تقارن در کوانتم‌مکانیک، و تبه‌گنی یِ همیلتنی [1]

محمد خرمی mamwad@mailaps.org X1-001 (2001/02/21)

رابطه یِ تقارن‌ها یِ یکانی یِ سیستم‌ها یِ کوانتمی یِ مستقل‌اززمان با تبه‌گنی یِ همیلتنی بررسی می‌شود. نشان داده می‌شود همیلتنی یِ سیستم تبه‌گن است اگر و تنها اگر سیستم تقارن نابدیهی داشته باشد.

1 سیستم‌ها یِ کوانتمی یِ مستقل‌اززمان

هر سیستم ِ کوانتمی با یک فضا یِ هیلبِرت [a] ($\mathbb{H}$) و یک عمل‌گر ِ یکانی یِ تحول ($\mathcal{U}(t,t')$) مشخص می‌شود. حالت ِ این سیستم ِ کوانتمی یک بردار در فضا یِ هیلبِرت [a] است ($|\psi(t)\rangle$) که تحول ِ آن از

$$|\psi(t)\rangle = \mathcal{U}(t,t')|\psi(t')\rangle \tag{1}$$

به دست می‌آید. برای توصیف ِ تحول، می‌شود به‌جای عمل‌گر ِ یکانی یِ $\mathcal{U}$ عمل‌گر ِ اِرمیتی یِ H (همیلتُنی) را به کار برد. با تعریف ِ

$$H(t) := i\hbar \frac{\partial \mathcal{U}(t,t')}{\partial t}\Big|_{t'=t}, \tag{2}$$

معادله یِ تحول می‌شود

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle. \tag{3}$$

می‌گوییم این سیستم ِ کوانتمی مستقل‌اززمان است اگر

$$\mathcal{U}(t,t') = U(t-t'). \tag{4}$$

[1] این مقاله، با اجازه ی ِ نویسنده، از منزل‌گاه ِ نویسنده برداشته شده است، و همه ی ِ حقوق ِ آن برا ی ِ نویسنده محفوظ است.

http://staff.alzahra.ac.ir/mamwad/x1/x1-001.ps

در این صورت، رابطه یِ (2) ساده‌تر می‌شود:

$$\begin{aligned} H(t) &= i\hbar \frac{\partial U(t-t')}{\partial t}\Big|_{t'=t}, \\ &= i\hbar \frac{\mathrm{d}U(s)}{\mathrm{d}s}\Big|_{s=0}, \end{aligned} \tag{5}$$

و از این‌جا دیده می‌شود که همیلتنی مستقل‌اززمان است:

$$H = i\hbar U'(0). \tag{6}$$

به این ترتیب، سیستم مستقل‌اززمان است اگر همیلتنی چنین باشد.

2 تقارن در کوانتم‌مکانیک

می‌گوییم تبدیلِ

$$|\psi\rangle \to |\tilde{\psi}\rangle \tag{7}$$

تقارنِ سیستم است اگر این تبدیل اندازه یِ حاصلِ‌ضربِ داخلی یِ دو بردارِ دل‌بخواهِ فضا یِ هیلبِرت [a] را عوض نکند:

$$|\langle\tilde{\phi}|\tilde{\psi}\rangle| = |\langle\phi|\psi\rangle|, \tag{8}$$

و با تحولِ سیستم جابه‌جا شود:

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle \qquad \Rightarrow \qquad i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\tilde{\psi}(t)\rangle = H(t)|\tilde{\psi}(t)\rangle. \tag{9}$$

ثابت می‌شود که تبدیل ی که خاصیتِ (8) را بر آورَد، یا یکانی است یا پادیکانی [1]. ما در این‌جا فقط تبدیل‌ها یِ یکانی را در نظر می‌گیریم:

$$|\tilde{\psi}\rangle = O|\psi\rangle, \tag{10}$$

که در آن O یک عمل‌گرِ یکانی است. هم‌چنین، فرض می‌کنیم عمل‌گرِ O (و نیز همیلتنی یِ سیستم) مستقل‌اززمان باشند. در این صورت از رابطه یِ (9) نتیجه می‌شود

$$[H, O] = 0. \tag{11}$$

از این پس، منظورِمان از یک تقارنِ سیستمِ کوانتمی، یک عمل‌گرِ یکانی (و مستقل‌اززمان) مثلِ O است، که با همیلتنی (آن هم مستقل‌اززمان) جابه‌جا می‌شود.

از نتایج ِ ساده یِ تقارن این است که یک مشاهده‌پذیر وجود دارد که ثابتِ‌حرکت است. در واقع از معادله یِ (11) نتیجه می‌شود خود ِ O ثابتِ‌حرکت است. اما O لزوماً مشاهده‌پذیر نیست، چون قرار بود O یکانی باشد نه لزوماً اِرمیتی. اگر یک خانواده یِ یک‌پارامتری یِ تقارن ($O(s)$) داشته باشیم، چنان‌که $O(s)$ نسبت به s مشتق‌پذیر باشد،

$$O(s_1)O(s_2) = O(s_1 + s_2), \tag{12}$$

و

$$O(0) = 1. \tag{13}$$

آن‌گاه تعریف می‌کنیم

$$A := i\hbar O'(0), \tag{14}$$

و دیده می‌شود که A اِرمیتی است،

$$O(s) = \exp\left(\frac{sA}{i\hbar}\right), \tag{15}$$

و A با H جابه‌جا می‌شود. اگر فقط یک عمل‌گر ِ (نه یک خانواده یِ یک‌پارامتری یِ) تقارن داشته باشیم، تعریف می‌کنیم

