کنفرانس فیزیک ریاضی ایران
۱۲دی ماه ۱۳۹۸- دانشگاه صنعتی قم
4th Iranian Conference on Mathematical Physics

بررسی و تحلیل پتانسیل های غیر مرکزی در سیستم‌های کوانتومی

فریده داوری
دانشجوی کارشناسی ارشد فیزیک، دانشگاه شاهد، تهران، ایران
advaridm@gmail.com

زهرا بخشی
استادیار گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شاهد، تهران، ایران
z.bakhshi@shahed.ac.ir

چکیده

یکی از کارآمدترین روش محاسبه طیف انرژی حالت‌های مقید، مقایسه مدل‌های نسبیتی با مدل‌های قابل‌حل غیرنسبیتی است که برای پتانسیل‌های غیرمرکزی هارتمن و رینگ-شیپد به کار گرفته می شود. در این روش معادله دیراک با فرض برابری پتانسیل‌های اسکالر و برداری در نظر گرفته می شود و دو معادله برای هر مولفه اسپینور ایجاد می‌شود. سپس با جداسازی معادله دیفرانسیل درجه دو، یک معادله شرودینگر گونه بدست می آید که اگر با معادله قابل‌حل غیرنسبیتی مقایسه شود، طیف انرژی محاسبه خواهد شد.

کلید واژه‌ها: *سیستم‌های کوانتومی، پتانسیل های هارتمن و رینگ - شیپد، معادله شرودینگر.*

Investigation and analysis of non-central potentials in the quantum systems

Davari, Faride; Bakhshi, Zahra

Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Shahed University, Tehran, Iran

Abstract

One of the most efficient method of calculating the energy spectrum of bound states is comparison relativistic models with non-relativistic solvable models that is used for Hartmann and Ring-Shaped non-central potentials. In this method, Dirac equation is considered by assuming equality of scalar and vector potentials and two equations are created for each component spinor. Then, by separating the second-order differential equations, a like-Schrödinger equation is obtained that the energy spectrum will be calculated, if it is compared with the non-relativistic solvable equation.

Key words: *quantum systems, Hartmann and Ring-Shaped Potentials.*

PACS No. (2)

مقدمه

از سال ۱۹۲٦ که تئوری موسوم به مکانیک کوانتومی، پای به عرصه نهاد. روش‌های مختلفی برای پیدا کردن طیف انرژی دقیق حالت‌های مقید در سیستم‌های کوانتومی ثابت توسعه یافت. شناخت این طیف‌ها در بسیاری از زمینه‌های فیزیک و شیمی نظری ضروری است[٤-١].برای محاسبه طیف انرژی دقیق پتانسیل‌های غیرمرکزی هارتمن و رینگ-شیپد، معادله دیراک را در سه بعد حل می‌کنیم. به این صورت که پتانسیل‌های اسکالر و برداری را برابر فرض می کنیم درنتیجه دو معادله دیفرانسیل برای اجزای اسپینور ایجاد می شود[٦-٥]. یک معادله دیفرانسیل خطی درجه دو برای اسپینور بالا و دیگری معادله دیفرانسیل درجه یک برای اسپینور پایین که بر مبنای اسپینور بالا می‌باشد. دراین مقاله، ابتدا در بخش شعاعی معادله دیراک، طیف انرژی نسبیتی را در مقایسه با طیف انرژی غیرنسبیتی بدست می‌آوریم و سپس به بخش زاویه‌ای معادله دیراک برای پتانسیل‌های مرتبط به مختصات θ با توجه به تابع‌های مختلف θ و پارامترهای نسبیتی می‌پردازیم.

