نشریه علمی سازمان انرژی اتمی ایران
شماره ۱۶، صفحات ۶ - ۱، ۱۳۷۷

تابع توزیع فضای فاز ویگنر برای اتم هیدروژن*

سعید نوری
مرکز فیزیک نظری و ریاضیات
سازمان انرژی اتمی ایران

چکیده

در این مقاله محاسبه‌ای نظری در مورد اتم هیدروژن در فضای فاز کوانتومی ارائه می‌شود. با استفاده از یک تبدیل مختصه‌ای، مسأله اتم هیدروژن را به مسأله یک نوسانگر هماهنگ چهار بعدی نگاشت[1] می‌دهیم و سپس با توجه به این تمهید ریاضی، تابع توزیع ویگنر فضای فاز کوانتومی برای اتم هیدروژن به طور صریح محاسبه می‌شود. این الگوی حل‌شدنی صریح، دامنه کاربرد تابع توزیع ویگنر را وسعت بخشیده و اهمیت بسزایی در مسائل دینامیکی مختلف خواهد داشت.

مقدمه

مسائل مربوط به نوسانگر هماهنگ و اتم هیدروژن [۲ و ۱] و همچنین ارتباط بین آن دو، از دیدگاههای مختلفی مورد بررسی قرار گرفته‌اند [۸-۳]. هدف ما از این کار استفاده از این ارتباط به منظور محاسبه تابع توزیع ویگنر برای اتم هیدروژن در فضای فاز کوانتومی است.

تابع توزیع ویگنر نقشی اساسی در یک باز فرمول‌بندی از مکانیک کوانتومی شرودینگر که تصویر فضای فاز مکانیک کوانتومی نامیده می‌شود، به عهده دارد. در این تصویر، حالت‌های فیزیکی سیستم توسط توابعی در فضای فاز توصیف می‌شوند که در آن متغیرهای مکان و تکانه پارامترهای معمولی هستند. در ادامه بحث و در بخش دوم، با استفاده از یک تبدیل مختصه‌ای، معادله شرودینگر برای اتم هیدروژن را به معادله شرودینگر یک نوسانگر هماهنگ چهار بعدی نگاشت می‌دهیم و سپس در بخش سوم با استفاده از این نگاشت، تابع توزیع ویگنر را برای اتم هیدروژن به طور صریح محاسبه می‌کنیم.

نگاشت اتم هیدروژن به نوسانگر هماهنگ

معادله شرودینگر برای اتم شبه هیدروژنی در مختصات قطبی کروی به صورت

---

* - اصل این مقاله در مجلهٔ Physical Review A در دست چاپ است.

۱ - Mapping

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2-\frac{Ze^2}{r}-E\right]\psi=0\quad, \qquad (1)$$

نوشته می‌شود که در آن m جرم کاهش یافته سیستم الکترون ـ هسته، Z عدد اتمی، E ویژه مقدار انرژی و ψ تابع موج سیستم است. با ضرب فاکتور ۴r در معادله (۱) و با استفاده از مختصات

$$\zeta = s\cos\alpha\cos\beta\,,$$
$$\zeta = s\cos\alpha\sin\beta\,,$$
$$\zeta = s\sin\alpha\cos\gamma\,,$$
$$\zeta = s\sin\alpha\sin\gamma\,, \qquad (2)$$

که به صورت زیر با مختصات قطبی کروی مرتبط است:

$$s=r^{1/2}\quad,\qquad 2\alpha=\theta\quad,\qquad \beta\pm\gamma=\phi\quad, \qquad (3)$$

معادله (۱) به معادله شرودینگر برای نوسانگر هماهنگ چهاربعدی به صورت زیر نگاشت می‌یابد:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_4^2-4Es^2-4Ze^2\right]\psi=0\,, \qquad (4)$$

که در آن $\sum_{j=1}^{4}\xi_j^2 = s^2$ و لاپلاسین چهاربعدی ∇_4^2 با رابطه زیر داده می‌شود:

$$\nabla_4^2=\sum_{j=1}^{4}\frac{\partial^2}{\partial\xi_j^2}\,. \qquad (5)$$

با قراردادن $-4E$ و $-4Ze^2$ به ترتیب برابر با $\frac{1}{2}m\omega^2$ و $N\hbar\omega$، که در آن $N = n_1+n_2+n_3+n_4+2$ است و با معادل قراردادن حالت پایه اتم هیدروژن ($n = 1$) و حالت نوسان نقطه صفر نوسانگر هماهنگ ($N = 2$) و با جایگذاری $N = 2n$، طیف انرژی اتم هیدروژن را به صورت $E_n = -mZ^2e^4/2n^2\hbar^2$ به دست می‌آوریم. با حل معادله (۴) جواب زیر را خواهیم داشت:

$$\psi_{n_1n_2n_3n_4}=\prod_{j=1}^{4}c_j\,e^{-(\alpha^2/2)\xi_j^2}\,H_{n_j}(\alpha\xi_j)\quad, \qquad (6)$$

