

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشکده فیزیک

رشته فیزیک گرایش هسته‌ای

پایان نامه کارشناسی ارشد

بررسی آنتروپی شانون برای سیستم‌های نسبیتی و غیرنسبیتی

نگارنده :

سیده آمنه نجفی زاده

اساتید راهنما :

دکتر حسن حسن آبادی

دکتر صابر زرین کمر

شهریور ۱۳۹۵



پیوست شماره ۲

دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده : فیزیک

گروه: هسته ای

پایان نامه کارشناسی ارشد خانم سیده آمنه نجفی زاده

تحت عنوان: بررسی آنروپی شانون برای سیستم های نسبیتی و غیر نسبیتی

در تاریخ توسط کمیته تخصصی زیر جهت اخذ مدرک کارشناسی ارشد مورد ارزیابی و با درجه مورد پذیرش قرار گرفت.

امضاء	اساتید مشاور	امضاء	اساتید راهنما
	نام و نام خانوادگی :		نام و نام خانوادگی :

امضاء	نماینده تحصیلات تکمیلی	امضاء	اساتید داور
	نام و نام خانوادگی :		نام و نام خانوادگی :
		نام و نام خانوادگی :	
		نام و نام خانوادگی :	

تقدیم به

خدایی که آفرید

جهان را، انسان را، عقل را، معرفت را، عشق را

و به کسانی که عشقشان را در وجودم دمید

گاهی بیایم و احوالشان را پرسیم

و تقدیم به:

آن صنوبرهای سرخی که چون لاله زاده شدند

و چون شقایق ایستاده مردند

تشکر و قدردانی

سپاس خدای را که سخنوران، در ستودن او بمانند و شمارندگان، شمردن نعمت های او ندانند و کوشندگان، حق او را گزاردن نتوانند. و سلام و دورد بر محمد و خاندان پاک او، طاهران معصوم، هم آنان که وجودمان وامدار وجودشان است؛ و نفرین پیوسته بر دشمنان ایشان تا روز رستاخیز... بدون شک جایگاه و منزلت معلم، اجل از آن است که در مقام قدردانی از زحمات بی شائبه ی او، با زبان قاصر و دست ناتوان، چیزی بنگاریم. اما از آنجایی که تجلیل از معلم، سپاس از انسانی است که هدف و غایت آفرینش را تأمین می کند و سلامت امانت هایی را که به دستش سپرده اند، تضمین؛ بر حسب وظیفه و از باب ” من لم یشکر المنعم من المخلوقین لم یشکر الله عزّ و جلّ ”: از پدر و مادر عزیزم... این دو معلم بزرگوارم... که همواره بر کوتاهی و درشتی من، قلم عفو کشیده و کریمانه از کنار غفلت هایم گذشته اند و در تمام عرصه های زندگی یار و یابوری بی چشم داشت برای من بوده اند؛ از استادان با کمالات و شایسته؛ جناب آقایان دکتر حسن حسن آبادی و دکتر صابر زرین کر که در کمال سعه صدر، با حسن خلق و فروتنی، از هیچ کمکی در این عرصه بر من دریغ نمودند و زحمت راهنمایی این رساله را بر عهده گرفتند؛ و از استادان فرزانه و دلسوز؛ جناب آقای دکتر علی اکبر رجبی و خاتم دکتر نسرین صالحی که زحمت داوری این رساله را متقبل شدند؛ کمال تشکر و قدردانی را دارم.

باشد که این خردترین، بخشی از زحمات آنان را سپاس گوید.

تعهد نامه

اینجانب سیده آمنه نجفی زاده دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته فیزیک - هسته‌ای دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان نامه بررسی آنروپی شانون برای سیستم های نسبیتی و غیر نسبیتی تحت راهنمایی دکتر حسن حسن آبادی و دکتر صابر زرین کمر متعهد می‌شوم.

- تحقیقات در این پایان نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهشهای محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطالب مندرج در پایان نامه تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ جا ارائه نشده است.
- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد و مقالات مستخرج با نام « دانشگاه صنعتی شاهرود » و یا « Shahrood University of Technology » به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایج اصلی پایان نامه تأثیرگذار بوده اند در مقالات مستخرج از پایان نامه رعایت می گردد.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه ، در مواردی که از موجود زنده (یا بافتهای آنها) استفاده شده است ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده است اصل رازداری ، ضوابط و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است .

تاریخ :

امضای دانشجو:

مالکیت نتایج و حق نشر

- کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه های رایانه ای، نرم افزار ها و تجهیزات ساخته شده است) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.
- استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان نامه بدون ذکر مرجع مجاز نمی باشد.

چکیده :

در این پایان نامه به بررسی نظریه سیستم‌های اطلاعات کوانتومی برای توصیف پدیده‌های کوانتومی در ساختارهای الکترونیکی و هسته‌ای می‌پردازیم. یکی از کاربردهای مفاهیم و تکنیک‌های نظریه اطلاعات در ساختارهای اتمی، مولکولی و هسته‌ای است که در این کار در هر دو محدوده سیستم‌های نسبیتی (معادله دیراک) و غیرنسبیتی (معادله شرودینگر) مورد بررسی قرار می‌گیرند. چنین روندی به نمایش آنتروپی اطلاعات سیستم‌های نسبیتی و غیرنسبیتی، که مکمل نمایش انرژی بر مبنای نظریه‌های تابعی چگالی و تابع موج است، منجر می‌شود. در این فرآیند، مهم‌ترین نقش را مفهوم اطلاعات بازی می‌کند.

در ابتدا مفهوم "اطلاعات"، برخی اندازه‌گیری‌های اطلاعات شامل انحراف معیار، آنتروپی شانون و اطلاعات فیشر، معرفی می‌شوند و خواص مشخصه آن‌ها مورد بررسی قرار می‌گیرند. همچنین، این اندازه‌گیری‌های اطلاعات را برای سیستم‌های غیرنسبیتی هیدروژنی (پتانسیل کولنی) و پتانسیل شبه هماهنگ در سه بعد بررسی می‌کنیم و روابط عدم قطعیت مربوطه را به دست می‌آوریم. در ادامه، همین اندازه‌گیری‌ها در چارچوب معادله کلین گوردون برای پتانسیل پوشل - تله و در چارچوب نسبیتی دیراک برای چاه پتانسیل بینهایت مربعی در یک بعد تعیین می‌شود. علاوه بر این، اندازه‌گیری‌های اطلاعات برای نوسانگرهای هماهنگ وابسته به زمان (نوسانگرهای لگاریتم دوره‌ای) مورد بررسی قرار می‌گیرد. در پایان، خواص جهانی آنتروپی اطلاعات برای سیستم‌های تک فرمیونی بررسی می‌شود. سپس، آنتروپی اطلاعات برای یک نوکلئون در هسته و نیز یک مدل (شبه-) نسبیتی تحلیلی از یک ابرهسته محاسبه می‌شود و نتایج به صورت عددی نشان داده می‌شود.

کلمات کلیدی : انحراف معیار، آنتروپی شانون، اطلاعات فیشر، روابط عدم قطعیت، سیستم

نسبیتی، سیستم غیر نسبیتی، معادله شرودینگر، معادله کلین گوردون، معادله دیراک.

لیست مقالات مستخرج شده از پایان نامه:

- [1] S. A. Najafizade, H. Hassanabadi, and S. Zarrinkamar. "Nonrelativistic Shannon information entropy for Kratzer potential." *Chinese Physics B* 25.4 (2016): 040301.
- [2] S. A. Najafizade, H. Hassanabadi, and S. Zarrinkamar. "Nonrelativistic Shannon information entropy for Killingbeck potential." *Canadian journal of physics*.
Accepted for publication.