$$B := \frac{1}{2}(O + O^\dagger) = \frac{1}{2}(O + O^{-1}), \tag{16}$$

و

$$C := \frac{1}{2i}(O - O^\dagger) = \frac{1}{2i}(O - O^{-1}). \tag{17}$$

روشن است که از B و C، دستِ‌کم یک ی غیرِصفر است. ضمناً B و C اِرمیتی اند. هم‌چنین، از این که O با H جابه‌جا می‌شود، نتیجه می‌شود O^{-1} با H جابه‌جا می‌شود، و از آن‌جا معلوم می‌شود B و C با H جابه‌جا می‌شوند. توجه داشته باشید که اگر یک خانواده یِ یک‌پارامتری یِ تقارن داشته باشیم، هم از رابطه یِ (14) و هم از رابطه‌ها یِ (16) و (17) عمل‌گرها یِ اِرمیتی یی به دست می‌آید که با H جابه‌جا می‌شوند. اما از رابطه یِ (15) معلوم است که

$$B = \cos\left(\frac{sA}{\hbar}\right), \tag{18}$$

و

$$C = \sin\left(\frac{sA}{\hbar}\right). \tag{19}$$

پس به طور ـِ کلی دیدیم اگر سیستم تقارن داشته باشد، دستِ‌کم یک مشاهده‌پذیر (عمل‌گر ـِ اِرمیتی) وجود دارد که با همیلتنی جابه‌جا می‌شود، و در نتیجه ثابتِ‌حرکت است. گاه ی به همین مشاهده‌پذیر هم تقارن ـِ سیستم می‌گوییم.

3 تابع ـِ یک عمل‌گر، تقارن‌ها یِ نابدیهی، و همیلتنی‌ها یِ تبه‌گن

عمل‌گر ـِ O را در نظر بگیرید. فرض کنید طیف ـِ O کامل است. یعنی یک پایه مثل ـِ $\{|o\rangle\}$ وجود دارد، که اعضا یِ آن ویژه‌بردارها یِ O اند:

$$O|o\rangle = o|o\rangle. \tag{20}$$

تابع ی مثل ـِ f در نظر بگیرید که رو یِ مجموعه یِ ویژه‌مقدارها یِ O تعریف شده است. تعریف می‌کنیم

$$f(O)|o\rangle := f(o)|o\rangle. \tag{21}$$

از آن‌جا که فرض کردیم مجموعه یِ ویژه‌بردارها یِ O یک پایه تشکیل می‌دهد (یعنی کامل است) تعریف ـِ (21) برا یِ مشخص کردن ـِ $f(O)$ کافی است. برا یِ ادامه یِ کار، به چند قضیه یِ ساده نیاز داریم.

قضیه یِ 1: اگر A با B جابه‌جا شود، و اگر $|a\rangle$ یک ویژه‌بردار ـِ A با ویژه‌مقدار ـِ a باشد، آن‌گاه $B|a\rangle$ هم یک ویژه‌بردار ـِ A با همان ویژه‌مقدار است.

اثبات: داریم

$$\begin{aligned} A(B|a\rangle) &= BA|a\rangle, \\ &= a(B|a\rangle). \end{aligned} \tag{22}$$

■

قضیه یِ 2: اگر A با B جابه‌جا شود، آن‌گاه $f(A)$ هم با B جابه‌جا می‌شود.

اثبات: در این‌جا فرض کرده ایم طیف ـِ A کامل است (تا بشود از تعریف ـِ (21) استفاده کرد). پس کافی است نشان دهیم، به ازا یِ هر $|a\rangle$ یِ ویژه‌بردار ـِ A،

$$[B, f(A)]|a\rangle = 0. \tag{23}$$

برا یِ این کار، توجه می‌کنیم که چون $B|a\rangle$ یک ویژه‌بردار ـِ A با ویژه‌مقدار ـِ a است،

$$f(A)B|a\rangle = f(a)B|a\rangle. \tag{24}$$

از طرف ـِ دیگر،

$$Bf(A)|a\rangle = f(a)B|a\rangle. \tag{25}$$

تفاضل ـِ دورابطه یِ (24) و (25)، همان رابطه یِ (23) است.

■

قضیه یِ 3: A با $f(A)$ جابه‌جا می‌شود.

اثبات: باز هم فرض کرده ایم طیف ـِ A کامل است. پس کافی است نشان دهیم اثر ـِ $Af(A)$ بر $|a\rangle$، با اثر ـِ $f(A)A$ بر $|a\rangle$ یکی است. اما از تعریف ـِ (21) روشن است که اثر ـِ هردو می‌شود $af(a)|a\rangle$.

■

برا یِ قضیه یِ بعدی به یک تعریف نیاز داریم. می‌گوییم عمل‌گر ـِ A تبه‌گن است، اگر به ازا یِ دستِ‌کم یک ی از ویژه‌مقدارها یِ آن، بیش از یک ویژه‌بردار ـِ مستقل وجود داشته باشد. اگر A تبه‌گن نباشد، آن‌گاه از

$$A|\psi\rangle = a|\psi\rangle \tag{26}$$

نتیجه می‌شود

$$|\psi\rangle \propto |a\rangle, \tag{27}$$

که در آن $|a\rangle$ (تنها)ویژه‌بردار ـِ A متناظر با ویژه‌مقدار ـِ a است.

قضیه یِ 4: اگر A با B جابه‌جا شود و A تبه‌گن نباشد (و طیف ـِ A کامل باشد)، آن‌گاه B تابع ـِ A است.

