نشریه علمی سازمان انرژی اتمی ایران
شماره ۲۰، صفحات ۴۰-۳۷، ۱۳۷۸

حل مسألهٔ کولن در فضای فاز مکانیک کوانتومی[1]

سعید نوری
مرکز فیزیک نظری و ریاضیات
سازمان انرژی اتمی ایران

چکیده

در این مقاله مسألهٔ کولن در نمایش فضای فاز کوانتومی بررسی می‌شود. با استفاده از یک تبدیل مختصه‌ای در فضای فراکروی[2]، مسألهٔ کولن را به مسألهٔ نوسانگری در ابعاد دلخواه نگاشت می‌دهیم و بدنبال آن تابع توزیع فضای فاز ویگنر را برای مسألهٔ کولن بطور تحلیلی حساب می‌کنیم.

۱. مقدمه

مسائل مربوط به نوسانگر هماهنگ و پتانسیل کولنی در ابعاد دلخواه و ارتباط بین آنها مورد بررسی قرار گرفته‌اند [۱ تا ۴]. هدف ما از این ارتباط محاسبهٔ تابع توزیع کوانتومی ویگنر برای مسألهٔ پتانسیل کولنی است.

تابع توزیع ویگنر نقشی اساسی در یک باز فرمولبندی از مکانیک کوانتومی، که نمایش فضای فاز مکانیک کوانتومی نامیده می‌شود، ایفا می‌کند. در این نمایش، حالات فیزیکی دستگاه به وسیلهٔ توابعی در فضای فاز توصیف می‌شوند که در آنها متغیّرهای مکان و تکانه، پارامترهای معمولی هستند. در بخش دوم، معادلهٔ موج شرودینگر برای مسأله کولن و نوسانگر هماهنگ در هر بعد دلخواه را در مختصّات فراکروی حل کرده «ویژه مقادیر انرژی» و «ویژه توابع» وابسته را حساب می‌کنیم. در بخش سوم، با استفاده از یک تبدیل مختصّه‌ای، مسألهٔ کولن را به مسألهٔ نوسانگری در فضای فراکروی نگاشت می‌دهیم و سرانجام در بخش چهارم با استفاده از این نگاشت، تابع توزیع فضای فاز ویگنر را برای مسألهٔ کولن بطور تحلیلی حساب می‌کنیم.

۲. حل معادله شرودینگر برای مسألهٔ کولن و نوسانگر هماهنگ

معادله شرودینگر برای پتانسیل کولنی در فضای «d بُعدی» به صورت زیر است.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_d^2-\frac{e^2}{r}\right)\psi(r)=E\psi(r), \quad (1)$$

که در آن r یک بردار d بُعدی با مولفه‌های دکارتی $x_1,x_2,...,x_d$ است. به علت تقارن کروی مسأله، استفاده از مختصّات فراکروی زیر مناسب است [۵].

$$\begin{aligned}
x_1&=r\cos\theta_1\sin\theta_2\ldots\sin\theta_{d-1},\\
x_2&=r\cos\theta_1\sin\theta_2\ldots\sin\theta_{d-1},\\
x_3&=r\cos\theta_2\sin\theta_3\ldots\sin\theta_{d-1},\\
&\vdots\\
x_j&=r\cos\theta_{j-1}\sin\theta_j\ldots\sin\theta_{d-1},\\
&\vdots\\
x_{d-1}&=r\cos\theta_{d-2}\sin\theta_{d-1},\\
x_d&=r\cos\theta_{d-1},
\end{aligned} \quad (2)$$

که در آن $0\le r\le\infty$، $0\le\theta_1\le 2\pi, d=2,3,...$، $0\le\theta_j\le\pi$ و $j=1,2,...,d-1$ است. با وارد کردن تابع موج به صورت زیر در معادله (۱)،

$$\psi(r)=R_{nl}(r)\,Y_{l_1,l_2,...,l_{d-1}}(\theta_1,\theta_2,...,\theta_{d-1}), \quad (3)$$

1- اصل این مقاله در مجله Journal of Mathematical Physics 40,3,1234(1999) به چاپ رسیده است (مرجع ۹).

