\hbar^2 \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

$$-\hbar^2 \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

$$-\hbar^2 \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

تمرین: عبارت روبه رو را ساده
کنید و نشان دهید که:

$$L^2 = r^2 p^2 - (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p})^2 + i\hbar \mathbf{r} \cdot \mathbf{p}$$

$$L^2 = r^2 p^2 - (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p})^2 + i\hbar \mathbf{r} \cdot \mathbf{p}$$

راه ساده تری هم برای به دست آوردن رابطه فوق وجود دارد که در زیر به آن پرداخته می شود:

$$L^2 = \sum_k L_k L_k = \sum_k (\mathbf{r} \times \mathbf{p})_k (\mathbf{r} \times \mathbf{p})_k$$

$$= \sum_k \left(\sum_{ij} \varepsilon_{ijk} r_i p_j \right) \left(\sum_{lm} \varepsilon_{lmk} r_l p_m \right)$$

$$= \sum_{ijlmk} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{lmk} r_i p_j r_l p_m$$

$$= \sum_{ijlm} (\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}) r_i p_j r_l p_m$$

$$[p_j, r_l] = \frac{\hbar}{i} \delta_{jl}$$

$$= \sum_{ijlm} \delta_{il} \delta_{jm} r_i p_j r_l p_m - \sum_{ijlm} \delta_{im} \delta_{jl} r_i p_j r_l p_m$$

$$[p_m, r_l] = \frac{\hbar}{i} \delta_{lm}$$

$$= \sum_{ijlm} \delta_{il} \delta_{jm} r_i (r_l p_j - i\hbar \delta_{lj}) p_m - \sum_{ijlm} \delta_{im} \delta_{jl} r_i p_j (p_m r_l + i\hbar \delta_{ml})$$

$$= r^2 p^2 - i\hbar \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} - \sum_{ijlm} \delta_{im} \delta_{jl} r_i p_j p_m r_l - i\hbar \mathbf{r} \cdot \mathbf{p}$$

$$= r^2 p^2 - 2i\hbar \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} - \sum_{ijlm} \delta_{im} \delta_{jl} r_i p_m p_j r_l$$

$$= r^2 p^2 - 2i\hbar \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} - \sum_{ijlm} \delta_{im} \delta_{jl} r_i p_m (r_l p_j - i\hbar \delta_{lj})$$

$$= r^2 p^2 - 2i\hbar \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} - (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p})^2 + i\hbar \sum_{ijlm} \delta_{im} \delta_{jl} \delta_{lj} r_i p_m$$

$$\sum_j \delta_{jj} = 3$$

$$= r^2 p^2 - 2i\hbar \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} - (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p})^2 + i\hbar \sum_{jl} \delta_{jl} \delta_{jl} \sum_{im} \delta_{im} r_i p_m$$

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}$$

$$= r^2 p^2 - 2i\hbar \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} - (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p})^2 + 3i\hbar \mathbf{r} \cdot \mathbf{p}$$

$$L^2 = r^2 p^2 - (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p})^2 + i\hbar \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \quad \checkmark$$

$$p^2 = \frac{1}{r^2} L^2 + \frac{1}{r^2} \left[\left(r \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r} \right) \left(r \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r} \right) \right] - \frac{i\hbar}{r^2} r \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r}$$

$$p^2 = \frac{1}{r^2} L^2 - \hbar^2 \frac{1}{r^2} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 - \hbar^2 \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}$$

پس معادله شرودینگر به صورت زیر در می آید

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r^2} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{\hbar^2 r^2} L^2 \right] + V(r)$$

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + V(r)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r^2} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{\hbar^2 r^2} L^2 \right] u_E(\mathbf{r}) + V(r)u_E(\mathbf{r}) = Eu_E(\mathbf{r})$$

در واقع دو جمله اول داخل کروشه رابطه فوق همان بخش شعاعی عملگر لاپلاسی است. پس بخش باقی مانده یعنی جمله سوم باید بخش زاویه ای عملگر لاپلاسی باشد.

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\nabla_r^2 + \frac{1}{r^2} \nabla_{\theta,\varphi}^2 \right] u_E(\mathbf{r}) + V(r)u_E(\mathbf{r}) = Eu_E(\mathbf{r})$$

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

$$\nabla_r^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \quad \nabla_{\theta,\varphi}^2 = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

$$L^2 = -\hbar^2 \nabla_{\theta,\varphi}^2$$

$$\nabla^2 = \nabla_r^2 + \frac{1}{r^2} \nabla_{\theta,\varphi}^2$$

$$\nabla_r^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) = \frac{1}{r^2} \left(2r \frac{\partial}{\partial r} + r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right) = \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2}$$

$$\nabla_r^2 = \frac{1}{r^2} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} = \frac{1}{r^2} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}$$

$$= \frac{1}{r^2} \left(r \frac{\partial}{\partial r} + r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} = \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} \quad \checkmark$$