اثبات: از قضیه یِ 1 می‌دانیم $B|a\rangle$ یک ویژه‌بردار ـِ A با ویژه‌مقدار ـِ a است. از این که A ناتبه‌گن است، نتیجه می‌شود عدد ی مثل ـِ b وجود دارد که

$$B|a\rangle = b|a\rangle. \tag{28}$$

به این ترتیب، متناظر با هر ویژه‌مقدار ـِ a یِ عمل‌گر ـِ A، یک عدد مثل ـِ b وجود دارد که ویژه‌مقدار ـِ عمل‌گر ـِ B برا یِ همان ویژه‌بردار ـِ $|a\rangle$ است. تعریف می‌کنیم

$$f(a) := b, \tag{29}$$

و از این‌جا روشن است که

$$B = f(A). \tag{30}$$

■

توجه کنید که تبه‌گن‌نبودن ـِ A برا یِ اثبات ضروری است. اگر A تبه‌گن باشد، حتا اگر پایه ای باشد که A و B (هر دو) در آن قطری باشند، لزوم ی ندارد B تابع ـِ A باشد. مثلاً فرض کنید یک دسته بردار ـِ $|a,i\rangle$ ویژه‌بردارها یِ مستقل ـِ مشترک ـِ A و B باشند، که ویژه‌مقدارِ همه یِشان برا یِ A عدد ـِ a باشد. از این که این‌ها ویژه‌بردار ـِ B اند، نتیجه می‌شود

$$B|a,i\rangle = b_i|a,i\rangle. \tag{31}$$

حالا به ازا یِ یک a، چند b داریم، و دیگر نمی‌شود با رابطه یِ (29) یک تابع ـِ f تعریف کرد.

در بخش ـِ قبل دیدیم اگر یک عمل‌گر ـِ یکانی با H جابه‌جا شود، آن‌گاه حتماً یک مشاهده‌پذیر ـِ غیرِصفر هم وجود دارد که با H جابه‌جا می‌شود. در واقع یکانی‌بودن ـِ عمل‌گر هم لازم نیست. از (11) نتیجه می‌شود

$$[O^\dagger, H^\dagger] = 0, \tag{32}$$

یا (چون H اِرمیتی است)

$$[O^\dagger, H] = 0, \tag{33}$$

که نتیجه می‌دهد عمل‌گرها ی اِرمیتی یِ $(O+O^\dagger)/2$ و $(O-O^\dagger)/(2i)$ با H جابه‌جا می‌شوند. ضمناً اگر عمل‌گر ـِ اِرمیتی یِ A با H جابه‌جا شود، آن‌گاه عمل‌گر ـِ یکانی یِ $\exp\left(\frac{sA}{i\hbar}\right)$ هم با H جابه‌جا می‌شود. پس

اگر یک عمل‌گر ـِ غیرِصفر وجود داشته باشد که با همیلتنی جابه‌جا شود، آن‌گاه یک عمل‌گر ـِ اِرمیتی و یک عمل‌گر ـِ یکانی هم وجود دارد که با همیلتنی جابه‌جا می‌شود.

با توجه به این نتیجه، به هر عمل‌گر ی که با همیلتنی جابه‌جا شود تقارن می‌گوییم. از قضیه یِ 3، روشن است که هر تابع ـِ همیلتنی یک تقارن ـِ سیستم است. به چنین‌تقارن ی یک تقارن ـِ بدیهی می‌گوییم. خود ـِ H، و عمل‌گر ـِ واحد، مثال‌ها یِ ساده ای از تقارن‌ها یِ بدیهی اند. قضیه یِ 4 می‌گوید اگر همیلتنی تبه‌گن نباشد، آن‌گاه همه یِ تقارن‌ها یِ سیستم بدیهی اند. اما اگر همیلتنی تبه‌گن بود چه‌طور؟ آیا سیستم حتماً یک تقارن ـِ نابدیهی دارد؟ جواب مثبت است. این تقارن را می‌سازیم. فرض کنید $\{|E,i\rangle\}$ پایه ای باشد که همیلتنی در آن قطری است:

$$H|E,i\rangle = E|E,i\rangle. \tag{34}$$

عمل‌گر ـِ B را به این شکل تعریف می‌کنیم:

$$B|E,i\rangle := f(E,i)|E,i\rangle, \tag{35}$$

که در آن f یک تابع ِ یک‌به‌یک است. از جمله،

$$i \neq j \qquad \Rightarrow \qquad f(E,i) \neq f(E,j). \tag{36}$$

روشن است که با این تعریف، B تابع ِ H نیست. اما ضمناً روشن است که B با H جابه‌جا می‌شود، چون این دوعمل‌گر در یک پایه ی مشترک قطری شده اند. پس B یک تقارن ِ نابدیهی است. به این ترتیب، ثابت کرده ایم

همیلتنی یِ سیستم تبه‌گن است، اگر و تنها اگر سیستم تقارن ِ نابدیهی داشته باشد.

حتا از این هم می‌شود جلوتر رفت: چون تابع ِ f را یک‌به‌یک گرفته ایم، عمل‌گر ِ B در رابطه یِ (35) ناتبه‌گن است، و چون این عمل‌گر با H جابه‌جا می‌شود، H تابع ِ آن است. یعنی

برا یِ هر سیستم ی، چه همیلتنی یِ آن تبه‌گن باشد و چه همیلتنی یِ آن تبه‌گن نباشد، می‌شود یک تقارن پیدا کرد که ناتبه‌گن باشد و درنتیجه همیلتنی تابع ِ آن باشد.

جز این، می‌شود عمل‌گر ی پیدا کرد که ویژه‌مقدار ِ H را عوض نکند (یعنی با H جابه‌جا شود) اما عدد ِ (یا اعداد ِ) کوانتمی یِ دیگر ِ سیستم (i) را عوض کند، مثلاً عمل‌گر ِ A با

$$A|E,i\rangle = a(E,i)|E,i'(E,i)\rangle. \tag{37}$$

به چنین‌عمل‌گرها یی عمل‌گر ِ نردبانی می‌گوییم.

ضمناً بد نیست یادآوری کنیم در همه یِ موارد ِ بالا، فرض کرده ایم طیف ِ همیلتنی یِ سیستم کامل است.