2- hyperspherical

که در آن $R_{nl}(r)$ توابع موج شعاعی و $Y_{l_1,l_2,\ldots,l_{d-1}}(\theta_1,\theta_2,\ldots,\theta_{d-1})$، هماهنگی‌های کروی تعمیم یافته‌اند، می‌توان قسمت شعاعی معادله شرودینگر را بدست آورد[۶]:

$$\left[\frac{d^2}{du^2}+\frac{d-1}{u}\frac{d}{du}-\frac{l(l+d-2)}{u^2}+\frac{k}{u}-\frac{1}{4}\right]\phi(u,d,n,l)=0, \qquad (۴)$$

که در آن:

$n\geq l+1,\ k=n+\frac{1}{2}(d-3),\ r_0=\hbar^2/2me^2,\ u=r/kr_0$

است. ویژه مقادیر انرژی و ویژه توابع همخوان معادله (۴) به ترتیب عبارتند از،

$$\varepsilon_n=-\frac{\varepsilon_0}{\left[n+\frac{1}{2}(d-3)\right]^2}, \qquad (۵)$$

و

$$\phi(u,d,n,l)=c(d,n,l)\,e^{-u/2}u^l L_{n-l-1}^{(2l+d-2)}(u), \qquad (۶)$$

که در آنها $\varepsilon_0=me^4/2\hbar^2$ ، c(d,n,l) ضریب بهنجارش و n=۱و۲و۳و... عدد کوانتومی اصلی است.

بگونه‌ای مشابه می‌توان معادلهٔ شرودینگر شعاعی را برای نوسانگر Dبُعدی در فضای فراکروی به صورت زیر بدست آورد[۷]:

$$\left[\frac{d^2}{dU^2}+\frac{D-1}{U}\frac{d}{dU}-\frac{L(L+D-2)}{U^2}-U^2+K\right]\Phi(U,D,N,L)=0, \qquad (۷)$$

که در آن $U=R/R_0$، $R_0=(m\omega/\hbar)^2$، $K=2N+D$ و $N\geq L$ است. ویژه مقادیر انرژی و ویژه توابع همخوان معادله (۷) به ترتیب عبارتند از،

$$E_N=\frac{1}{2}\hbar\omega(2N+D), \qquad (۸)$$

و

$$\Phi(U,D,N,L)=C(D,N,L)\,e^{-U^2/2}U^L L_{N/2-L/2}^{(L+D/2-1)}(U^2), \qquad (۹)$$

که در آن C(D,N,L) ثابت بهنجارش است. با داشتن ویژه توابع مسائل کولن و نوسانگر در ابعاد دلخواه (معادلات ۶ و ۹)، می‌توان ویژه توابع مسألهٔ کولن را برحسب ویژه توابع نوسانگر هماهنگ بسط داد.

۳. نگاشت مسألهٔ کولن به حالت نوسانگری

ارتباط بین مسائل کولن و حالت نوسانگری از دیدگاههای مختلف مورد بررسی قرار گرفته است. موضوع مورد نظر در این بخش، نگاشت مسألهٔ کولن به حالت نوسانگری در هر بعد دلخواه است. نگاشتی که معادله (۴) را به (۷) تبدیل می‌کند به صورت $u=U^2$ است. رابطه مناسب بین جوابهای معادلات(۶) و (۹)، با درنظرگرفتن این‌که D و N و L اعداد صحیح هستند، به صورت زیر خواهد بود[۸]:

$$\phi(u,d,n,l)=\Lambda\Phi(U,2d-2,2n-2,2l), \qquad (۱۰)$$

که در آن

$$\Lambda=\left\{\frac{1}{2}R_0^{2d-2}/r_0^{d}\left[n+\frac{1}{2}(d-3)\right]^{d+1}\right\}^{1/2}. \qquad (۱۱)$$

از رابطه (۱۰) معلوم می‌شود که،

$$D=2d-2,\ N=2n-2,\ l=2t. \qquad (۱۲)$$

رابطه (۱۲) بیانگر این مطلب است که به ازای هر Dی زوج، طیف مسألهٔ کولن dبعدی به نیمی از طیف نوسانگر هماهنگ Dبعدی مربوط می‌شود و تمام حالات مسألهٔ کولن dبعدی (به استثنای d=۱) بازای n≥۱ و $l\geq 0$، ممکن است به حالات نوسانگری مناسب با N≥۰ و L≥۰ نگاشت یابند. اینک با استفاده از مختصات(۲) و صرفنظر از ضریب بهنجارش Λ، می‌توان رابطه (۱۰) را در مختصات دکارتی به صورت زیر نوشت[۹]:

$$\phi_{N_1,\ldots,N_D}=\prod_{j=1}^{D}\left(\alpha/\sqrt{\pi}\,2^{N_j}N_j!\right)^{1/2} e^{-(\alpha^2/2)x_j^2}H_{N_j}(\alpha x_j), \qquad (۱۳)$$