راه حل های بخش شعاعی

فرم کلی پتانسیل‌های هارتمن و رینگ-شیپد به صورت

$$V(r,\theta)=V(r)+\frac{f(\theta)}{2r^2} \quad (۱)$$

است. بخش شعاعی پتانسیل را می‌توان به عنوان پتانسیل نوسانگر هماهنگ $V(r)=Kr^2$ و یا پتانسیل کلمب $V(r)=-\frac{1}{2}\left(\frac{V_0\lambda}{r}\right)$ در نظر گرفت[۸ و۷]. که در آن V_0 ، λ و K برای پتانسیل‌های مربوطه پارامترهای آزاد هستند

معادله مستقل از زمان دیراک برای پتانسیل اسکالر و برداری دلخواه به صورت زیر است:

$$\left[c\,\vec{\alpha}.\vec{P}+\beta\left(Mc^2+\vec{s}(\vec{r})\right)\right]\Psi(\vec{r})=[\varepsilon-V(\vec{r})]\Psi(\vec{r}) \quad (۲)$$

پارامترهای $\vec{P}=-i\hbar\vec{\nabla}$ و $\alpha=\begin{pmatrix}0&\vec{\sigma}\\\vec{\sigma}&0\end{pmatrix}$ و $\beta=\begin{pmatrix}I&0\\0&-I\end{pmatrix}$ در ۲ تعریف شده‌اند. که $\vec{\sigma}$ ماتریس‌های برداری پائولی و I ماتریس واحد هستند.نمایش دیراک پائولی، $\Psi(\vec{r})=\begin{pmatrix}\varphi(\vec{r})\\X(\vec{r})\end{pmatrix}$ است که در آن $\varphi(\vec{r})$ و $X(\vec{r})$ اجزای اسپینور هستند. حال از معادلات اسپینور استفاده می‌کنیم:

$$c\,\vec{\sigma}.\vec{P}_X(\vec{r})=[\varepsilon-V(\vec{r})-Mc^2-s(\vec{r})]\varphi(\vec{r}) \quad (۳)$$

$$c\,\vec{\sigma}.\vec{P}_\varphi(\vec{r})=[\varepsilon-V(\vec{r})+Mc^2+s(\vec{r})]X(\vec{r}) \quad (۴)$$

با فرض $s(\vec{r})=V(\vec{r})$ یا $s(\vec{r})=-V(\vec{r})$ وترکیب ۳ و ۴ دو معادله دیفرانسیل برای هر جز اسپینور ساخته می‌شود:

$$X(\vec{r})=\left[\frac{c\vec{\sigma}.\vec{P}}{\varepsilon+Mc^2}\right]\varphi(\vec{r}) \quad (۵)$$

$$\left[c^2\vec{P}^2+2(\varepsilon+Mc^2)V(\vec{r})\right]\varphi(\vec{r})=[\varepsilon^2-M^2c^4]\varphi(\vec{r}) \quad (۶)$$

با درنظر گرفتن تعاریف $\vec{P}$ و $V(\vec{r})$ در ۶ برای مولفه $\varphi(\vec{r})$ معادله شرودینگر گونه زیر بدست می‌آید:

$$\left[-\hbar^2c^2\vec{\nabla}^2-(\varepsilon+Mc^2)\left(\frac{V_0\lambda}{r}-\frac{f(\theta)}{r^2}\right)\right]\varphi(\vec{r})=[\varepsilon^2-M^2c^4]\varphi(\vec{r}) \quad (۷)$$

با در نظر گرفتن $\varphi(\vec{r})=\frac{1}{r}u(r)\Theta(\theta)\phi(\varphi)$ ، ۷، به سه معادله دیفرانسیل در ۳ بعد r و θ و φ به صورت زیرجدا می‌شود:

$$\frac{1}{\phi}\frac{d^2\phi}{d\varphi^2}=-m^2 \quad (۸)$$

$$-\frac{d^2u(r)}{dr^2}+\left[\frac{P}{r^2}+2\frac{(\varepsilon+Mc^2)}{\hbar^2c^2}V(r)\right]u(r)=\frac{(\varepsilon^2-M^2c^4)}{\hbar^2c^2}u(r) \quad (۹)$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta}\right)\left[\frac{m^2}{\sin^2\theta}+(\varepsilon-M^2c^4)f(\theta)-s\right]\Theta(\theta)=0 \quad (۱۰)$$