4 مثال‌ها

I) همیلتنی یِ ساده ای به شکل ِ

$$H = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{38}$$

در نظر بگیرید. این همیلتنی تبه‌گن نیست. پس همه یِ تقارن‌ها یِ سیستم ی که با این همیلتنی توصیف می‌شود بدیهی اند. در واقع عمل‌گر ِ O تقارن ِ سیستم است اگر در همین پایه قطری باشد (قضیه یِ 1). در این صورت،

$$O = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix}. \tag{39}$$

اما O را می‌شود چنین نوشت.

$$O = f(H), \tag{40}$$

که در آن

$$f(x) = \begin{cases} a, & x = 1 \\ b, & x = 0 \end{cases}, \tag{41}$$

یا (مثلاً)

$$O = b + (a - b)H. \tag{42}$$

II) همیلتنی یِ

$$H = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{43}$$

تبه‌گن است: ویژه‌مقدارِ 1 ـِ آن دوگانه است. پس سیستم ی که با این همیلتنی توصیف می‌شود تقارن ـِ نابدیهی دارد. هر تقارن ـِ این سیستم عمل‌گر ی است که ماتریس ـِ آن در این پایه بلُکی‌ـ قطری است. در واقع برا یِ یک تقارن ـِ خاص ـِ O، می‌شود پایه ای که H در آن قطری است را چنان گرفت که O هم در همان پایه قطری باشد. در این صورت،

$$O = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}. \tag{44}$$

اگر $a = b$، آن‌گاه O تابع ـِ H است:

$$O = c + (a - c)H. \tag{45}$$

اما اگر $a \neq b$، آن‌گاه O تابع ـِ H نیست و یک تقارن ـِ نابدیهی است. در این صورت ویژه‌بردارها یِ مشترک ـِ H و O را می‌شود با تعیین ویژه‌مقدار ـِ H و O (هر دو) مشخص کرد. در واقع اعضا یِ این پایه می‌شوند $|1, a\rangle$، $|1, b\rangle$، و $|0, c\rangle$. توجه کنید که در این مثال ـِ خاص، وارد کردن ـِ O تبه‌گنی را کاملاً حذف می‌کند. یعنی بیش از یک بردار با ویژه‌مقدارها یِ معین برا یِ H و O وجود ندارد. اگر $a \neq b \neq c \neq a$، آن‌گاه خود ـِ O ناتبه‌گن است و فقط یک پایه وجود دارد که O در آن قطری است. در این صورت H تابع ـِ O است و اعضا یِ پایه یِ قطری‌کننده یِ O را می‌شود با فقط ویژه‌مقدار ـِ O، بدون ـِ ابهام مشخص کرد.

جز این تقارن، می‌شود عمل‌گر ـِ دیگر ی پیدا کرد که با H جابه‌جا شود ولی با O نه. مثلاً

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{46}$$

این از نوع ِ عمل‌گرهای نردبانی است، که در بخش ِ قبل تعریف کردیم.

III) همیلتنی یِ نوسان‌گر ِ هم‌آهنگ ِ یک‌بعدی (برحسب ِ عمل‌گرها یِ بالابر و پایین‌بر)

$$H = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) \tag{47}$$

است، که در آن،

$$[a, a^\dagger] = 1. \tag{48}$$

ویژه‌بردارها یِ این همیلتنی

$$|n\rangle := \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle \tag{49}$$

اند، که در آن

$$a|0\rangle = 0, \tag{50}$$

و

$$H|n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega|n\rangle. \tag{51}$$

این همیلتنی تبه‌گن نیست، پس سیستم نباید تقارن ِ نابدیهی داشته باشد. اما می‌دانیم هم‌پایه‌گی تقارن ِ این سیستم است. در واقع اگر همیلتنی را بر حسب ِ عمل‌گرها یِ مکان و تکانه بنویسیم:

$$H = \frac{1}{2m}P^2 + \frac{m\omega^2}{2}X^2, \tag{52}$$

دیده می‌شود عمل‌گر ِ هم‌پایه‌گی یِ Π با ویژه‌گی‌ها یِ

$$\{\Pi, X\} = \{\Pi, P\} = 0, \tag{53}$$

با همیلتنی جابه‌جا می‌شود. پس Π تقارن ِ سیستم است. در این صورت Π باید تابع ِ H باشد. این تابع را به دست می‌آوریم. می‌دانیم ویژه‌تابع‌ها یِ همیلتنی یِ نوسان‌گرِهم‌آهنگ، به ازا یِ n ها یِ زوج زوج، و به ازا یِ n ها یِ فرد فرد اند. در واقع می‌دانیم ویژه‌تابع ِ حالت ِ پایه زوج است. ضمناً از رابطه‌ها یِ (53) معلوم می‌شود Π با عمل‌گرها یِ بالابر و پایین‌بر هم پادجابه‌جا می‌شود. پس

$$\Pi|n\rangle = \begin{cases} |n\rangle, & n = 2k \\ -|n\rangle, & n = 2k+1 \end{cases}, \tag{54}$$

یا

$$\Pi|n\rangle = (-1)^n|n\rangle. \tag{55}$$

اما (با توجه به رابطه یِ (51)) این را می‌شود چنین نوشت

$$\Pi|n\rangle = (-1)^{[H/(\hbar\omega)]-(1/2)}|n\rangle, \tag{56}$$

و از آن‌جا

$$\Pi = (-1)^{[H/(\hbar\omega)]-(1/2)}. \tag{57}$$

بحث ی شبیه به این، برا یِ همه یِ سیستم‌ها یِ یک‌بعدی یی که با یک پتانسیل ِ خوش‌رفتار ِ زوج (نسبت به X) توصیف می‌شوند (و همه یِ ویژه‌حالت‌ها یِ همیلتنی پِشان مقید است) درست است. قضیه ای داریم که می‌گوید همیلتنی یِ چنین‌سیستم‌ها یی ناتبه‌گن است [2]. در این صورت، هم‌پایه‌گی باید تابع ِ همیلتنی باشد، هر چند نه به شکل ِ رابطه یِ (57). عملاً ممکن است برا یِ به‌دست‌آوردن ِ شکل ِ این تابع مجبور باشیم ویژه‌بردارها و ویژه‌مقدارها یِ همیلتنی را حساب کنیم.