فهرست مطالب

۱	فصل اول: اندازه‌گیری اطلاعات نظری.....
۱-۱	تعاریف و مفاهیم
۲	۱-۲- اندازه‌گیری‌های جهانی
۳	۱-۲-۱- انحراف معیار
۴	۱-۲-۲- معرفی آنتروپی شانون
۷	۱-۳- اندازه‌گیری‌های موضعی: اطلاعات فیشر.....
۹	۱-۴- مقایسه بین اندازه‌گیری‌های اطلاعات
۱۳	۱-۵- رابطه‌های عدم قطعیت هایزنبرگ، آنتروپی شانون و فیشر
۱۵	فصل دوم: بررسی نظریه اطلاعات برای سیستم‌های غیرنسبیتی
۱۹	۱-۲- مقدمه
۲۰	۱-۲-۲- حل معادلات در سیستم‌های غیرنسبیتی در دو فضای مکان و تکانه
۲۱	۱-۲-۲-۱- بررسی سیستم‌های هیدروژنی
۲۱	۱-۲-۲-۱- چگالی احتمال در فضای مکان
۲۲	۱-۲-۲-۲- چگالی احتمال در فضای تکانه
۲۴	۱-۲-۲-۲- معادله شرودینگر سه بعدی برای پتانسیل شبه هماهنگ
۲۵	۱-۲-۲-۲- تابع موج در فضای مکان
۲۵	۱-۲-۲-۲- تابع موج در فضای تکانه

- ۳-۲- محاسبه آنتروپی اطلاعات شانون برای دو سیستم غیرنسبیتی (سیستم هیدروژنی سه بعدی و پتانسیل شبه هماهنگ) ۲۸
- ۳-۲-۱- آنتروپی شانون در فضای مکان برای سیستم هیدروژنی ۲۸
- ۳-۲-۲- آنتروپی شانون در فضای تکانه ۳۰
- ۳-۳-۲- آنتروپی شانون برای پتانسیل شبه هماهنگ ۳۰
- ۴-۲- محاسبه اطلاعات فیشر برای دو سیستم غیر نسبیتی (سیستم‌های هیدروژنی سه بعدی و پتانسیل شبه هماهنگ)..... ۳۵
- ۴-۲-۱- اطلاعات فیشر در فضای مکان برای سیستم هیدروژنی..... ۳۵
- ۴-۲-۲- اطلاعات فیشر در فضای تکانه ۳۶
- ۴-۲-۳- آنتروپی اطلاعات فیشر برای پتانسیل شبه هماهنگ ۳۶
- ۵-۲- روابط عدم قطعیت ۴۰
- ۵-۲-۱- روابط عدم قطعیت بر مبنای آنتروپی شانون در سیستم هیدروژنی ۴۰
- ۵-۲-۲- روابط عدم قطعیت بر مبنای آنتروپی شانون برای پتانسیل شبه هماهنگ ۴۰
- ۵-۲-۳- روابط عدم قطعیت بر مبنای اطلاعات فیشر برای سیستم هیدروژنی ۴۰
- ۵-۲-۴- روابط عدم قطعیت بر مبنای اطلاعات فیشر برای سیستمی با پتانسیل شبه هماهنگ .. ۴۱
- ۵-۲-۵- روابط کرامر-رائو در سیستم هیدروژنی ۴۱
- ۶-۲- نتیجه‌گیری ۴۱

فصل سوم: اندازه‌گیری آنتروپی اطلاعات نظری از معادله‌های کلین گوردون و دیراک.....	۴۳
۳-۱- مقدمه	۴۴
۳-۲- حل‌های معادله کلین گوردون با پتانسیل پوشل – تله.....	۴۵
۳-۳- آنتروپی اطلاعات برای معادله کلین گوردون.....	۴۹
۳-۴- حل‌هایی از معادله دیراک برای چاه پتانسیل بینهایت	۵۱
۳-۵- آنتروپی اطلاعات شانون	۵۴
۳-۶- اطلاعات فیشر و اصل عدم قطعیت	۶۰
۳-۷- نتایج	۶۳
فصل چهارم: آنتروپی اطلاعات شانون و آنتروپی فیشر برای نوسانگرهای هماهنگ وابسته به زمان.....	۶۵
۴-۱- مقدمه	۶۶
۴-۲- ملاحظات اولیه	۶۸
۴-۳- ویژگی‌های نظریه کوانتومی وابسته به زمان	۶۸
۴-۴- آنتروپی اطلاعات شانون و واریانس	۸۳
۴-۵- اطلاعات فیشر	۸۸
۴-۶- نتایج	۹۱
فصل پنجم: روند خواص جهانی آنتروپی اطلاعات برای سیستم‌های تک فرمیونی.....	۹۳
۵-۱- مقدمه.....	۹۴

۹۴.....	۲-۵- ملاحظات اولیه.....
۹۶.....	۳-۵- آنتروپی اطلاعات برای یک نوکلئون در هسته.....
۹۸.....	۴-۵- آنتروپی اطلاعات برای یک ذره Λ در یک ابرهسته.....
۱۰۰.....	۵-۵- بحث و نتایج.....
۱۰۲.....	نتایج.....
۱۰۳.....	مراجع.....

فهرست اشکال

۱۴.....	شکل (۱-۱) نمایش $f(x) \sim e^{-ax}$ و $g(x) \sim e^{-ax} + \varepsilon \sin^2 nx$
۱۵.....	شکل (۲-۱) نمایش $f(x) = \frac{2}{\pi} \cos^2(x)$ و $g(x) = \frac{2}{\pi} \cos^2\left(x + \frac{\pi}{4}\right)$
۳۴.....	شکل (۱-۲) تغییر آنتروپی اطلاعات شانون در فضای مکان $(S[\rho])$ با ℓ برای Na_2, Cl_2, O_2^+, N_2^+ و NO^+
۳۹.....	شکل (۲-۲) تغییر آنتروپی اطلاعات فیشر در فضای مکان $(I[\rho])$ با ℓ برای Na_2, Cl_2, O_2^+, N_2^+ و NO^+
۴۸.....	شکل (۱-۳) بخش شعاعی تابع موج برای حالت‌های پایه و برانگیخته.....
۴۹.....	شکل (۲-۳) بخش قطبی تابع موج برای حالت‌های پایه و برانگیخته.....
۴۹.....	شکل (۳-۳) بخش سمتی تابع موج برای حالت‌های پایه و برانگیخته.....
۵۰.....	شکل (۴-۳) بخش شعاعی چگالی‌های آنتروپی اطلاعات برای حالت‌های پایه و برانگیخته.....
۵۰.....	شکل (۵-۳) بخش قطبی چگالی‌های آنتروپی اطلاعات برای حالت‌های پایه و برانگیخته.....
۵۰.....	شکل (۶-۳) بخش سمتی چگالی‌های آنتروپی اطلاعات برای حالت‌های پایه و برانگیخته.....

- شکل (۳-۷) تغییرات آنتروپی اطلاعات مکان برای حالت‌های پایه و برانگیخته..... ۵۱
- شکل (۳-۸) چگالی‌های آنتروپی فضای مکان $\Phi_n^+(x)$ برای $n=1,2$ و $a=2$ ۵۳
- شکل (۳-۹) چگالی‌های آنتروپی فضای مکان $\Phi_n^-(x)$ برای $n=1,2$ و $a=2$ ۵۳
- شکل (۳-۱۰) چگالی‌های آنتروپی فضای تکانه $\Phi_n^+(p)$ برای $n=1,2$ و $a=2$ ۵۵
- شکل (۳-۱۱) چگالی‌های آنتروپی فضای تکانه $\Phi_n^-(p)$ برای $n=1,2$ و $a=2$ ۵۵
- شکل (۳-۱۲) چگالی‌های آنتروپی فضای مکان $\rho_n^s(x)$ برای حالت‌های $n=1,2$ ۵۸
- شکل (۳-۱۳) چگالی‌های آنتروپی فضای تکانه $\gamma_n^s(p)$ برای حالت‌های $n=1,2$ ۵۸
- شکل (۳-۱۴) چگالی‌های احتمال آنتروپی فضای مکان $\rho_n(x)$ برای حالت‌های $n=1,2$ ۵۹
- شکل (۳-۱۵) چگالی‌های احتمال آنتروپی فضای تکانه $\gamma_n(p)$ برای حالت‌های $n=1,2$ ۵۹
- شکل (۳-۱۶) آنتروپی اطلاعات شانون برای حالت‌های $n=1,2$ ۶۰
- شکل (۳-۱۷) آنتروپی اطلاعات فیشر برای حالت‌های $n=1,2$ ۶۲
- شکل (۴-۱) ارزیابی $|\psi_0(x,t)|^2$ برای (a) نوسانگر (۲) و (b) برای نوسانگر (۳). در شکل‌ها از $\omega_0 = 5$
- استفاده کرده‌ایم..... ۸۷
- شکل (۴-۲) (a) و (b) رسم‌هایی از $I_x(t)$ و $I_p(t)$ برای نوسانگر (۲) و (c) و (d) رسم‌هایی از $I_x(t)$ و $I_p(t)$ برای نوسانگر (۳). در شکل‌ها از $m_0 = \omega_0 = 1$ استفاده کرده‌ایم..... ۹۰
- شکل (۵-۱) (a) مقادیر آنتروپی اطلاعات S_r (مربع‌ها)، S_k (دایره‌ها) و $S_r + S_k$ (مثلث‌ها)، به صورت عددی محاسبه می‌شوند، برحسب تعداد ذرات N . خطوط مطابق با عبارتهای فیت شده ما S_r (or S_k) = $a + bN^{1/3}$ می‌باشند. (b) مقایسه جمع $S_r + S_k$ برای حالت‌های متفاوت تک ذره‌ای پروتون..... ۹۸
- شکل (۵-۲) به همان صورت شکل ۵-۱ برای یک ذره در یک ابرهسته با بکار بردن یک مدل نسبیتی..... ۱۰۰