که در آن $H_N(\alpha x)$ چند جمله‌ای‌های هرمیت مرتبه N و $\alpha=(m\omega/\hbar)^{1/2}$ است. معادله (۱۳) بیان می‌دارد که می‌توان توابع موج مسألهٔ کولن را به صورت یک ترکیب خطی از توابع موج نوسانگر هماهنگ بسط داد.

۴. تابع توزیع ویگنر برای مسالهٔ کولن d بعدی

تابع موج شرودینگر در نمایش شرودینگری مکانیک‌کوانتومی، نقشی اساسی ایفا می‌کند که مشابه آن را تابع توزیع فضای فاز ویگنر در نمایش فضای فاز کوانتومی برعهده دارد و اغلب این تابع را تابع ویگنر می‌نامند. تابع ویگنر از روی تابع موج شرودینگر ساخته می‌شود و تابعی از متغیّرهای مکان و تکانه است که در فضای فاز d بعدی به صورت زیر تعریف می‌شود[۱۰]:

$$W(x_1,\dots,x_d,p_1,\dots,p_d;t)=(\pi\hbar)^{-d}\int_{-\infty}^{\infty}\dots\int_{-\infty}^{\infty}dy_1\dots dy_d \times \exp\left[2i(p_1y_1+\dots+p_dy_d)/\hbar\right]\psi^*(x_1+y_1,\dots,x_d+y_d;t)\times\psi(x_1-y_1,\dots,x_d-y_d;t), \tag{۱۴}$$

که در آن $x_1,\dots,x_d$ مختصات مستقل مکانی و $p_1,\dots,p_d$ متغیرهای تکانه مزدوج در فضای فاز d بعدی هستند. با استفاده از مختصات (۲) و در حالت مستقل از زمان مسألهٔ کولن d بعدی که هم ارز نوسانگر هماهنگ D بعدی است داریم:

$$W(x_1,\dots,x_D,p_1,\dots,p_D)=(\pi\hbar)^{-D}\int_{-\infty}^{\infty}\dots\int_{-\infty}^{\infty}dy_1\dots dy_D\ \exp\left[2i(p_1y_1+\dots+p_Dy_D)/\hbar\right]\times\phi^*(x_1+y_1,\dots,x_D+y_D)\ \phi(x_1-y_1,\dots,x_D-y_D), \tag{۱۵}$$

که در آن $p_1,\dots,p_D$ به ترتیب تکانه‌های مزدوج $x_1,\dots,x_D$ بوده و روابط جابجاگری $\left[x_j,p_k\right]=i\hbar\delta_{jk}$ را که $j,k=1,2,\dots,D$ و $p_j=-i\hbar\partial/\partial x_j$ است برآورده می‌کنند. حال با وارد کردن (۱۳) در (۱۵) و محاسبه با استفاده از رابطهٔ $H_N(-x)=(-1)^N H_N(x)$ خواهیم داشت:

$$W(x_1,\dots,x_D,p_1,\dots,p_D)=(\pi\hbar)^{-D}\pi^{-\frac{D}{2}}\prod_{j=1}^{D}\frac{(-1)^{N_j}}{2^{N_j}N_j!}e^{-\alpha^2x_j^2+\beta_j^2}\times\int_{-\infty}^{\infty}dz_j\,e^{-z_j^2}H_{N_j}(z_j+\beta_j+\alpha x_j)H_{N_j}(z_j+\beta_j-\alpha x_j), \tag{۱۶}$$