که در آن $c=(\alpha/\sqrt{\pi}\,2^n n!)^{1/2}$ ثابت بهنجارش، $H_n(\alpha\xi)$ چند جمله‌ای هرمیت مرتبه n و $\alpha=(m\omega/\hbar)^{1/2}$ است. معادلهٔ (۶) بیانگر این مطلب است که می‌توان توابع موج هیدروژنی را به صورت ترکیبی خطی از توابع موج نوسانگر هماهنگ

چهاربعدی بسط داد.

تابع توزیع ویگنر برای اتم هیدروژن

چنان که می‌دانیم در تصویر شرودینگری مکانیک کوانتومی، تابع موج شرودینگر دارای نقش اساسی است که مشابه این نقش را در تصویر فضای فاز کوانتومی، تابع توزیع فضای فاز ویگنر بر عهده دارد و اغلب این تابع توزیع را تابع ویگنر می‌نامند. تابع ویگنر از تابع موج شرودینگر ساخته می‌شود و تابعی از متغیرهای مکان و تکانه است که در فضای فاز n بعدی به صورت زیر تعریف می‌شود [۱۰ و ۹]:

$$W(\chi_1, ..., \chi_n, p_1, ..., p_n; t) = (\pi \hbar)^{-n} \int_{-\infty}^{\infty} ... \int_{-\infty}^{\infty} dy_1 ... dy_n$$

$$exp\left[2i(p_1 y_1 + ... + p_n y_n)/\hbar\right] \psi^*(\chi_1 + y_1, ..., \chi_n + y_n; t) \quad \psi(\chi_1 - y_1, ..., \chi_n - y_n; t), \qquad (۷)$$

که در آن $\chi_1, ..., \chi_n$ مختصات مستقل مکانی و $p_1, ..., p_n$ متغیرهای تکانه مزدوج مربوطه در فضای فاز هستند. حال با استفاده از مختصات روابط (۲) و در حالت چهاربعدی مستقل از زمان داریم:

$$W(\xi_1, ..., \xi_4, q_1, ..., q_4) = (\pi \hbar)^{-4} \int_{-\infty}^{\infty} ... \int_{-\infty}^{\infty} dy_1 ... dy_4$$

$$exp\left[2i(q_1 y_1 + ... + q_4 y_4)/\hbar\right] \psi^*(\xi_1 + y_1, ..., \xi_4 + y_4) \quad \psi(\xi_1 - y_1, ..., \xi_4 - y_4), \qquad (۸)$$

که در آن $q_1, ..., q_4$ به ترتیب تکانه‌های مزدوج $\xi_1, ..., \xi_4$ هستند و روابط جابجاگری $\left[\xi_j, q_k\right] = i\hbar\delta_{jk}$ را که در آن $q_k = -i\hbar\partial/\partial\xi_k$ و $j, k = 1, 2, 3, 4$ است برآورده می‌کنند. این نکته شایان توجه است که روابط بین مختصات مکان ـ تکانه چهاربعدی و سه‌بعدی بخوبی شناخته شده است [۱۳-۱۱ و ۵].

حال با قراردادن تابع موج (٦) در رابطه (۸) و با محاسبه‌ای اندک و استفاده از رابطه $H_n(-\xi) = (-1)^n H_n(\xi)$ خواهیم داشت:

$$W(\xi_1, ..., \xi_4, q_1, ..., q_4) = \frac{(\pi\hbar)^{-4}}{\pi^2} \prod_{j=1}^{4} \frac{(-1)^{n_j}}{2^{n_j} n_j!} e^{-\alpha^2\xi_j^2 + \beta_j^2} \int_{-\infty}^{\infty} dz_j \, e^{-z_j^2}$$

$$H_{n_j}(z_j + \beta_j + \alpha\xi_j) \, H_{n_j}(z_j + \beta_j - \alpha\xi_j), \qquad (۹)$$

که در آن $z = \alpha(y - iq/\alpha^2\hbar)$ و $\beta = iq/\alpha\hbar$ است. با استفاده از رابطهٔ

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz \quad e^{-z^2} H_n(z+\beta+\alpha\xi)\, H_n(z+\beta-\alpha\xi) = \sqrt{\pi}\, 2^n n!\; L_n(2(\alpha^2\xi^2-\beta^2)), \tag{10}$$