فهرست جداول

- جدول (۱-۱) اندازه‌گیری اطلاعات تئوری $f(x)$ و $g(x)$ ۱۴
- جدول (۱-۲) ثابت‌های طیفی برخی مولکول‌های دو اتمی ۳۳
- جدول (۲-۲) آنتروپی اطلاعات شانون برای پتانسیل شبه هماهنگ برای برخی مولکول‌های دو اتمی
با $\ell = 0$ در فضای مکان ۳۳
- جدول (۳-۲) آنتروپی اطلاعات شانون برای پتانسیل شبه هماهنگ برای برخی مولکول‌های دو اتمی
با $\ell = 0$ در فضای تکانه ۳۴
- جدول (۴-۲) آنتروپی اطلاعات فیشر برای پتانسیل شبه هماهنگ برای برخی مولکول‌های دو اتمی
با $\ell = 0$ در فضای مکان. واحد مربع $I[\rho]$ ، $eV / (A^\circ)^2$ است ۳۸
- جدول (۵-۲) آنتروپی اطلاعات فیشر برای پتانسیل شبه هماهنگ برای برخی مولکول‌های دو اتمی
با $\ell = 0$ در فضای تکانه. واحد مربع $I[\gamma]$ ، $(A^\circ)^2 / eV$ است ۳۹
- جدول (۱-۳) آنتروپی اطلاعات شانون ویژه حالت‌های $n=1,2$ برای مقادیر $a=1,2,3$
۵۷
- جدول (۲-۳) نتایج عددی برای رابطه عدم قطعیت و آنتروپی اطلاعات فیشر برای ویژه حالت‌های
 $n=1,2$ با مقادیر $a=1,2,3$ ۶۳
- جدول (۱-۵) نتایج عددی پارامترهای a و b که در عبارت S_r (or S_k) = $a + bN^{1/3}$ برای یک
نوکلئون (پروتون) در هسته‌ها با توجه به تعامل SkIII و یک ذره Λ در یک ابرهسته با مدل نسبیتی
به دست می‌آید ۱۰۱

فصل اول

اندازه‌گیری اطلاعات نظری

۱-۱- تعاریف و مفاهیم

خواص فیزیکی و شیمیایی اتم‌ها و ملکول‌ها به شدت به گسترش چگالی احتمال که مشخصه حالت‌های مکانیک کوانتومی مجاز است، بستگی دارد. این گسترش به طریقی دیگر می‌تواند در نظر گرفته شود و با استفاده از اندازه‌گیری اطلاعات نظری متفاوت فراتر از انحراف معیار مشهور یا مربع آن، واریانس بیان گردد.

تعیین این مقادیر اطلاعات نظری یک هدف اصلی اطلاعات نظریه سیستم‌های محدود کوانتومی است، که قوی‌ترین پشتیبانی از اطلاعات مدرن و محاسبات است [۱]. علاوه بر این، این اندازه‌گیری‌ها و مفاهیم مرتبط عدم قطعیت، روش تصادفی، اختلال و موضعی بودن عناصر اولیه روبه‌رو شدن با یک نقش مناسب برای شناسایی و شرح برای پدیده‌های کوانتومی متعدد در سیستم‌های فیزیکی و فرآیندهای شیمیایی بازی می‌کنند. این موضوع در ابتدا توسط بکسر-بیرولا^۱ و میسیلیسکی^۲ [۲]، گادر^۳ و سیرز^۴ و همکارانش [۳-۷]، لوین^۵ [۸] و اعضای گرانا^۶ [۹-۱۲] و گروه کینگروستن^۷ [۱۵-۱۳] نشان داده شده است، که در میان دیگران از عقاید و روش‌های فیشر^۸ [۱۶] و شانون^۹ [۱۷] و ... سود جست‌اند، پیش از این در آمار، مکانیک آماری، نظریه ارتباطات و تئوری اطلاعات کلاسیکی توسعه داده شده‌اند.

در این فصل، ما اندازه‌گیری اطلاعات تئوری واحد مورد استفاده در سراسر این کار را در نظر می‌گیریم که توصیف گسترش توزیع احتمال در سراسر حوزه تعریف خود فراتر از انحراف معیار مشهور (یا مربع آن، واریانس)، تعاریف و تفاسیرشان در سه بخش مطرح شده است. ابتدا در بخش ۱-۲،

¹ Bialynicki-Birula

² Mycielski

³ Gadre

⁴ Sears

⁵ Levine

⁶ Granada

⁷ Kingston

⁸ Fisher

⁹ Shannon

اندازه‌گیری‌هایی از ویژگی جهانی، که تعیین میزان کل چگالی احتمال در شیوه‌های مختلف با توجه به ساختار تحلیلی متفاوتشان است، در نظر می‌گیریم. به بیان دقیق‌تر، به وسیله واریانس و لگاریتم (شانون) تابعی از چگالی است، توصیفاتی وجود دارد. پس از آن در بخش ۱-۳، اطلاعات فیشر مورد بحث قرار می‌گیرد. این مقدار کیفی متفاوت است چرا که تابعی از شیب چگالی احتمال است، بنابراین به رفتار تحلیلی چگالی بسیار حساس است، آن یک اندازه‌ای از ویژگی موضعی در این معناست. مقایسه اجمالی میان این اندازه‌گیری‌ها در بخش ۱-۴ انجام شده است. در نهایت در بخش ۱-۵ برخی روابط عدم قطعیت مربوط به اندازه‌گیری‌های اطلاعات تعریف شده در این فصل ارائه شده است. به این ترتیب در فصل‌های بعدی این اندازه‌گیری‌ها برای سیستم‌های مختلف شامل غیر نسبیتی (پتانسیل کولنی و شبه نوسانگر در سه بعد) [۲۲-۱۸]، برای معادله کلین گوردون (پتانسیل پوشل - تلر) [۲۳] و در سیستم‌های نسبیتی (چاه پتانسیل بینهایت) انجام می‌شود. در فصل چهارم همین اندازه‌گیری‌ها برای نوسانگرهای وابسته به زمان [۲۴، ۲۵] انجام شده است و در فصل آخر روندی از این اندازه‌گیری‌ها در هسته‌ای [۲۸-۲۶] ارائه شده است و در پایان هر فصل نتایجی از کارها گزارش شده است.

۲-۱- اندازه‌گیری‌های جهانی

فرض ما در اینجا بحث خلاصه‌ای در مورد غیر موضعی بودن فضای اصلی یا کمیت‌های گسترش ویژگی جهانی که اغلب به عنوان اندازه‌گیری‌های عدم قطعیت کوانتومی، یعنی انحراف معیار و اندازه‌گیری‌های واحد اطلاعات نظری چون شانون استفاده می‌شود. همچنین، ما به طور مختصر روابط عدم قطعیت مربوط به این اندازه‌گیری‌ها را در سیستم‌های کوانتومی در هر ابعادی بررسی می‌کنیم. باید تاکید کنیم که برای تعریف یک مفهوم اطلاعات سیستم فیزیکی از کل آن استفاده نمی‌کنیم، بلکه می‌خواهیم اندازه‌ای مناسب از عدم قطعیت و اطلاعات برای حالت‌های خاص واقعی از یک سیستم کوانتومی داشته باشیم.

۱-۲-۱- انحراف معیار

برای متغیر تصادفی X با N مقدار ممکن $\{X_i\}_{i=1}^N$ با احتمالات $\{p_i\}_{i=1}^N$ ، عدم قطعیت در نتیجه اندازه‌گیری با انحراف استاندارد $\sigma = \Delta x$ داده می‌شود که با جذر مربع واریانس تعریف می‌شود:

$$V[X] \equiv \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2 \quad (1-1)$$

که $\langle X \rangle$ مقدار متوسط است که به صورت زیر تعریف می‌شود

$$\langle X \rangle = \sum_{i=1}^N p_i X_i \quad (2-1)$$

و به طور مشابه برای $\langle X^2 \rangle$ برحسب X_i^2 مطرح می‌شود.