اگر سیستم هم‌پایه‌گی‌متقارن باشد، اما پتانسیل همه جا خوش‌رفتار نباشد، یا ویژه‌حالت‌ها یِ همیلتنی مقید نباشند، ممکن است هم‌پایه‌گی یک تقارن ِ نابدیهی باشد. مثال ِ حالت ِ اول ذره در یک چاهِ‌پتانسیل ِ بی‌نهایت ِ دوگانه یِ متقارن است. در این‌جا ذره مقید است در ناحیه یِ $(-b,-a)\cup(a,b)$ بماند و در این ناحیه آزاد است. همه یِ ترازهایِ‌انرژی یِ این سیستم دوگانه اند: $|n,r\rangle$ تراز ِ n ام ِ ذره ای است که در چاه ِ طرفِ‌راست است (یعنی تابعِ‌موجِ آن در x ها یِ منفی صفر است) و $|n,l\rangle$ تراز ِ n ام ِ ذره ای که در چاه ِ طرفِ‌چپ است. انرژی یِ هر دو حالت

$$E_n = n^2\frac{h^2}{8m(b-a)^2} \tag{58}$$

است. فاز ِ نسبی یِ این دو حالت را هم می‌شود چنان گرفت که

$$\langle x|n,l\rangle = \langle -x|n,r\rangle. \tag{59}$$

در این صورت، Π این دو حالت را به هم تبدیل می‌کند و یک عمل‌گر ِ نردبانی است. ضمناً می‌شود Π را قطری کرد. ویژه‌بردارها یِ آن

$$|n,\pm\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}}(|n,r\rangle \pm |n,l\rangle) \tag{60}$$

اند، که

$$\Pi|n,\pm\rangle = \pm|n,\pm\rangle. \tag{61}$$

پس در این‌جا Π تابع ِ H نیست.

مثال ِ حالت ِ دوم ذره یِ آزاد است. ویژه‌حالت‌ها یِ همیلتنی یِ ذره‌یِ‌آزاد هم (جز حالت ِ پایه) دوگانه اند. ویژه‌تابع‌ها یِ انرژی را می‌شود موج ِ تخت گرفت (راست‌رونده یا چپ‌رونده) (که برا یِ این‌ها Π عمل‌گر ِ نردبانی است) یا کسینوس و سینوس. با انتخاب ِ اول، ویژه‌حالت‌ها را ویژه‌حالت ِ تکانه هم گرفته ایم. خود ِ تکانه یک عمل‌گر ِ ناتبه‌گن است، که همیلتنی تابع ِ آن است:

$$H = \frac{P^2}{2m}. \tag{62}$$

ویژه‌حالت‌ها یِ انتخاب ِ دوم ویژه‌حالت‌ها یِ مشترک ِ H و Π اند؛ کسینوس متناظر با ویژه‌مقدار ِ $+1$ برا یِ Π، و سینوس متناظر با ویژه‌مقدار ِ -1. این‌جا هم معلوم است که هم‌پایه‌گی تابع ِ همیلتنی نیست.

IV) یک سیستم ِ دوبعدی یِ سمتی‌متقارن در نظر بگیرید، که همه یِ ویژه‌حالت‌هایِ‌انرژی یِ آن مقید باشند. سیستم ی که همیلتنی یِ آن

$$H = \frac{P_1^2 + P_2^2}{2m} + V(\rho) \tag{63}$$

باشد از این نوع است، به شرط ی که پتانسیل ِ V، در $\rho \to \infty$ به $+\infty$ میل کند. در این‌جا ρ مختصه یِ شعاعی در مختصات ِ قطبی است. یک تقارن ِ سیستم تکانه یِ زاویه‌ای است، که مولد ِ دوران است. آیا این تقارن نابدیهی است؟ برا یِ جواب‌دادن به این سئال باید طیف ِ همیلتنی را پیدا کرد. معادله یِ ویژه‌مقداری برا یِ همیلتنی، برا یِ حالت‌ها یِ با تکانه‌یِ‌زاویه‌ای یِ $l\hbar$ می‌شود

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\rho\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho} + \frac{\hbar^2 l^2}{2m\ \rho^2} + V(\rho)\right] R(\rho) = E\ R(\rho). \tag{64}$$

با فرض ی که برا یِ V کردیم، معلوم می‌شود برا ی این که این معادله برا یِ R جواب ِ نابدیهی داشته باشد، لازم است E مقدارها یِ خاص ی بگیرد (کوانتش ِ انرژی). این مقدارها یِ خاص، با l و یک عدد ِ صحیح ِ نامنفی یِ دیگر، مثلاً n_ρ تعیین می‌شود:

$$E = E(n_\rho, l). \tag{65}$$

در واقع n_ρ شماره یِ برانگیخته‌گی یِ حالت‌ها یِ با تکانه‌یِ‌زاویه‌ای‌یِ‌معین است. ضمناً می‌دانیم

$$E(n_\rho, l) = E(n_\rho, -l). \tag{66}$$

پس همیلتنی (دستِ‌کم در زیرفضا یِ $l \neq 0$) حتماً تبه‌گن است. جز این چه‌طور؟ تبه‌گنی یِ دیگر ی هم وجود دارد یا ترازها یِ انرژی دستِ‌بالا دوگانه اند؟ اطلاعات ی که تا این‌جا داریم، برا یِ جواب‌دادن کافی نیست. می‌شود دید اگر l را ثابت بگیریم، E نسبت به n_ρ یک‌به‌یک است. اما آیا ممکن است $E(n_\rho, l)$ با $E(n'_\rho, l')$ برابر باشد و $l^2 \neq l'^2$؟ یک ی از مثال‌ها یِ بعدی حالت ی را نشان می‌دهد که این اتفاق می‌افتد. اما چنین‌چیز ی نادر است و فقط برا یِ سیستم‌ها یِ بسیارخاص ی رخ می‌دهد.