که در آن L_n چند جمله‌ای لاگر مرتبه n است [۱۴] داریم:

$$W_{n_1,n_2,n_3,n_4}(\rho_1,\rho_2,\rho_3,\rho_4) = (\pi\hbar)^{-4}\prod_{j=1}^{4}(-1)^{n_j}\, e^{-\rho_j^2/2}\; L_{n_j}(\rho_j^2)\,, \tag{11}$$

که در آن کمیت بدون بعد ρ به صورت $\left[2(\alpha^2\xi^2 + q^2/\alpha^2\hbar^2)\right]^{1/2}$ تعریف می‌شود. چون

$$\frac{\rho^2}{2} = \frac{2}{\hbar\omega}\left(\frac{q^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\xi^2\right) = \frac{2}{\hbar\omega}\mathcal{H}(\xi,q)$$

که $\mathcal{H}(\xi,q)$ در آن هامیلتونی نوسانگر هماهنگ است، می‌توان رابطه (۱۱) را به صورت زیر نوشت:

$$W_{n_1,n_2,n_3,n_4}(\rho_1,\rho_2,\rho_3,\rho_4) = (\pi\hbar)^{-4}\prod_{j=1}^{4}(-1)^{n_j}\, exp\left[\frac{-2}{\hbar\omega}\mathcal{H}(\rho_j)\right] L_{n_j}\left(\frac{4}{\hbar\omega}\mathcal{H}(\rho_j)\right), \tag{12}$$

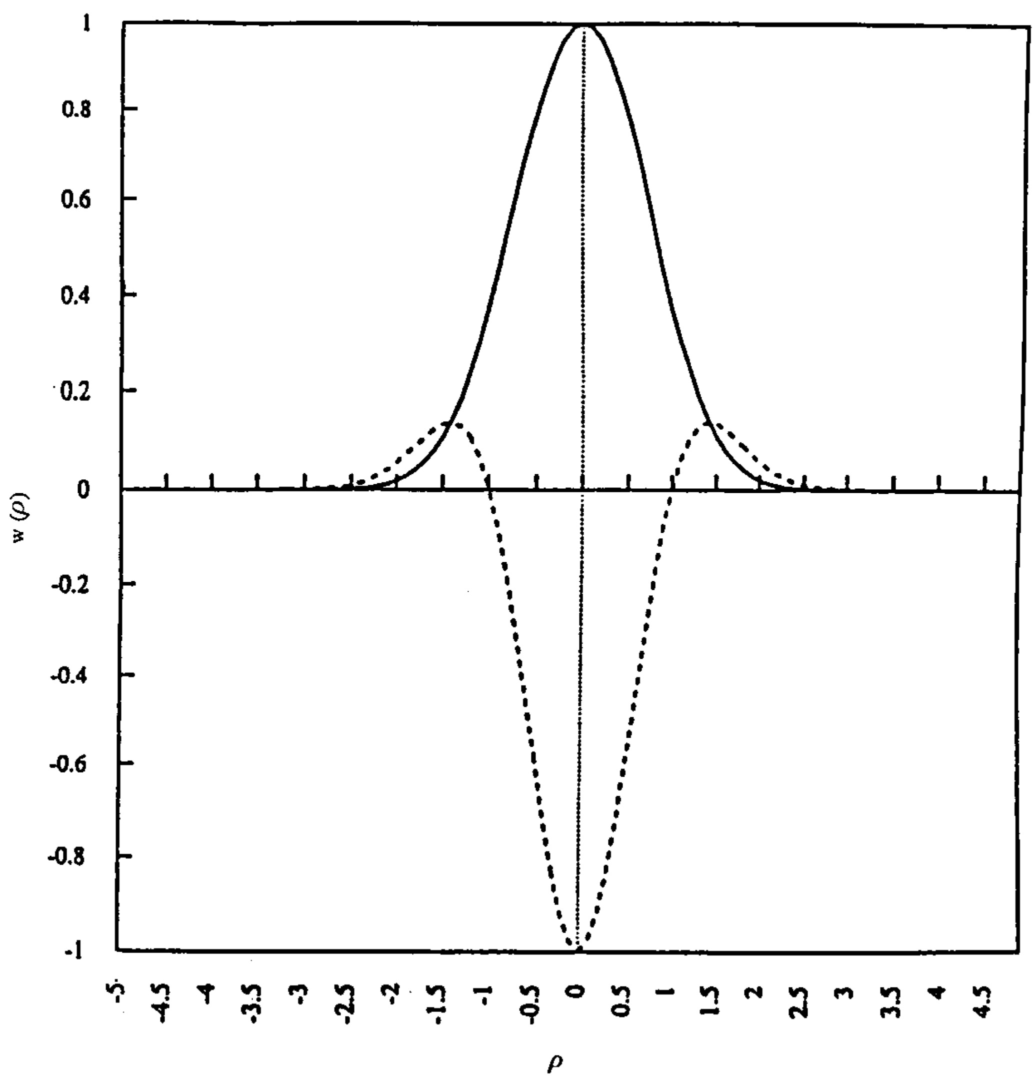
که رابطه موردنظر در این مقاله است. در رابطه (۱۱)، تابع ویگنر مطلوب برحسب متغیرهای مکان ـ تکانه است ولی در رابطه (۱۲) این تابع برحسب هامیلتونی نوسانگر هماهنگ چهاربعدی معادل اتم هیدروژن می‌باشد. تابع ویگنر مربوطه در حالت پایه و اولین حالت برانگیخته به ترتیب به صورت زیر خواهند بود:

$$W_{0,0,0,0}(\rho_1,\rho_2,\rho_3,\rho_4) = (\pi\hbar)^{-4} exp\left[-\frac{1}{2}(\rho_1^2+\rho_2^2+\rho_3^2+\rho_4^2)\right], \tag{13}$$

$$W_{1,0,0,0}(\rho_1,\rho_2,\rho_3,\rho_4) = (\pi\hbar)^{-4}(\rho_1^2 - 1)\; exp\left[-\frac{1}{2}(\rho_1^2+\rho_2^2+\rho_3^2+\rho_4^2)\right]. \tag{14}$$

حالت پایه در تمام نقاط فضای فاز مثبت است و اولین حالت برانگیخته در مبدا منفی است ولی برای مقادیر به اندازه کافی بزرگ

$\rho_1^2+\rho_2^2+\rho_3^2+\rho_4^2$ مثبت است. هر دو حالت بازای مقادیر بسیار بزرگ $\rho_1^2+\rho_2^2+\rho_3^2+\rho_4^2$ به سمت صفر میل خواهند کرد. سطح مقطع تغییرات تابع ویگنر حالت پایه و اولین حالت برانگیخته برحسب ρ، در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱- سطح مقطع تابع ویگنر $W(\rho)$ بر حسب ρ. نمودارهای توپر و نقطه‌چین به ترتیب مربوط به $W_{0,0,0,0}(\rho_1, \rho_2, \rho_3, \rho_4)$ و $W_{1,0,0,0}(\rho_1, \rho_2, \rho_3, \rho_4)$ هستند. تابع ویگنر $W(\rho)$ برحسب یکای $(\pi\hbar)^{-4}$ رسم شده است.

References

1. L.I. Schiff, Quantum Mechanics (McGraw-Hill, New York, 1968).
2. E. Merzbacher, Quantum Mechanics (Wiley, New York, 1970).
3. E. Schrödinger, Proc. R. Ir. Acad. Sect. A 46, 183 (1941).
4. C. Quesne and M. Moshinsky, J. Math. Phys. 12, 1780 (1971).
5. A.O. Barut, C.K.E. Schneider, and R. Wilson, J. Math. Phys. 20, 2244 (1979).
6. A.C. Chen, Phys. Rev. A 22, 333 (1980); 22, 2901 (E) (1980).
7. F.H.J. Cornish, J. Phys. A 17, 323 (1984).
8. D. Bhaumik, B.D. Roy, and G. Ghosh, J. Phys. A 19, 1365 (1986).
9. E.P. Wigner, Phys. Rev. 40, 749 (1932).
10. M. Hillery, R.F. O'Connell, M.O. Scully, and E.P. Wigner, Phys. Rep. 106, 121 (1984).
11. P. Kustaanheimo and E. Stiefel, J. Reine angew. Math. 218, 204 (1965).
12. A.C. Chen, J. Math. Phys. 23, 412 (1982).
13. M. Kibler, A. Ronveaux, and T. Negadi, J. Math. Phys. 27, 1541 (1986).
14. I.S. Gradshteyn and I.M . Ryzhik. Table of Integrals, Series and Product (Academic, New York, 1980).

WIGNER PHASE-SPACE DISTRIBUTION FUNCTION FOR THE HYDROGEN ATOM

S. Nouri
The Center for Theoretical Physics and Mathematics
Atomic energy Organization of Iran

Abstract

In this work we present a theoretical study of the hydrogen atom in quantum phase space. A coordinate transformation is used that maps the hydrogen atom into a four-dimensioinal harmonic oscillator and the Wigner distribution function for the hydrogen atom is then obtained. This exactly soluble model can shed some light on finit-size features of Wigner's distribution, which will be a vital experience for various dynamic problems.