می‌توانیم ببینیم که واریانس برای همه مقادیر ممکن برحسب جمعی از ضرب احتمالات آن تعریف شده است و بنابراین به مرتبه اول این مقادیر بدست آمده بستگی ندارد. چنین رفتاری به ویژگی جهانی آن مربوط می‌شود.

واریانس می‌تواند به طور مستقیم به مقادیر پیوسته تعمیم داده شود. در واقع برای متغیرهای پیوسته، یک چگالی احتمال $\rho(x)$ با $x \in [a, b]$ داریم و که واریانس آن می‌شود

$$V_\rho \equiv \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad (3-1)$$

و مقدار متوسط تابع $f(x)$ به صورت زیر داده می‌شود

$$\langle f(x) \rangle = \int_a^b f(x) \rho(x) dx \quad (4-1)$$

انحراف استاندارد $\Delta x = \sqrt{V}$ تعریف خوبی از گسترش چگالی احتمال حول مرکز می‌دهد. این اندازه‌گیری از تمایز ناحیه‌های متمرکز در یک نقطه خاص از توزیع (مقدار متوسط) می‌باشد، نسبت به اندازه‌گیری که تا چه حدی توزیع در واقع متمرکز است. علاوه بر این، این کمیت یک اندازه‌گیری

مستقیم از گستردگی در حالتی که دارای واحدهای مشابه به عنوان متغیر تصادفی است و دارای خواصی ثابت تحت انتقال و بازتاب، مقیاس پذیری خطی با X (برای $y = ax$) می‌باشد و $\Delta y = a\Delta x$ در حدی که متغیر تصادفی برخی مقادیر معینی دارد حذف می‌شود. بنابراین انحراف معیار برای یک توزیع دلتای دیراک حذف می‌شود و مقدار آن وقتی دور از آن پیش رود افزایش می‌یابد. در حالت گاوسی، انحراف معیار نسبتاً به عرض در نیم ارتفاع چگالی مربوط می‌شود. این مشاهدات استفاده از انحراف معیار به عنوان اندازه‌ای از عدم قطعیت در تمام سال‌ها حمایت کرده است. امروزه، این استفاده به شدت سوال می‌شود به علت اینکه آن نامناسب است و علاوه بر این آن اختیاری است به این معنی که بر مبنای بدیهات قرار ندارد. با توجه به گذشته، انحراف معیار تقریب خوبی از عدم قطعیت برای توزیع های گاوسی و شبه گاوسی می‌باشد، اما در دیگر حالات آن خوب نیست، به عبارت دیگر، فرض کنید توزیع مربع سینوسی و کوشی که به ترتیب به صورت زیر داده می‌شوند را در نظر بگیریم.

$$p(x) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{\sin x}{x} \right)^2 \quad (5-1)$$

و

$$p(x,t) = \frac{\alpha}{\pi(x-\alpha)^2 + \alpha^2} \quad (6-1)$$

که انحراف معیار برای همه مقادیر ممکن غیر منفی پارامتر α و اگر α می‌باشد علی‌رغم این واقعیت که این چگالی وقتی $\alpha \rightarrow 0$ به صورت اختیاری متمرکز می‌شود، یعنی وقتی $\alpha > 0$ باشد $p(x)$ به سمت توزیع دلتای دیراک میل می‌کند. در واقع، انحراف معیار نه ذاتی است و به طور کلی اندازه‌گیری متناسبی از عدم قطعیت کوانتومی و هایزنبرگ^۱ یا بهتر، نابرابری کنارد^۲-ویل^۳-هایزنبرگ می‌باشد

¹ Heisenberg

² Kennard

³ Weyl

[۲۹]، $\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2}$ ، از طریق تصدیق ریاضیات، همیشه عبارت مناسبی از اصل عدم قطعیت نیست. دلیل این امر نارسایی ناشی از این امر است که انحراف معیار همواره وزن رو به رشدی به دنباله‌های توزیع می‌دهد. در واقع، به این دلیل این دنباله قوی وابسته به انحراف معیار، ممکن است توزیع احتمال را به تابع دلتای دیراک نزدیک سازد، در حالی که انحراف معیار آن به صورت اختیاری بزرگ باقی می‌ماند. بنابراین یک توزیع خیلی سبک برای چگالی احتمال نشان می‌دهد که خیلی دور از مقدار متوسط قرار گرفته است، ممکن است باعث شود که انحراف معیار کاهش یابد. این وابستگی به این موضوع که وقتی دنباله‌ها به صورت نمایی سقوط می‌کنند؛ همان‌طور که برای توزیع گاوسی اتفاق می‌افتد مربوط نمی‌شود، اما برای توزیع‌های احتمالی مکانیک کوانتومی به طور کلی انحراف معیار به طور مستقیم بیان نمی‌کند که چه چیزی به عنوان عرض توزیع تفسیر شده است [۳۰]. در زیر هیلگوود^۱، یک اندازه‌گیری مناسب از عرض که طول کوچکترین فاصله‌ای که در آن بخش عمده ای از توزیع قرار داده شده است، می‌باشد. بنابراین مهم است توجه داشته باشیم که روابط عدم قطعیت دقیقی برای این نوع عرض وجود دارد که ابتدا توسط لاندائ^۲ و پولاک^۳ [۳۱] در سال ۱۹۶۱ و سپس توسط نویسندگان دیگر با استفاده از کمیت‌های اطلاعات نظری به دست آمد، به طور مستقیم محتوای اصل عدم قطعیت را بیان کردند.

این تعریف را می‌توان به عدد دلخواه D بعد در روش مستقیمی گسترش داد. در واقع برای چگالی احتمال D بعدی، $\rho(\vec{r})$ ، در حوزه $\Delta \subseteq \mathcal{R}^D$ تعریف می‌شود، آنگاه واریانس

$$V_\rho \equiv \langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2 \quad (7-1)$$

که $r = |\vec{r}|$ و مقدار چشمداشتی تابع $f(\vec{r})$ به صورت زیر داده می‌شود

¹ Hilgevoord

² Landau

³ Pollak

$$\langle f(\vec{r}) \rangle = \int_{\Delta} f(\vec{r}) \rho(\vec{r}) d\vec{r} \quad (8-1)$$

۱-۲-۲- آنترپی شانون

یکی از مرتبطترین مفاهیم در این کار آنترپی شانون است، که ریشه‌های آن در زمینه اطلاعات تئوری را می‌یابیم. در سال ۱۹۴۰ کلود الود شانون مجموعه‌ای از مفروضات معقول پیشنهاد داد که باید یک کاندید برای اندازه‌گیری مناسب از متوسط عدم قطعیت برای یک مجموعه متناهی از حوادث قابل مشاهده را شامل می‌شود، برآورده کند، یعنی نتایج اندازه‌گیری و یا تشخیص یک سیگنال در یک کانال ارتباطی. برای یک متغیر تصادفی X با مقادیر ممکن N ، $\{X_i\}_{i=1}^N$ ، توسط توزیع احتمال $\{p_i\}_{i=1}^N$ توصیف می‌شود، این شرایط به فرم زیر هستند:

- عدم قطعیت باید یک تابع پیوسته و متقارن از $\{p_i\}_{i=1}^N$ باشد، یعنی تغییرات کوچک از احتمالات تنها باید باعث تغییرات کمی از عدم قطعیت شود.
- وقتی همه‌ی احتمالات برابر هستند، $p_1 = p_2 = \dots = p_N = \frac{1}{N}$ ، یعنی اندازه‌گیری عدم قطعیت باید به حداکثر مقدار خود، به عنوان یک تابع افزایشی از N ، در وضعیت احتمال مساوی برسد، برای تعداد بیشتری از احتمالات (N) با متغیر تصادفی X ، عدم قطعیت بالاتر است.
- عدم قطعیت در ارتباط با $\{p_i\}_{i=1}^N$ باید برابر باشد نسبت به عدم قطعیتی که مربوط می‌شود اگر $\{p_i\}_{i=1}^M$ اگر $p_{N+1} = p_{N+2} = \dots = p_M = 0$ ، یعنی اضافه کردن یک مجموعه دلخواه از مقادیر ممکن با احتمال صفر به متغیر X عدم قطعیت از اندازه‌گیری را حفظ می‌کند.