الف- پتانسیل کلمب را در قسمت شعاعی ۹، جایگزین می کنیم. در نتیجه یک معادله شرودینگر گونه خواهیم داشت[۶و۵]:

$$\frac{d^2u(r)}{dr^2}+\left[\frac{(\varepsilon^2-M^2c^4)}{\hbar^2c^2}-\frac{P}{r^2}+\left(\frac{\varepsilon+Mc^2}{\hbar^2c^2}\right)\frac{V_0\lambda}{r}\right]u(r)=0 \quad (۱۱)$$

با توجه به سیستم واحد $(\hbar=2m=1)$، اگر ۱۱ را با مدل قابل حل غیرنسبیتی زیر مقایسه کنیم[۱۰و۹]:

$$\frac{d^2u_{n,l}(r)}{dr^2}+\left(E-V(r)\right)u_{n,l}(r)=0 \quad (۱۲)$$

با حل دقیق براساس چندجمله‌ای‌های لاگر عمومی، نتایج معادله غیرنسبیتی به مدل‌های نسبیتی گسترش می‌یابد و مدل نسبیتی برای پتانسیل کلمب به فرم زیر خواهد شد:

$$\frac{d^2u_{(r)}}{dr^2}+\left[-\frac{e^4}{4(n+l+1)}-\frac{l(l+1)}{r^2}+\frac{e^2}{r}\right]u(r)=0 \quad (۱۳)$$

لذا پارامترهای نسبیتی به پارامترهای غیرنسبیتی به صورت $\left(\frac{\varepsilon+Mc^2}{c^2}\right)V_0\lambda=e^2$ و $\frac{\varepsilon^2-M^2c^4}{c^2}=-\frac{e^4}{4(n+l+1)^2}$ و $P=l(l+1)$ مرتبط می‌شوند. و با فرض $\tau=\frac{V_0\lambda}{2c(n+l+1)}$، انرژی نسبیتی با ترکیب روابط پارامترها، به صورت $\varepsilon=Mc^2\frac{1-\tau^2}{1+\tau^2}$ محاسبه می‌شود[۱۱]. در مدل غیرنسبیتی جواب دقیق برای ۱۲ به عنوان $u_{n,l}(r)=f(r)F\left(g(r)\right)$ درنظرگرفته می‌شود[۱۰و۹]. که در آن $F\left(g(r)\right)$ یک تابع خاص براساس تابع داخلی $g(r)$ است. چند جمله‌ای‌های لاگر عمومی در۱۳ صدق می‌کنند و بنابراین ۱۳را می‌توان به معادله شرودینگر گونه ۱۱ بخش شعاعی گسترش داد. اگر تابع موج غیرنرمال زیر، با معادله دیفرانسیل۱۳ برای تابع داخلی $g(r)=\left(\left(\frac{e^2}{(n+l+1)}\right)r\right)$ مرتبط شود[۱۰و ۹]:

$$u_{n,l,}(r)\propto g^{(l+1)}\exp\left(-\frac{g}{2}\right)L_n^{2l+1}(g(r)) \qquad (۱٤)$$

تابع موج شعاعی به عنوان معادله دیفرانسیل ۱۱ به صورت:

$$u^{(1)}{}_{n,l,}(r)\propto(2kr)^{l+1}\exp(-kr)L_{n-l-1}^{2l+1}(2kr) \qquad (۱۵)$$

است که در آن $k=\frac{e^2}{2(n+l+1)}$ و $0<r<+\infty$ است.مشاهده می‌شود که تابع موج ۱۵ یک تابع انتگرال پذیر مجذوری در نقاط پایانی فاصله $(0,\infty)$ است، پس از لحاظ فیزیکی در محدوده پارامتر L قابل قبول خواهد بود.