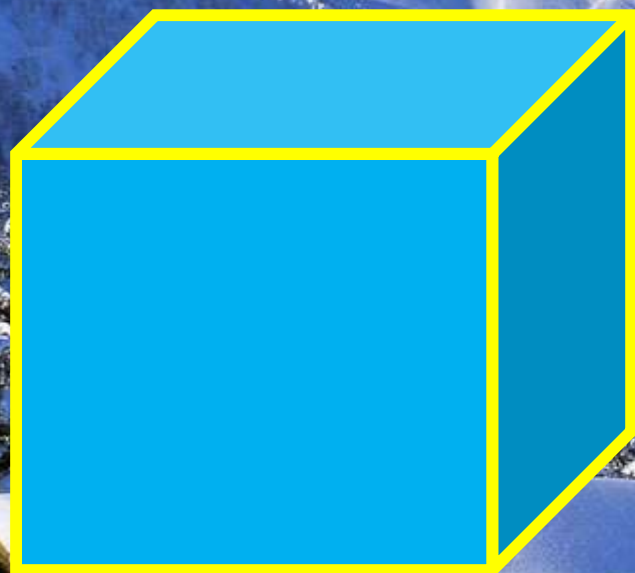
در فصل بعد متغیرهای زاویه ای را از متغیر شعاعی با استفاده از عملگرهای اندازه حرکت زاویه ای جدا می کنیم:

$$u_E(\mathbf{r}) = Y_{lm}(\theta, \varphi) R(r)$$

حالا ادامه نمی دهیم و متغیرها را جدا نمی کنیم. بحث را فعلا در اینجا متوقف و در فصل بعد به معرفی کامل تقارن زاویه ای می پردازیم.

تا کنون به بحث پیرامون کاهش مساله ویژه مقدار سه بعدی در دستگاه مختصات کروی پرداخته ایم زیرا برای حل اتم هیدروژن به پتانسیلهایی از نوع $V=V(r)$ علاقه مندیم.

در فیزیک حالت جامد به پتانسیلهایی با تقارن کارتزی روبه روی می شویم، که در اینجا به مطالعه آن خواهیم پرداخت:



$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 \\ \infty \end{cases}$$

درون جعبه

روی دیواره ها و خارج جعبه

$$u_E(x, y, z) = \left(\frac{2}{L}\right)^{3/2} \sin \frac{n_1 \pi x}{L} \sin \frac{n_2 \pi y}{L} \sin \frac{n_3 \pi z}{L}$$

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$$

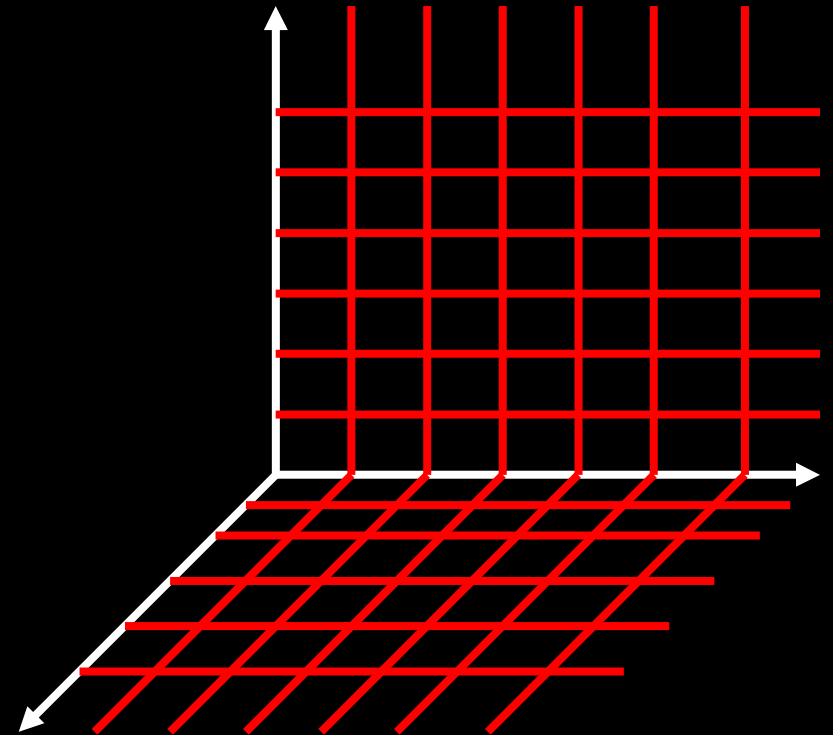
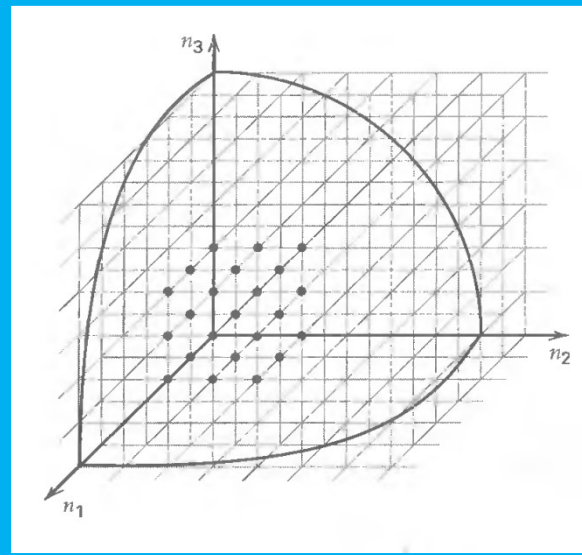
What is the lowest energy of a set of 24 electrons in a cubical box? What would it be in the absence of the exclusion principle?