شانون نشان داد [۳۲، ۱۷] که این فرضیات تنها با بیان زیر برآورده می‌شوند

$$H[X] \equiv -k \sum_{i=1}^N p_i \ln p_i \quad (9-1)$$

که در آن $p_i \ln p_i = 0$ برای $p_i = 0$ و با k یک ثابت مثبت دلخواه می‌باشد، در ادامه انتخاب مقدار $k=1$ به خاطر سادگی کار است. این تعریف می‌تواند طبیعتاً به یک چگالی احتمال پیوسته تعمیم داده شود، $x \in \Delta \subseteq \mathbb{R}$ ، همان طور که توسط خود شانون پیشنهاد شد، در شکل

$$H[X] = -\int_{\Delta} p(x) \ln p(x) dx \quad (10-1)$$

که برای این مقادیر X برای وقتی که $p(x) \ln p(x) = 0$ ، $p(x) = 0$ فرض شده است. این مفهوم اغلب به عنوان آنتروپی دیفرانسیلی شناخته می‌شده است. مقادیری از این کمیت برای یک لیست گسترده از چگالی‌های احتمال پیوسته در مرجع [۳۳] جمع‌آوری شده است. بعدها، این نماد توسط هاتری^۱ [۳۴] در یک روش مشابه در نسخه‌های گسسته بدست آمده است. همچنین می‌تواند با جداسازی توزیع پیوسته به وسیله‌ی پارتیشن بندی بازه‌های معین Δ به زیربازه‌هایی استنباط شود، با در نظر گرفتن آنتروپی گسسته و بعد گرفتن حد آن وقتی عرض زیربازه‌ها به سمت صفر میل می‌کند، هر چند که باید نتیجه نهایی غیر بهنجارش باشد همان طور که در قسمت ۹،۳ در مرجع [۳۳] توضیح داده شده است. بسط توزیع‌های احتمال چند بعدی $\rho(\vec{r})$ داده می‌شود به صورت

$$S[\rho] = -\int_{\Delta} \rho(\vec{r}) \ln \rho(\vec{r}) d\vec{r} \quad (11-1)$$

که $\Delta \subseteq \mathbb{R}^d$ ، در سمت راست است.

شانون نام آنتروپی را برای این عبارات با اشاره به آن‌ها به عنوان یک اندازه‌گیری برای اطلاعات و عدم قطعیت بیان کرد. نمادهای آنتروپی، اطلاعات و عدم قطعیت درهم‌تنیده می‌باشند و نمی‌توانند شدیداً متفاوت از هم باشند. در مقابل، آنتروپی توسط شانون به عنوان عدم قطعیت در نتیجه یک آزمایش براساس یک توزیع احتمال داده می‌شود. پس آن یک اندازه‌گیری از ناآگاهی یا عدم اطلاعات مربوط به نتایج آزمایش است، که از عدم قطعیت به نظر می‌رسد، البته چون این توزیع احتمال ما را قادر به پیش‌بینی دقیقاً همان چیزی که خواهد بود نمی‌کند، بنابراین اصطلاحات آنتروپی و عدم

¹Hatree

قطعیت تا حدی مترادف می‌باشند. از طرف دیگر، عدم قطعیت البته برداشته می‌شود وقتی آزمایش انجام شود و در واقع خروجی شناخته می‌شود. این نشان می‌دهد که روش دیگر فهمیدن درباره‌ی آنروپی شانون به عنوان یک اندازه‌گیری از مقدار اطلاعاتی است که ما انتظار داریم تا با انجام یک آزمایش احتمالی بدست آوریم. بنابراین وقتی اطلاعات کم است (یعنی وقتی شخصی نمی‌تواند تقریباً نتایج یک آزمایش از توزیع احتمال داده شده را پیش‌بینی کند)، اطلاعاتی که توسط عملکرد آزمایش بدست می‌آید همچنین کوچک است. خلاصه، آنروپی شانون، اندازه‌گیری عدم قطعیت یک توزیع احتمال همچنین به عنوان یک اندازه‌گیری از اطلاعات است. معمولاً، رشد عدم قطعیت با افزایش آنروپی مشخص می‌شود، که به عنوان اطلاعات از دست رفته تلقی می‌شود.

۱-۳- اندازه‌گیری‌های موضعی: اطلاعات فیشر

مقادیر تعریف شده در بخش قبل یک ویژگی جهانی دارد، یعنی آن به تغییرات قوی در توزیع روی ناحیه در اندازه کوچک بسیار کم حساس هستند. پس آن در اندازه‌گیری‌های در دسترس مان مفید به نظر می‌رسد که می‌تواند قادر به تشخیص این تغییرات موضعی از تراکم به منظور توصیف بهتر سیستم در یک روش اطلاعات تئوری داشته باشد.

فرض کنید که ما این اطلاعات را در ذهن نگه داریم، همان‌طور که اینجا از مفهوم شانون استفاده می‌شود به اطلاعات، در مورد نتیجه یک آزمایش که توسط توزیع احتمال تحت کنترل است، اشاره دارد. این با مفهوم فنی اطلاعات در رابطه با استنباط آماری، به اصطلاح اطلاعات فیشر پارامتری [۱۶]، که توسط رونالد فیشر معرفی شد در تقابل است. اطلاعات فیشر پارامتری به اطلاعات درباره‌ی یک پارامتر ناشناخته در توزیع احتمال اشاره دارد که از نتایج مشاهده شده تخمین زده می‌شود.

اجازه دهید تا ما فرض کنیم که بخواهیم تا یک پارامتر θ را که N اندازه‌گیری در یک آزمایش انجام می‌دهد تخمین بزنیم. این اطلاعات، $\bar{y} = \{y_i\}_{i=1}^N$ ، از $y_i = \theta + x_i$ پیروی می‌کنند که $\bar{x} = \{x_i\}_{i=1}^N$ به مقادیر اختلال اضافه شده‌اند.

اختلال \bar{x} فرض شده است تا به پارامتر θ تحت اندازه‌گیری (θ) یک تعریفی دارد اما مقدار ناشناخته‌ای است) محدود باشد. این سیستم توسط قانون احتمال شرطی $p_\theta(\bar{y}|\theta) = p(y_1, y_2, \dots, y_N | \theta)$ و $\hat{\theta}(\bar{y}|\theta)$ مشخص شده است، به طور میانگین یک تخمین بهتری از θ همچنین با هر داده‌ی قابل مشاهده‌ای، $\hat{\theta}(\bar{y}) = \theta$ مقایسه می‌شود. در این حالت، ما می‌توانیم اطلاعات فیشر را تعریف کنیم به صورت

$$I = \int \left[\frac{\partial \ln p_\theta(\bar{y}|\theta)}{\partial \theta} \right] p_\theta(\bar{y}|\theta) d\bar{y} \quad (12-1)$$

که نتیجه نابرابری کوشی-شوارتز^۱ که به عنوان نابرابری کرامر-رائو^۲ [۳۳] شناخته شده را برآورده می‌کند.

$$\sigma^2 \times I \geq 1 \quad (13-1)$$

که σ^2 خطای مربع متوسط داده می‌شود به صورت

$$\sigma^2 = \int [\hat{\theta}(\bar{y}) - \theta]^2 p_\theta(\bar{y}) d\bar{y} \quad (14-1)$$

سپس اطلاعات فیشر پارامتری توانایی برای تخمین یک پارامتر را اندازه می‌گیرند، که آن حداقل خطای θ در برآوردی از چگالی احتمال معین $p(\bar{y}|\theta)$ را می‌دهد.

در حالت ویژه $N=1$ ، $p_\theta(\bar{y}|\theta) = p(y|\theta)$ و نوسان x به اندازه‌ی θ ثابت می‌ماند، $p_\theta(y|\theta) = p_x(y-\theta)$ با $x = y - \theta$ (یعنی جابه‌جایی یکسان) که به صورت زیر می‌باشد:

$$I = \int \left[\frac{\partial \ln p(x)}{\partial x} \right] p(x) dx \quad (15-1)$$

¹ Schwartz

²Cramér-Rao

که به اصطلاح اطلاعات فیشر خوانده می‌شود. این کمیت مقدار شیب توزیع احتمال را اندازه می‌گیرد که سیستم را توصیف می‌کند، به طوری که آن نشان دهنده‌ی بی‌نظمی چگالی است و سپس آن یک اندازه‌گیری از سیستم‌های اختلالی است.