که در آن $z=\alpha(y-ip/\alpha^2\hbar)$ و $\beta=ip/\alpha\hbar$ است. با محاسبه انتگرال رابطهٔ (۱۶) می‌توان شکل تحلیلی تابع ویگنر مسألهٔ کولن در ابعاد دلخواه را بدست آورد[۹]:

$$W_{N_1,\dots,N_D}(\rho_1,\dots,\rho_D)=(\pi\hbar)^{-D}\prod_{j=1}^{D}(-1)^{N_j}e^{-\rho_j^2/2}L_{N_j}(\rho_j^2), \tag{۱۷}$$

که در آن L_N چند جمله‌ای لاگر مرتبه N بوده و $\rho=\left[2(\alpha^2x^2+p^2/\alpha^2\hbar^2)\right]^{1/2}$ است. تابع ویگنر (۱۷) را می‌توان برحسب هامیلتونی $\mathcal{H}(x,p)$ نیز نمایش داد که رابطهٔ مورد نظر این مقاله است:

$$W_{N_1,\dots,N_D}(\rho_1,\dots,\rho_D)=(\pi\hbar)^{-D}\prod_{j=1}^{D}(-1)^{N_j}\exp\left[\frac{-2}{\hbar\omega}\mathcal{H}(\rho_j)\right]L_{N_j}\left(\frac{4}{\hbar\omega}\mathcal{H}(\rho_j)\right), \tag{۱۸}$$

قابل ذکر است که نمایش سه بعدی این نتیجه قبلاً با استفاده از یک نگاشت خاص بدست آمده است [۱۱].

برای حالت پایه و اولین حالت برانگیخته به ترتیب خواهیم داشت:

$$W_{0,\dots,0}(\rho_1,\dots,\rho_D)=(\pi\hbar)^{-D}\exp\left[-\frac{1}{2}(\rho_1^2+\dots+\rho_D^2)\right] \tag{۱۹}$$

و

$$W_{1,0,\dots,0}(\rho_1,\dots,\rho_D)=(\pi\hbar)^{-D}(\rho_1^2-1)\exp\left[-\frac{1}{2}(\rho_1^2+\dots+\rho_D^2)\right] \tag{۲۰}$$

تابع ویگنر حالت پایه، در تمام نقاط فضای فاز مثبت است ولی تابع ویگنر اولین حالت برانگیخته در مبدأ منفی است. هر دو تابع مذکور به ازای مقادیر بسیار بزرگ $\rho_1+...+\rho_D$ به سمت صفر میل خواهند کرد.

نتیجه‌گیری

با استفاده از روش ارائه شده در این مقاله، محاسبهٔ تابع توزیع ویگنر برای مسألهٔ کولن به طور تحلیلی امکان‌پذیر خواهد بود. به وسیلهٔ این الگوی حلّ‌پذیر صریح می‌توان دامنه کاربرد تابع توزیع ویگنر را وسعت بخشیده به طوری که اهمیت بسزایی در حلّ مسائل دینامیکی داشته باشد.

References

1. C. Quesne and M. Moshinsky, J.Math. Phys. 12, 1780 (1971)
2. A. O. Barut, C.K. E. Schneider, and R. Wilson, J. Math. Phys. 20, 2244 (1979).
3. M. Kibler, A. Ronveaux, and T. Negadi, J. Math. Phys. 27, 1541 (1986).
4. G. J. Zeng, K.L. Su, and M. Li, Phys. Rev. A 50, 4373 (1994).
5. A. Chatterjee, Phys. Rep. 186, 249 (1990).
6. M. M. Nieto, Am. J. Phys. 47, 1067 (1979).
7. J. D. Louck and W.H. Schaffer, J.Mol. Spectrosc. 4, 285 (1960).
8. V. A. Kostelecky, M.M. Nieto, and D.R. Truax, Phys. Rev. D32, 2627 (1985).
9. S. Nouri, J. Math. Phys. 40,1294 (1999).
10. E. P. Wigner, Phys. Rev. 40, 749 (1932).
11. S. Nouri, Phys. Rev. A. 57, 1526 (1998).

Solution of the Coulomb problem in Quantum Phase Space

S. Nouri

The Center for Theoretical Physics and Mathematics

Atomic Energy Organization of Iran

Abstract

In this work we investigate the Coulomb problem in phase space picture of quantum mechanics. A coordinate transformation in hyperspherical space is used that maps the d - dimensional coulomb problem into the D- dimensional harmonic oscillator and the Wigner phase space distribution function for the Coulomb problem in arbitrary dimensions is then obtained analytically.