SOLUTION The energy in units of $\frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$ is $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2$ with $(n_1, n_2, n_3) = 1, 2, 3, \dots$. The energies and the number of electrons for each energy, corresponding to the integers are, in order,

$(1, 1, 1) \rightarrow 3$	2 electrons
$(2, 1, 1), (1, 2, 1), (1, 1, 2) \rightarrow 6$	$3 \times 2 = 6$ electrons
$(2, 2, 1), (2, 1, 2), (1, 2, 2) \rightarrow 9$	$3 \times 2 = 6$ electrons
$(3, 1, 1), (1, 3, 1), (1, 1, 3) \rightarrow 11$	$3 \times 2 = 6$ electrons
$(2, 2, 2) \rightarrow 12$	2 electrons
$(3, 2, 1), (3, 1, 2), (2, 3, 1), (2, 1, 3), (1, 2, 3), (1, 3, 2) \rightarrow 14$	12 electrons

We see that energy levels 3, 6, 9, 11, 12 can hold 22 electrons, so that the remaining 2 electrons are in the energy 14 levels. Thus the total energy in our units is $(2 \times 3) + (6 \times 6) + (6 \times 9) + (6 \times 11) + (2 \times 12) + (2 \times 14) = 214$. In the absence of the exclusion principle, all of the electrons would go into the lowest energy state, so that the total energy would be $24 \times 3 = 72$.

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = R^2 = \frac{2mE_F}{\hbar^2 \pi^2} L^2$$



$$k_x = \frac{\pi}{L} n_x$$

$$n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

تعداد
الکترونها

$$\frac{k_F^3}{3\pi^2} = \frac{N}{V} = n$$

حجم وابسته به یک
نقطه k

$$\frac{(2\pi)^3}{V} \frac{N}{2} = \frac{4}{3} \pi k_F^3$$

حجم کره
فرمی

$$\frac{k_F^3}{3\pi^2} = \frac{N}{V} = n$$

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$$

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$$

$$n = \frac{\pi}{3} \left(\frac{k_F}{\pi} \right)^3$$

$$\pi \left(\frac{3n}{\pi} \right)^{1/3} = k_F$$

$$E_F = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{3n}{\pi} \right)^{2/3}$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2$$

$$E_{\text{tot}} = 2 \times \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \sum_{n_x, n_y, n_z \geq 0} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

$$\begin{aligned} E_{\text{tot}} &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{mL^2} \frac{1}{8} \int \mathbf{n}^2 d^3 \mathbf{n} \\ &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{8mL^2} 4\pi \int_0^R n^4 dn \\ &= \frac{\hbar^2 \pi^3}{10mL^2} R^5 \end{aligned}$$

$$E_{\text{tot}} = \frac{\hbar^2 \pi^3}{10m} \left(\frac{3N}{\pi} \right)^{5/3} V^{-2/3}$$

چرا؟!

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = R^2 = \frac{2mE_F}{\hbar^2 \pi^2} L^2$$

$$k_F = \left(\frac{2mE_F}{\hbar^2} \right)^{1/2}$$

$$\frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} R^3 = \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} \left(\frac{2mE_F}{\hbar^2 \pi^2} L^2 \right)^{3/2}$$

$$\frac{k_F^3}{3\pi^2} = \frac{N}{V} = n$$

$$N = L^3 \frac{k_F^3}{3\pi^2}$$

$$N = \frac{\pi}{3} L^3 \left(\frac{k_F}{\pi} \right)^3$$

$$N = \frac{\pi}{3} L^3 \left(\frac{2mE_F}{\hbar^2 \pi^2} \right)^{3/2}$$

$$\frac{3}{\pi} \frac{N}{L^3} = \left(\frac{2mE_F}{\hbar^2 \pi^2} \right)^{3/2}$$

$$\frac{3N}{\pi} = \left(\frac{2mE_F}{\hbar^2 \pi^2} L^2 \right)^{3/2}$$

$$\left(\frac{3N}{\pi} \right)^{2/3} = \frac{2mE_F}{\hbar^2 \pi^2} L^2 = R^2$$

$$\begin{aligned} E_{\text{tot}} &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{mL^2} \frac{1}{8} \int \mathbf{n}^2 d^3 \mathbf{n} \\ &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{8mL^2} 4\pi \int_0^R n^4 dn \\ &= \frac{\hbar^2 \pi^3}{10mL^2} R^5 \end{aligned}$$

$$E_{\text{tot}} = \frac{\hbar^2 \pi^3}{10m} \left(\frac{3N}{\pi} \right)^{5/3} V^{-2/3}$$