ب- این بار پتانسیل نوسانگر هماهنگ را در قسمت شعاعی ۹، جایگزین می‌کنیم و مثل روش الف یک معادله شرودینگر گونه خواهیم داشت:

$$\frac{d^2u(r)}{dr^2}+\left[\frac{(\varepsilon^2-M^2c^4)}{\hbar^2c^2}-\frac{P}{r^2}+\left(\frac{(\varepsilon+Mc^2)}{\hbar^2c^2}\right)(2kr^2)\right]u(r)=0 \qquad (۱٦)$$

مدل حل غیرنسبیتی براساس ۱۲ فرم زیر را دارد:

$$\frac{d^2u(r)}{dr^2}+\left[2n\omega+\left(l+\frac{3}{2}\right)\omega-\frac{l(l+1)}{r^2}-\frac{1}{4}\omega^2r^2\right]u(r)=0 \qquad (۱۷)$$

از مقایسه ۱٦ و۱۷ روابط پارامترهای نسبیتی و غیرنسبیتی بدست می‌آیند و انرژی نسبیتی با ترکیب روابط پارامترها به صورت زیر است:

$$(\varepsilon-Mc^2)^2(\varepsilon+Mc^2)=8kc^2\left(2n+l+\frac{3}{2}\right) \qquad (۱۸)$$

در مدل حل غیرنسبیتی، معادله موجی که با ۱۷ مرتبط می‌شود، $u_{n,l,}(r)\propto g^{\frac{(l+1)}{2}}\exp\left(-\frac{g}{2}\right)L_n^{\left(l+\frac{1}{2}\right)}(g(r))$ هست که در آن، $g(r)=\frac{1}{2}\omega r^2$ است. می توان بخش شعاعی تابع موج اسپینور را به ۱٦ مطابقت داد و با بررسی شرایط انتگرال‌پذیر مجذوری تابع موج اسپینور از نظر فیزیکی قابل قبول خواهد بود[۱۱].

راه حل‌های بخش زاویه‌ای

بخش زاویه‌ای معادله دیراک برای پتانسیل‌های هارتمن و رینگ - شیپد، به صورت زیر است[٦و٥]:

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta}\right)-\left[\frac{m^2}{\sin^2\theta}+(\varepsilon+M^2c^4)f(\theta)-s\right]=0 \qquad (۱۹)$$

با فرض $\Theta(\theta)=\frac{H(\theta)}{\sin^{\frac{1}{2}}\theta}$، جمله دیفرانسیل مرتبه اول از معادله ۱۹حذف می‌شود. این تغییر، شرایطی که معادله شرودینگر گونه از ۱۹ قابل دسترسی است را فراهم می‌کند و با توجه به تغییر ذکر شده ۱۹ تبدیل می‌شود به:

$$\frac{d^2H(\theta)}{d\theta^2}+\left[-\frac{\left(m^2-\frac{1}{4}\right)}{\sin^2\theta}-(\varepsilon+Mc^2)f(\theta)+P+\frac{1}{4}\right]H(\theta)=0 \qquad (۲۰)$$

در مقایسه ۲۰ با معادله قابل حل شرودینگر زیر $(\hbar=2m=1)$ [۱۰و۹]:

$$\frac{d^2H(x)}{dx^2}+[E-V(x)]H(x)=0 \qquad (۲۱)$$

۲۰ با توجه به انواع مختلف $f(\theta)$، حل می‌شود یعنی راه حل ۲۱ برای طیف انرژی غیرنسبیتی و پتانسیل‌های مختلف، به معادله شرودینگر گونه بدست آمده از معادله دیراک گسترش خواهد یافت. در این مقایسه، پارامترهای نسبیتی به پارامترهای غیرنسبیتی متصل می‌شوند. در ضمن، این روش برای توابع خاص قابل استفاده است. بنابراین توابع $f(\theta)$ که می‌توانند در این تکنیکها حل شوند عبارتند از: $f_1(\theta)=\frac{\gamma+\beta\cos\theta+\alpha\cos^2\theta}{\sin^2\theta}$ و $f_2(\theta)=\frac{\gamma+\beta\cos^2\theta+\alpha\cos^4\theta}{\sin^2\theta\cos^2\theta}$ و $f_3(\theta)=\gamma+\beta\cot\theta+\alpha\cot^2\theta$ می‌باشند[٦و٥]. که درآنها α ، β و γ مقادیر ثابت دلخواه هستند. توابع بالا توابع قابل حلی هستند که به عنوان پتانسیل‌های هارتمن و رینگ - شیپد درنظر گرفته شده‌اند.اگر $f_1(\theta)$ در ۲۰جایگزین شود:

$$\frac{d^2H(\theta)}{d\theta^2}+\left\{\left[\left(-m^2+\frac{1}{4}\right)-\eta(\gamma+\alpha)\right]\csc^2\theta-\eta\beta\csc\theta\cot\theta+\eta\alpha+P+\frac{1}{4}\right\}H(\theta)=0 \qquad (۲۲)$$

که در آن $\eta=\varepsilon+Mc^2$ است. حال ۲۲ را با معادله شرودینگر زیر مقایسه می‌کنیم: $(\hbar=2m=1)$ [۱۰و۹].

$$\frac{d^2H(x)}{dx^2}+[-(\lambda^2+s^2-s)\csc^2x+\lambda(2s-1)\csc x\cot x+(s+n)^2]$$

$$H(x)=0 \qquad (۲۳)$$

پارامترهای مدل غیرنسبیتی و مدل نسبیتی با مقایسه ۲۲ و ۲۳ به هم مرتبط می‌شوند. تابع موجی که به ۲۲ وابسته است براساس چند جمله‌ای‌های ژاکوبی $P_n^{(\mu,\nu)}\left(g(x)\right)$ نوشته می‌شود، که در آن $\mu>-1$، $\nu>-1$ و $n=0,1,2,\ldots$ است. با توجه به تعریف پارامترهای $\mu=-\lambda+s-\frac{1}{2}$ و $\nu=\lambda+s-\frac{1}{2}$ در چندجمله‌ای‌های ژاکوبی، s و λ به ترتیب با $s>-\frac{1}{2}$ و $-\left(s+\frac{1}{2}\right)<\lambda<\left(s+\frac{1}{2}\right)$ محدود خواهند شد.

با استفاده از روابط پارامتری نسبیتی و غیرنسبیتی ثابت جداسازی P به صورت، $P=(s+n)^2-\alpha\left(\varepsilon+Mc^2\right)-\frac{1}{4}$ محاسبه می‌شود. و اگر شرایط $P+\frac{1}{4}\geq 0$ درنظر گرفته شود، محدوده انرژی نسبیتی به صورت $\varepsilon\geq\frac{1}{\alpha}(s+n)^2-Mc^2$ خواهد بود [۱۱]. اگر $\alpha>0$ باشد ممکن است مقادیر مثبت برای انرژی نسبیتی ارائه شود. تابع موج غیرنرمالی که با معادله دیفرانسیل قابل حل ۲٤ ارتباط دارد هست:[۱۰و۹].

$$H(x)=\left(1-g\right)^{\frac{(s-\lambda)}{2}}(1+g)^{\frac{(s+\lambda)}{2}}.P_n^{\left(-\lambda+s-1/2.\lambda+s-1/2\right)}\left(g(x)\right) \qquad (۲٤)$$

برای $g(x)=\cos x$ است. با توجه به تابع ۲٤، تابع موج برای معادله دیفرانسیل ۲۲ به صورت زیر درمی‌آید:

$$H(\theta)=\left(1-\cos\theta\right)^{\frac{(s-\lambda)}{2}}(1+\cos\theta)^{\frac{(s+\lambda)}{2}}.P_n^{\left(-\lambda+s-1/2.\lambda+s-1/2\right)}(\cos\theta)$$

(۲۵)

با توجه به $\Theta(\theta)=\frac{H(\theta)}{\sin^{\frac{1}{2}}\theta}$، بخش زاویه‌ای معادله دیراک به صورت

$$\Theta^{(1)}(\theta)=2^{s-1}(\sin\theta)^{s-\lambda-\frac{1}{2}}(\cos\theta)^{s+\lambda-\frac{1}{4}}.\,P_n^{(-\lambda+s-1/2.\lambda+s-1/2)}(\cos\theta) \qquad (۲٦)$$