برا یِ دیدن ـ این موضوع، توجه کنید که تابع ـ (65)، اگر فقط l ها یِ نامنفی را در نظر بگیریم، از $\mathbb{I}\times\mathbb{I}$ به $\mathbb{R}$ است. ($\mathbb{I}$ مجموعه یِ اعداد ـ صحیح ـ نامنفی، و $\mathbb{R}$ مجموعه یِ اعداد ـ حقیقی است.) اندازه یِ $\mathbb{I}\times\mathbb{I}$ نسبت به اندازه یِ $\mathbb{R}$ صفر است. پس اگر انرژی‌ها را به این ترتیب روی محور ـ حقیقی بگذاریم که اول l را 0 بگیریم و n_ρ را 0 و 1 و ...، و سپس l را 1 بگیریم و دوباره n_ρ را تغییر دهیم و ...، این که دوتا از انرژی‌ها روی هم بیفتند، روی‌داد ـ بسیار عجیب ی است. به این ترتیب، معمولاً خود ـ همیلتنی و $\mathrm{sgn}(L)$ (علامت ـ تکانه یِ زاویه‌ای) برا یِ مشخص‌کردن ـ حالت ـ سیستم کافی اند. یعنی L^2 تابع ـ همیلتنی است.

V) مثال ـ قبل ذره ای را توصیف می‌کرد که در پتانسیل ـ سمتی‌متقارن ـ V حرکت می‌کرد. اگر علاوه بر این، یک میدان ـ مغناطیسی ـ یک‌نواخت ـ B عمود بر صفحه یِ حرکت ـ ذره هم وجود داشته باشد، همیلتنی ـ سیستم می‌شود

$$H=\frac{P_1^2+P_2^2}{2m}-\frac{e\ B}{2m\ c}L+V(\rho)+\frac{e^2\ B^2}{8m\ c^2}\rho^2. \qquad (67)$$

روشن است که این‌جا هم تکانه یِ زاویه‌ای (L) تقارن ـ سیستم است. در این‌جا معادله یِ ویژه‌مقداری برا یِ همیلتنی، برا یِ حالت‌ها یِ با تکانه‌یِ‌زاویه‌ای یِ $l\hbar$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\rho\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\frac{\hbar^2 l^2}{2m\ \rho^2}-\frac{e\ B\ \hbar\ l}{2m\ c}+\frac{e^2\ B^2}{8m\ c^2}\rho^2+V(\rho)\right]R(\rho)=E\ R(\rho) \qquad (68)$$

است. این معادله (برخلاف ـ معادله یِ (64)) تحت ـ تبدیل ـ $l\to -l$ عوض می‌شود. پس

$$E(n_\rho,l)\neq E(n_\rho,-l). \qquad (69)$$

به این ترتیب، تبه‌گنی یِ دوگانه یِ مثال ـ قبل وجود ندارد و (جز در حالت‌ها یِ خاص) همیلتنی ناتبه‌گن است و تکانه یِ زاویه‌ای تابع ـ همیلتنی است، هرچند ممکن است به‌دست‌آوردن ـ شکل ـ صریح ـ این تابع دشوار باشد.

VI) همیلتنی یِ نوسان‌گر ـ هم‌آهنگ ـ هم‌سان‌گرد ـ دوبعدی

$$H=\frac{P_1^2+P_2^2}{2m}+\frac{m\ \omega^2}{2}(X_1^2+X_2^2) \qquad (70)$$

است. این همیلتنی به شکل ـ

$$H=H_1+H_2 \qquad (71)$$

است، که در آن H_1 و H_2 همیلتنی‌ها یِ نوسان‌گرِهم‌آهنگِ‌یک‌بعدی اند، و

$$[H_1,H_2]=0. \qquad (72)$$

به این ترتیب، طیف ـ H می‌شود

$$\begin{aligned} E &= E(n_1,n_2), \\ &= \hbar\omega(n_1+n_2+1), \end{aligned} \tag{73}$$

که در آن، $n_i \in \mathbb{I}$. ویژه‌حالت‌ها یِ همیلتنی $|n_1,n_2\rangle$ اند و

$$H_i|n_1,n_2\rangle = \hbar\omega\left(n_i+\frac{1}{2}\right)|n_1,n_2\rangle. \tag{74}$$

روشن است که H تبه‌گن است. در واقع، مثلاً H_1 یک تقارن ـِ نابدیهی یِ سیستم است. همیلتنی یِ (70) (بر حسب ـِ عمل‌گرها یِ بالابر و پایین‌بر ـِ نوسان‌گرها یِ یک‌بعدی)

$$H = \hbar\omega(a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2 + 1) \tag{75}$$

است. عمل‌گرها یِ $a_1^\dagger a_2$ و $a_2^\dagger a_1$ با همیلتنی جابه‌جا می‌شوند و

$$a_1^\dagger a_2|n_1,n_2\rangle \propto |n_1+1,n_2-1\rangle. \tag{76}$$

اثر ـِ عمل‌گر ـِ دیگر هم این است که n_1 را یک ی کم می‌کند و n_2 را یک ی زیاد می‌کند. این‌دو عمل‌گر ـِ نردبانی اند.