اطلاعات فیشر یک بعدی می‌تواند برای چگالی‌های D بعدی $\rho(\vec{r})$ ، با $\vec{r} \in \Delta \subseteq \mathbb{R}^d$ ، در روش

زیر تعمیم داده می‌شود:

$$I[\rho] = \int_{\Delta} \left| \bar{\nabla}_D \ln \rho(\vec{r}) \right|^2 \rho(\vec{r}) d\vec{r} = \int_{\Delta} \frac{\left| \bar{\nabla}_D \rho(\vec{r}) \right|^2}{\rho(\vec{r})} d\vec{r} \quad (16-1)$$

که $\bar{\nabla}_D$ عملگر مشتق‌گیری D بعدی که داده می‌شود به صورت

$$\bar{\nabla}_D = \frac{\partial}{\partial r} \hat{r} + \frac{1}{r} \sum_{i=1}^{d-2} \frac{1}{\prod_{k=1}^{i-1} \sin \theta_k} \frac{\partial}{\partial \theta_i} \hat{\theta}_i + \frac{1}{r \prod_{i=1}^{d-2} \sin \theta_i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \hat{\varphi} \quad (17-1)$$

که نمادگذاری \hat{a} به بردار واحد اشاره می‌کند که به مختصات متناظر مربوط می‌شود.

این فرمول یک تابع محدب و همسانگرد معرفی می‌کند. علاوه بر این، حاصل ضرب نرده‌ای دو برابر می‌باشد که آن به چارچوب مرجع بستگی ندارد [۳۴]. رساله‌ی فریدن^۱ [۳۵] خواص اساسی اطلاعات فیشر را در جزئیات بیشتری مورد بحث قرار می‌دهد، که از شاخه‌های متفاوت فیزیک چون مکانیک کلاسیک و سیالات، الکترودینامیکی و ترمودینامیک، نظریه کوانتومی و نسبیت عام جمع‌آوری شده است، که در این نظریه مشهود می‌باشد. علاوه بر این، فریدن اطلاعات فیشر را با تعریفی از آنتروپی شانون، بولتزمن^۲ و کوکبک-لیبلر^۳ مقایسه کرد، که آن هم تلاش می‌کند تا اندازه‌گیری‌های نرده‌ای را از اطلاعات تشخیص دهد. مقایسه براحتی با آنتروپی شانون انجام شده

¹ Frieden

² Boltzmann

³ Kullback-Leibler

است. در مقابل آنتروپی شانون، که گسترش توزیع احتمال را اندازه می‌گیرد و به دلیل فرم تابع لگاریتمی آن یک کمیت جهانی است و اطلاعات فیشر نرمی توزیع را اندازه می‌گیرد و به دلیل فرم تابع گرادیانی آن خواص موضعی دارد.

در نهایت ملاحظه خواهیم کرد که آنتروپی شانون و اطلاعات فیشر متغیرهای اساسی دو روش حداکثر سازی می‌باشند: به ترتیب روش حداکثر آنتروپی [۳۶] و اصل تشدید اطلاعات فیزیکی [۳۵]. علاوه بر این هر دو اندازه‌گیری‌ها (۱) نسبتاً به کمیت‌های بنیادی و یا تجربی قابل اندازه‌گیری در سیستم‌های محدود الکترونی و نوکلئونی [۳۸،۳۷،۱۱،۱۰،۳] مربوط می‌شوند، (۲) آن‌ها برای مشخص کردن بیشتر پدیده‌های غیر خطی متمایز استفاده شده‌اند که در طیف‌های اتمی و ملکولی تحت میدان‌های خارجی [۳۹] مواجه شده‌اند و (۳) آن‌ها پایه‌های دو فرمول جایگزین ترمودینامیک لاسیک می‌باشند [۴۰].

این مفهوم ابتدا برای متغیرهای تصادفی یک بعدی در تخمین‌های آماری [۱۶] معرفی شده بود اما امروزه نقش افزایشی در میدان‌های متعدد [۳۵]، به ویژه، برای سیستم‌هایی با الکترون‌های زیاد، تاحدی به دلیل شباهت آن با انرژی‌های جنبشی [۴۱،۳۸،۳۵،۳] و ایتسکر [۴۲،۱۱] بازی می‌کند. اطلاعات فیشر برخلاف آنتروپی شانون، یک اندازه‌گیری موضعی از گسترش چگالی $\rho(\vec{r})$ می‌باشد چرا که آن تابع گرادیانی از $\rho(\vec{r})$ است. نتیجه مقدار بیشتر این کمیت در موضعیت چگالی است، میزان عدم قطعیت کوچک‌تر و بالاترین دقت در پیش‌بینی موضعیت (مکان) ذره می‌باشد. با این حال، آن یک رابطه ذاتی با آنتروپی شانون از طریق نابرابری برویج^۱ [۴۳،۳۲] دارد همچنین رابطه ساده‌ای با دقت (واریانس $V[\rho]$) تجربیات ناشی از نابرابری مشهور کرامر-رائو [۴۴،۴۳،۳۲]

$$I[\rho] \times V[\rho] \geq D^2 \quad (18-1)$$

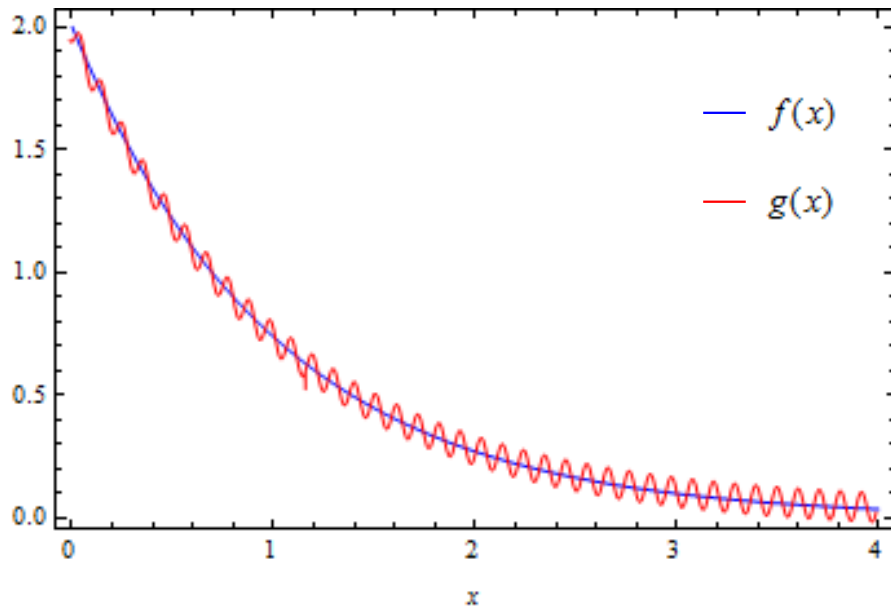
¹ Bruijn

علاوه بر این، از آن برای توصیف تغییرات معادلات کوانتومی حرکت [۳۵] و همچنین برای استخراج ترمودینامیک کلاسیک بدون نیاز به مفهوم معمول آنتروپی بولتزمن [۴۵] استفاده می‌شود. همچنین، اطلاعات فشر به عنوان یک ابزار همه‌کاره برای توصیف قوانین تکامل سیستم‌های فیزیکی [۴۶،۳۵]، برای توصیف دقیق رفتار سیستم‌های دینامیکی و برای مشخص کردن ایجاد سیگنال‌های پیچیده به وسیله این سیستم‌ها [۴۷] نشان داده می‌شود.

۴-۱- مقایسه بین اندازه‌گیری‌های اطلاعات

هدف از این قسمت متقابلاً مقایسه بین اندازه‌گیری‌های گسترده جهانی و موضعی است که در بالا ذکر شد. اجازه دهید به ما تا با تفاوت‌های روشن بین برخی اندازه‌گیری‌های جهانی (واریانس و آنتروپی شانون) و کمیت موضعی چون اطلاعات فشر با محاسبه آن‌ها به روش ساده شروع کنیم، اما متقابلاً توزیع‌های احتمالی با چگالی نمایی $f(x)$ به شکل e^{-ax} داده می‌شوند و یک چگالی تغییر شکل یافته مشابه توسط اغتشاش کوچک سینوسی، $g(x)$ ، با معادله $e^{-ax} + \varepsilon \sin^2 nx$ داده می‌شود.

آن‌ها در شکل (۱-۱) به تصویر کشیده شده‌اند، که ما توجه می‌کنیم که هر دو تابع‌های چگالی یک شکل جهانی مشابه دارند. نتایج در جدول (۱-۱) جمع‌آوری شده است. در آن‌جا ما مشاهده می‌کنیم که آنتروپی شانون برای دو تابع مقدار خیلی یکسانی دارد، که این به این معنی است که با توجه به این واقعیت که این اندازه‌گیری‌ها یک ویژگی جهانی دارند به دلیل این که آن‌ها چگالی‌های احتمال را به عنوان کل کمی می‌کنند، این به این دلیل است که ساختار تحلیلی آن‌ها برحسب چگالی شکلی توان مانند (واریانس) و لگاریتمی (آنتروپی شانون که در معادله (۱-۱) دیدید) دارند.