که در آن $-\frac{\pi}{2}\leq\theta\leq+\frac{\pi}{2}$ است. وقتی $\theta\rightarrow\pm\frac{\pi}{2}$ می‌رود، تابع موج به صورت $\Theta(\theta)\rightarrow 0$ محدود شده است، اگرچه ایجاد شرایط فیزیکی ذکر شده و همچنین اجتناب از واگرایی تابع موج ۲۷ در $\theta=0$، باعث تغییر حدود پارامترهای s و λ به $s>\frac{3}{8}$ و $-\left(s+\frac{1}{4}\right)<\lambda<\left(s-\frac{1}{2}\right)$ خواهد شد. تکنیک‌های ذکر شده به تابع‌های θ دیگر، یعنی $f_2(\theta)$ و $f_3(\theta)$ گسترش می‌یابد[۱۱] .

نتیجه گیری

در این مقاله طیف انرژی حالت های مقید نسبیتی را براساس طیف انرژی حالت های مقید غیرنسبیتی برای پتانسیل‌های غیرمرکزی هارتمن و رینگ–شیپد، بدست آوردیم. به این ترتیب که ابتدا با استفاده از تعریف ماتریس‌های پائولی، معادله مستقل از زمان دیراک را به معادله شرودینگر گونه تبدیل کرده و آن را به دو بخش زاویه‌ای و شعاعی تفکیک کردیم. سپس در هر قسمت، پارامترهای نسبیتی و حدودشان را با درنظر گرفتن راه حل روش‌های غیرنسبیتی مربوط به مسئله و حدود پارامترهای غیرنسبیتی مورد بررسی قرار دادیم. با این روش توابع موج اسپینوری برای پتانسیل های غیرمرکزی ذکرشده در جملاتی وابسته به چند جمله‌ای‌های متعامد لاگر و ژاکوبی در قسمت‌های شعاعی و زاویه‌ای معادله دیراک بدست می‌آیند.

مرجع‌ها

[۱] B. Bentag and L. Chetouani,*Czechoslovak Journal of Phys*, vol. ۵۰, no.۵, pp. ۵۹۳–۶۰۶, ۲۰۰۰.
[۲] Z. Q. Ma and B.W. Xu, *Europhys Letters*, vol. ۶۹, p. ۶۸۵, ۲۰۰۵.
[۳] S.-A. Yahiaoui and M. Bentaiba, *International Journal of Theoretical Phys*, vol. ۴۸, no. ۲, pp. ۳۱۵–۳۲۲, ۲۰۰۹.
[۴] A. Gharbi and A. Bouda,*Physica Scripta*,vol. ۸۸, Article ID۰۴۵۰۰۷,۲۰۱۳.
[۵] G. Chen,*Phys Letters A*, vol. ۳۳۹, no. ۳-۵, pp. ۳۰۰–۳۰۳, ۲۰۰۵.
[۶] A. de Souza Dutra and M.Hott,*Phys Letters A*, vol. ۳۵۶, no. ۳, pp. ۲۱۵–۲۱۹, ۲۰۰۶.
[۷] S. W. Qian, B. W. Huang, D. Y. Wang, and Z. Y. Gu, *Communications in Theoretical Phys*, vol. ۳۸, p. ۱۳۹, ۲۰۰۲.
[۸] C. Berkdemir,*Journal of Mathematical Chemistry*, vol. ۴۶, no. 1, pp۱۳۹–۱۵۴, ۲۰۰۹.
[۹] G. Lev´ai, ,*Journal of Phys A: Mathematical and General*, vol. ۲۲, no. ۶, pp. ۶۸۹–۷۰۲, ۱۹۸۹.
[۱۰] H. Panahi and Z. Bakhshi, *Acta Physica Polonica B*, vol. ۴۱, p. ۱۱, ۲۰۱۰.
[۱۱] Z. Bakhsi ,*Advances in High Energy Phys*,(۲۰۱۸).