اگر نوسان‌گر هم‌سان‌گرد نباشد، هنوز هم ویژه‌بردارها یِ همیلتنی را می‌شود $|n_1,n_2\rangle$ گرفت. در این حالت ویژه‌مقدارها یِ همیلتنی می‌شود

$$\begin{aligned} E &= E(n_1,n_2), \\ &= \hbar\omega_1\left(n_1+\frac{1}{2}\right)+\hbar\omega_2\left(n_2+\frac{1}{2}\right). \end{aligned} \tag{77}$$

همیلتنی تبه‌گن نیست مگر نسبت ـِ دوبس‌آمد گویا باشد.

نوسان‌گر ـِ هم‌آهنگ ـِ هم‌سان‌گرد، تقارن ـِ سمتی هم دارد. پس تکانه یِ زاویه‌ای هم تقارن ـِ سیستم است. آیا این تقارن بدیهی است؟ نه. در واقع این یک ی از سیستم‌ها یِ استثنایی یی است که در مثال ـِ IV از ـِشان اسم بردیم. ویژه‌بردارها یِ مشترک ـِ همیلتنی و تکانه‌یِ‌زاویه‌ای $|n_\rho,l\rangle$ اند، که

$$H|n_\rho,l\rangle = \hbar\omega(|l|+2n_\rho+1)|n_\rho,l\rangle, \tag{78}$$

و

$$L|n_\rho,l\rangle = \hbar l|n_\rho,l\rangle. \tag{79}$$

این مطالب را می‌شود در مثلاً [2] پیدا کرد. دیده می‌شود که با معلوم‌بودن ـِ E فقط $|l|+2n_\rho$ معلوم می‌شود، و از رو یِ آن نمی‌شود $|l|$ را به دست آورد. به این ترتیب، برا یِ این سیستم L^2 هم تابع ـِ H

نیست. برا یِ به‌دست‌آوردن ـِ عمل‌گرها یِ نردبانی، تکانه یِ زاویه‌ای را بر حسب ـِ عمل‌گرها یِ بالابر و پایین‌بر می‌نویسیم:

$$L = i\hbar(a_2^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_2). \tag{80}$$

از این‌جا (با کم ی محاسبه) نتیجه می‌شود

$$[L, a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1 \pm i(a_2^\dagger a_2 - a_1^\dagger a_1)] = \pm 2\hbar [a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1 \pm i(a_2^\dagger a_2 - a_1^\dagger a_1)]. \tag{81}$$

دوعمل‌گر ـِ

$$A^\pm := a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1 \pm i(a_2^\dagger a_2 - a_1^\dagger a_1) \tag{82}$$

عمل‌گرها یِ نردبانی اند. به‌ساده‌گی می‌شود دید این عمل‌گرها ویژه‌مقدار ـِ L را به اندازه یِ $2\hbar$ تغییر می‌دهند. به طور ـِ خلاصه، در این‌جا سیستم یک تقارن ـِ نابدیهی یِ اضافی دارد (L^2). این سیستم تقارن‌ها یِ دیگر ی هم دارد، مثل ـِ H_iها، و نیز عمل‌گرها یِ $P_iP_j/(2m) + m\omega^2 X_iX_j/2$. می‌گویند این سیستم تقارن ـِ تصادفی و تبه‌گنی یِ اضافی دارد.

VII) همیلتنی یِ ذره ای که در یک پتانسیل ـِ کروی‌متقارن حرکت می‌کند

$$H = \frac{\mathbf{P}\cdot\mathbf{P}}{2m} + V(r) \tag{83}$$

است. r مختصه یِ شعاعی در مختصات ـِ کروی است. مئلفه‌ها یِ تکانه یِ زاویه‌ای تقارن ـِ سیستم اند. $\mathbf{L}\cdot\mathbf{L}$ هم با همیلتنی جابه‌جا می‌شود و تقارن ـِ سیستم است. چون L_3 و $\mathbf{L}\cdot\mathbf{L}$ با هم جابه‌جا می‌شوند، می‌شود ویژه‌حالت‌ها یِ مشترک ـِ همیلتنی و این دوعمل‌گر را پیدا کرد. معادله یِ ویژه‌مقداری یِ H برا یِ ویژه‌بردارها یِ L_3 و $\mathbf{L}\cdot\mathbf{L}$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m\, r}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m\, r^2} + V(r)\right] R(r) = E\; R(r) \tag{84}$$

است. در این معادله ویژه‌مقدار ـِ L_3 ظاهر نشده و فقط ویژه‌مقدار ـِ $\mathbf{L}\cdot\mathbf{L}$ وجود دارد. اگر V در $r\to\infty$ به $+\infty$ میل کند، همه یِ حالت‌ها یِ سیستم مقید اند. در این صورت ویژه‌مقدارها یِ انرژی با دو عدد ـِ کوانتمی مشخص می‌شود:

$$E = E(n_r, l). \tag{85}$$

این رابطه شبیه ـِ (65) است، با این تفاوت که در این‌جا $l \in \mathbb{I}$. به این ترتیب، معمولاً ویژه‌مقدارها یِ انرژی یک تابع ـِ یک‌به‌یک از l و n_r اند و در این صورت $\mathbf{L}\cdot\mathbf{L}$ تابع ـِ همیلتنی است. اما L_3 تابع ـِ همیلتنی نیست. این گزاره به شکل ـِ (83) برا یِ همیلتنی بسته‌گی ندارد. در واقع اگر همه ی مئلفه‌ها یِ تکانه‌یِ‌زاویه‌ای با همیلتنی جابه‌جا شوند، یعنی اگر سیستم کروی‌متقارن باشد، آن‌گاه عمل‌گرها یِ

$$L^{\pm} := L_1 \pm iL_2 \tag{86}$$

هم با H جابه‌جا می‌شوند. این‌ها عمل‌گرها یِ بالابر و پایین‌بر ـِ L_3 اند و ویژه‌مقدار ـِ L_3 را به اندازه یِ $\pm\hbar$ تغییر می‌دهند، اما ویژه‌مقدار ـِ انرژی را تغییر نمی‌دهند.