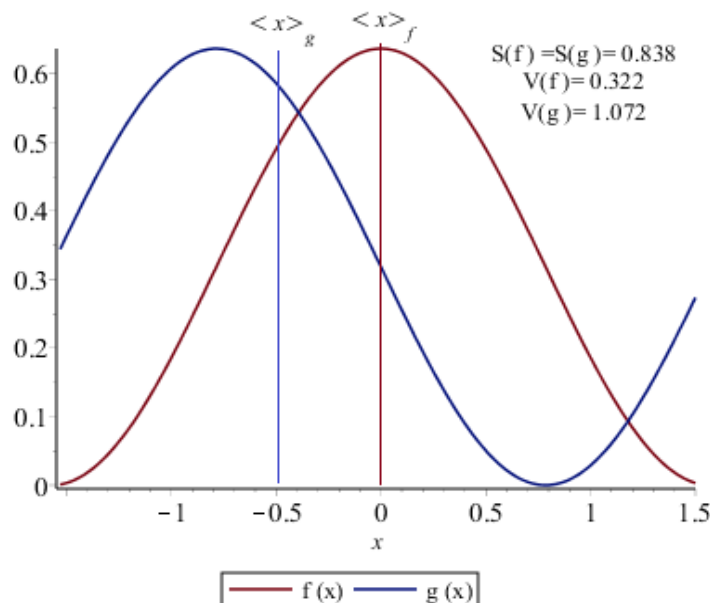
شکل (۱-۱) : نمایش $f(x) \sim e^{-ax}$ و $g(x) \sim e^{-ax} + \varepsilon \sin^2 nx$

جدول (۱-۱) : اندازه‌گیری اطلاعات تئوری $f(x)$ و $g(x)$

اطلاعات فیشر	واریانس	آنتروپی شانون	تابع
9.3×10^{-1}	0.07962	1.3485	f(x)
3.7×10^3	0.07966	1.3476	g(x)

در مقایسه اطلاعات فیشر مقادیر عددی خیلی متفاوتی برای این دو تابع دارد، برای $g(x)$ خیلی بزرگ‌تر از $f(x)$ می‌باشد. همان‌طور که می‌توانیم در شکل ببینیم، این با توجه به رفتار نوسانی بالا برای n های بزرگ که $g(x)$ داراست، می‌باشد. اطلاعات فیشر شکل گرادینانی دارد، که این اندازه‌گیری را خیلی حساس به تغییرات موضعی شدید از توزیع (همان‌طور که در مثال حاضر ملاحظه کردید) می‌سازد.

ثانیاً، اجازه دهید تا جفت دیگری از چگالی‌های احتمال را انتخاب کنیم که در آن می‌توان نقش‌های میان آنتروپی شانون و واریانس را به طور مناسب‌تری باز کرد.



شکل (۱-۲): نمایش $f(x) = \frac{2}{\pi} \cos^2(x)$ و $g(x) = \frac{2}{\pi} \cos^2\left(x + \frac{\pi}{4}\right)$

دو تابع چگالی متناهی متکی به بازه $x \in [-\pi/2, \pi/2]$ ، یعنی تابع کسینوسی آن‌ها برای این حالت واریانس متفاوتی دارند. همان‌طور که قبلاً در قسمت ۱-۱ ذکر کردیم، واریانس گسترش توزیع احتمال را با توجه به مرکز آن (در شکل نشان داده شده است) اندازه‌گیری می‌کند، بنابراین به مکان این مرکز بستگی دارد، $\langle x \rangle$ ، واریانس مقادیر متفاوتی برای هر توزیع دارد. همچنین ملاحظه می‌کنیم که اطلاعات شانون برای هر دو تابع مقادیر یکسانی دارد.

۵-۱- رابطه‌های عدم قطعیت هایزنبرگ، آنتروپی شانون و فیشر

در این قسمت با عدم قطعیت متناظر با جملات توانی و لگاریتمی که به آنتروپی شانون مربوط می‌شود و اطلاعات فیشر در سیستم‌های کوانتومی عمومی D بعدی سروکار داریم. این روابط در فرمول‌های ریاضی اصل عدم قطعیت مکانیک کوانتومی که یک ویژگی خاص مکانیک کوانتومی را توصیف می‌کنند و حالت‌هایی که محدود به انجام اندازه‌گیری‌هایی بر روی سیستم بدون از بین بردن

آن است، متفاوت هستند. علاوه بر این، از آن جایی که دو مختصه کانونی مشاهده‌پذیر در رابطه‌های عدم قطعیت درگیر هستند، در اینجا در نظر گرفته می‌شود که مکان و تکانه، جابه‌جا نمی‌شوند، هر دو مشاهده‌پذیر نمی‌توانند در هر حالت کوانتومی سیستم به طور دقیق تعیین شوند.

رابطه عدم قطعیت هایزنبرگ مانند در فضای مکان و تکانه در D بعد شناخته می‌شود [۴۸] که

فرم زیر دارد

$$\langle r^{D/\alpha} \rangle^\alpha \langle p^{D/\beta} \rangle^\beta \geq \alpha^\alpha \beta^\beta \frac{\Gamma^2\left(1 + \frac{d}{2}\right)}{\Gamma(1+\alpha)\Gamma(1+\beta)} e^{D-\alpha-\beta}, \quad \alpha, \beta > 0 \quad (19-1)$$

که با استفاده از روش‌های اندازه‌گیری اطلاعات به دست آورده می‌شوند. برای $\alpha = \beta = D/2$

این عبارت شکل نابرابری هایزنبرگ D بعدی را برآورده می‌کند

$$\langle r^2 \rangle \langle p^2 \rangle \geq \frac{D^2}{4} \quad (20-1)$$

که نشان می‌دهد که هر وقت مکان با دقت بیشتری تعیین می‌شود، تکانه با دقت کمتری تعیین شده است و برعکس. در واقع عدم قطعیت در فضای مکان و در فضای تکانه معمولاً به انحراف معیار در مجموعه‌ای از اندازه‌گیری‌های مکان و تکانه مربوط می‌شوند. تعریف عدم قطعیت زمانی مناسب است که توزیع تقریباً گاوسی باشد. اگر توزیع به طور قابل توجهی از توزیع گاوسی منحرف شود؛ یعنی بیش از یک پیک داشته باشد، انحراف معیار اندازه‌گیری خوبی از عدم قطعیت نیست [۴۹].

رابطه عدم قطعیت آنتروپی شانون در D بعد شکل زیر را دارد

$$S[\rho] + S[\gamma] \geq D(1 + \ln \pi) \quad (21-1)$$

که ابتدا توسط هیرچمن^۱ [۵۰] استخراج شد و بعداً به طور مستقل توسط بکنر، بیرولا و میسیلیسکی [۲] بهبود بخشیده شد. این عبارت نشان می‌دهد که عدم قطعیت کل در مکان و تکانه نمی‌تواند از مقدار بالای داده شده در معادله (۲۲-۱) کمتر باشد.

سرانجام، به ما فرصت دهید تا در مورد رابطه‌های عدم قطعیت که اطلاعات فیشر را درگیر می‌کند بحث کنیم. از سال ۱۹۵۰ [۵۱] نابرابری‌های استم^۲ معرفی شده‌اند:

$$I[\rho] \leq 4 \langle p^2 \rangle ; \quad I[\gamma] \leq 4 \langle r^2 \rangle \quad (22-1)$$

که اطلاعات فیشر مکان (تکانه) و مقدار چشمداشتی شعاعی تکانه (مکان) $\langle p^2 \rangle$ (به ترتیب $\langle r^2 \rangle$) را به هم مرتبط می‌کند. همان‌طور که در مرجع [۵۲] ملاحظه می‌کنید برای تعمیم آن به سیستم‌های الکترونی زیاد استفاده می‌شود. اخیراً اطلاعات فیشر بر مبنای رابطه عدم قطعیت یافت شده است [۱۶] به صورت

$$I[\rho] \times I[\gamma] \geq 4D^2 \quad (23-1)$$

که تنها برای یک بعدی [۵۳] معتبر نیست بلکه همچنین برای توابع موج حقیقی D بعدی سنجیده می‌شود.