VIII) همیلتنی یِ نوسان‌گر ـِ هم‌آهنگ ـِ هم‌سان‌گرد ـِ سه‌بعدی

$$H = \frac{\mathbf{P}\cdot\mathbf{P}}{2m} + \frac{m\,\omega^2\,\mathbf{X}\cdot\mathbf{X}}{2} \tag{87}$$

است. این همیلتنی هم مجموع ـِ سه همیلتنی یِ نوسان‌گرِهم‌آهنگ ـِ یک‌بعدی است. طیف ـِ این همیلتنی

$$E = \hbar\omega\left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2}\right) \tag{88}$$

است. روشن است که H تبه‌گن است و H_i ها (همیلتنی‌ها یِ نوسان‌گرها یِ یک‌بعدی) تقارن ـِ سیستم اند. البته هرسه یِ این همیلتنی‌ها تقارن ـِ نابدیهی یِ مستقل نیستند، چون مجموع ـِ این‌سه خود ـِ همیلتنی است. اما دو تا از این‌ها را می‌شود تقارن‌ها یِ نابدیهی یِ مستقل ـِ سیستم گرفت.

تبه‌گنی یِ سیستم را برحسب ـِ تکانه‌یِ‌زاویه‌ای هم می‌شود بیان کرد. ویژه‌بردارها یِ این سیستم را می‌شود $|n_r, l, l_3\rangle$ نوشت، که در آن

$$H|n_r, l, l_3\rangle = \hbar\left(l + 2n_r + \frac{3}{2}\right)|n, l, l_3\rangle \tag{89}$$

و

$$\mathbf{L}\cdot\mathbf{L}|n_r, l, l_3\rangle = \hbar^2 l(l+1)|n_r, l, l_3\rangle \tag{90}$$

و

$$L_3|n_r, l, l_3\rangle = \hbar l_3|n_r, l, l_3\rangle. \tag{91}$$

این مطالب را می‌شود در مثلاً [2] پیدا کرد. دیده می‌شود که با معلوم‌بودن ـِ ویژه‌مقدارها یِ انرژی، عدد ـِ صحیح ـِ نامنفی ـِ $l + 2n_r$ تعیین می‌شود. اما با معلوم‌بودن ـِ این عدد ـِ صحیح، خود ـِ l معلوم نمی‌شود. پس این سیستم (نسبت به سیستم‌ها یِ کروی‌متقارن ـِ نوعی) تبه‌گنی یِ اضافی دارد، مثل ـِ نوسان‌گر ـِ هم‌آهنگ ـِ هم‌سان‌گرد ـِ دوبعدی (که نسبت به سیستم‌ها یِ سمتی‌متقارن ـِ نوعی تبه‌گنی یِ اضافی داشت). عمل‌گرها یِ

$$F_{ij} := \frac{P_i P_j}{2m} + \frac{m\,\omega^2\,X_i X_j}{2} \tag{92}$$

با همیلتنی جابه‌جا می‌شوند، اما با $\mathbf{L}\cdot\mathbf{L}$ جابه‌جا نمی‌شوند. پس این‌ها ویژه‌مقدار ـِ $\mathbf{L}\cdot\mathbf{L}$ را تغییر می‌دهند. این سیستم هم تقارن ـِ تصادفی و تبه‌گنی یِ اضافی دارد.

IX) سرانجام، همیلتنی ي اتم ـ هیدروژن یا یون‌ها يِ هیدروژن‌گونه

$$H = \frac{\mathbf{P}\cdot\mathbf{P}}{2m} - \frac{k}{r} \tag{93}$$

است. این سیستم هم تقارن ـ تصادفی و تبه‌گنی يِ اضافی دارد. ویژه‌حالت‌ها يِ مقید ـ همیلتنی $|n_r, l, l_3\rangle$ اند. اثر ـ عمل‌گرها يِ $\mathbf{L}\cdot\mathbf{L}$ و L_3 بر این حالت‌ها به شکل ـ همان روابط ـ (90) و (91) است. ویژه‌مقدارِانرژی يِ متناظر با این حالت

$$E = \frac{-m\,k^2/(2\hbar^2)}{(n_r + l + 1)^2} \tag{94}$$

است [2]. دیده می‌شود که با معلوم‌بودن ـ E فقط $n_r + l$ مشخص می‌شود و از آن نمی‌شود l را به دست آورد. پس $\mathbf{L}\cdot\mathbf{L}$ تابع ـ همیلتنی نیست و سیستم تبه‌گنی يِ اضافی دارد. در واقع بردار ـ لَپلَس‌ـ رونگه‌ـ لِنتس [b]:

$$\mathbf{M} := \frac{\mathbf{P}\times\mathbf{L} - \mathbf{L}\times\mathbf{P}}{2m} - \frac{k\,\mathbf{X}}{r} \tag{95}$$

تقارن ـ سیستم است و با همیلتنی جابه‌جا می‌شود. اما این بردار با $\mathbf{L}\cdot\mathbf{L}$ جابه‌جا نمی‌شود. پس این عمل‌گرها ویژه‌مقدار ـ $\mathbf{L}\cdot\mathbf{L}$ را عوض می‌کنند و نردبانی اند.

5 مرجع‌ها

[1] Steven Weinberg; “The quantum theory of fields”, volume I (Cambridge University Press, 1996) chapter 2, appendix A

[2] Ramamurty Shankar; “Principles of quantum mechanics”, second edition (Plenum Press, 1994)

6 اسم‌ها يِ خاص

[a] Hilbert

[b] Laplace-Runge-Lenz