¹ Hirschman

² Stem

فصل دوم

بررسی نظریه اطلاعات برای سیستم‌های غیرنسبیتی

سیستم هیدروژنی (ذره باردار منفی متحرک حول یک هسته باردار مثبت که نیروی الکترومغناطیسی آن را در مدار خود محصور ساخته است) با ابعاد استاندارد ($D=3$) و غیر استاندارد، نقش مهمی در فیزیک کوانتومی و شیمی دارد. چنین مدلی در انواع زیادی از سیستم‌های فیزیکی سه بعدی (اتم‌ها و یون‌های هیدروژنی، اتم‌های پاد ماده، اتم‌های ریدبرگ، یون‌ها، ملکول‌ها و غیره)، نانو ساختارهای نیمه هادی (چاه‌ها، سیم‌ها و نقاط کوانتومی) [۵۶،۵۵] و همچنین محاسبات کوانتومی (کیوبیت‌ها) [۵۸،۵۷] مطرح می‌شود. علاوه بر این موارد، حتی در کیهان‌شناسی کوانتومی [۵۴] و نظریه میدان کوانتومی [۶۱،۶۰] هم با این ساختار مواجه هستیم.

از نخستین روزهای مکانیک کوانتومی سیستم هیدروژنی به دلیل حل پذیری دقیق معادله شرودینگر متناظرش نقش مهمی در این نظریه بازی کرده است. علی‌رغم این قدمت، بسیاری از مباحث مرتبط با این مدل از مقادیر چشمداشتی شعاعی در فضای تکانه در این اواخر بررسی شده‌اند [۶۳،۶۲،۱۸].

نظریه اطلاعات سیستم‌های هیدروژنی D بعدی توصیفی از خواص میکروسکوپی و اسپکتروسکوپی آن‌ها را با استفاده از روش‌های تئوری اطلاعات شامل می‌شود. کمیت‌های فیزیکی چنین سیستم‌هایی ممکن است توسط اندازه‌گیری اطلاعات نظری، که توابعی از چگالی‌های احتمال مکان و تکانه هستند (مانند آنترپی شانون و اطلاعات فیشر)، بیان شوند.

در سال‌های اخیر، نوسانگرهای ناهماهنگ سه بعدی توجه قابل ملاحظه‌ای در شیمی فیزیک را به خود اختصاص داده‌اند. از طرفی پتانسیل مورس یکی از محبوب‌ترین مدل پتانسیلی است که در مطالعه طیف‌های ملکولی به کار می‌رود [۶۵،۶۴]. تابع موج متناظر در مبدأ ناپدید نمی‌شود و راه حل‌های دقیقی برای هر تکانه زاویه‌ای ($\ell \neq 0$) هنوز شناخته شده نیست. به همین دلیل چندین

پتانسیل دیگر به عنوان جایگزین استفاده و عمکرد آن‌ها با پتانسیل مورس مقایسه شده است. برای مثال، پتانسیل‌های کراتزر و شبه هماهنگ که جواب‌های دقیق دارند.

ما پتانسیل شبه هماهنگ را در نظر می‌گیریم. این پتانسیل در حوزه فیزیک بسیار مفید بوده و به طور گسترده‌ای برای توصیف برهم‌کنش برخی ملکول‌های دو اتمی استفاده شده است. سیج^۱ سطوح انرژی و توابع موج یک مولکول دو اتمی چرخشی را با استفاده از مدل پتانسیل سه پارامتری که پتانسیل شبه گاوسی (شبه هماهنگ) نامیده می‌شود، بررسی کرد و متوجه شد که پتانسیل رفتار منطقی‌ای برای هر دو جداسازی‌های بین هسته‌ای کوچک و بزرگ دارد.

پتانسیل شبه هماهنگ علاوه بر سیستم‌های دو اتمی [۶۷،۶۶]، در بررسی ارتعاشات هسته‌ای [۶۸] نیز مفید بوده است.

در این فصل در ابتدا معادله شرودینگر را برای سیستم‌های هیدروژنی (پتانسیل کولنی) و پتانسیل شبه هماهنگ در سه بعد حل می‌نماییم. سپس، با استفاده از تابع موج به دست آمده، تبدیل فوریه تابع موج را به دست می‌آوریم و با استفاده از این توابع موج در فضاهای مکان و تکانه، چگالی‌های احتمال این دو را محاسبه می‌نماییم. در قسمت ۳، ابتدا در قسمت اول آنتروپی اطلاعات شانون و در قسمت بعدی آنتروپی اطلاعات فیشر را محاسبه می‌نماییم. سپس در قسمت ۴، در مورد روابط عدم قطعیت مربوطه بحث می‌نماییم. در نهایت، برخی نتایج داده می‌شود.

۲-۲- حل معادلات در سیستم‌های غیرنسبیتی در دو فضای مکان و تکانه

۲-۲-۱- بررسی سیستم‌های هیدروژنی

در این قسمت، ابتدا چگالی‌های احتمال سیستم‌های هیدروژنی در فضاهای مکان و تکانه در سه بعد را داریم و سپس روش نظری محاسبه اطلاعات شانون و فیشر برای این چگالی‌ها را مطرح می‌کنیم.

¹ Sage

۲-۱-۱-۲-۱- چگالی احتمال در فضای مکان

چگالی احتمال الکترونی حالت‌های ثابت سیستم هیدروژنی سه بعدی توسط $\rho(\vec{r}) = |\Psi(\vec{r})|^2$

داده شده است، که تابع موج $\Psi(\vec{r})$ جواب فیزیکی معادله شرودینگر مستقل از زمان برای سیستم هیدروژنی سه بعدی زیر است:

$$\left\{ -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{Z}{r} \right\} \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \quad (1-2)$$

ما در سراسر این فصل از واحد اتمی ($\hbar = Z = m_e = 1$) استفاده می‌کنیم مگر مواردی که صریحا ذکر شود. علاوه بر این، معادله را در دستگاه کروی بررسی می‌کنیم و بنابراین تابع موج مربوطه به صورت زیر بیان می‌شود

$$\Psi_{n,\ell,\mu}(\vec{r}) = R_{n,\ell}(r)Y_{\ell,\mu}(\Omega) \quad (2-2)$$

با جایگذاری قسمت شعاعی عملگر گرادیان ∇^2 در سه بعد، می‌توان معادله شرودینگر را به فرم زیر نوشت

$$\left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{\Lambda^2}{r^2} \right) - \frac{1}{r} \right\} \psi_{n,\ell,\mu} = E_{n,\ell,\mu} \psi_{n,\ell,\mu} \quad (3-2)$$

که Λ^2 قسمت غیر شعاعی عملگر می‌باشد. در اینجا n عدد کوانتومی اصلی، ℓ عدد کوانتومی زاویه‌ای و μ اعداد صحیحی هستند. ℓ, μ به متغیرهای زاویه‌ای $\Omega \equiv (\theta, \phi)$ مربوط می‌شوند که برای قسمت غیر شعاعی معادله شرودینگر داریم $0 \leq \theta \leq \pi$ و $0 \leq \phi \leq 2\pi$.

$$\Lambda^2 Y_{\ell,\mu}(\Omega) = \ell(\ell+1)Y_{\ell,\mu}(\Omega) \quad (4-2)$$

بنابراین معادله شرودینگر برای سیستم هیدروژنی سه بعدی به فرم زیر می‌باشد

$$\left\{ \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + \frac{2}{r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right\} R_{n,\ell}(r) = E_{n,\ell} R_{n,\ell}(r) \quad (5-2)$$

با تغییر متغیر

$$\rho = \frac{r}{\lambda} \quad (6-2)$$

قسمت شعاعی معادله شرودینگر به فرم زیر بازنویسی می‌شود

$$\left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + \frac{2\lambda}{\rho} + 2E\lambda^2 \right\} R_{n,\ell}(\rho) = 0 \quad (7-2)$$

اکنون با معرفی

$$\lambda^2 = -\frac{1}{8E} \quad E < 0 ; \quad k = \frac{1}{2\lambda} \quad (8-2)$$

می‌توان معادله را به شکل ساده زیر نوشت

$$\left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \frac{-\rho^2 + 4k\rho - 4\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right\} R_{n,\ell}(\rho) = 0 \quad (9-2)$$

معادله فوق به سادگی با استفاده از روش نیکوورف-واروف [۶۹] قابل حل می‌باشد. تابع موج کل

برای این سیستم عبارتست از

$$\psi_{n,\ell,\mu}(\vec{r}) = N_{n,\ell} e^{-\frac{r}{2\lambda}} \left(\frac{r}{\lambda} \right)^\ell L_{n-\ell-1}^{2\ell+1} \left(\frac{r}{\lambda} \right) Y_{\ell,\mu}(\Omega) \quad (10-2)$$

و ثابت بهنجارش به صورت زیر داده می‌شود

$$N_{n,\ell} = \lambda^{-\frac{3}{2}} \left(\frac{(n-\ell-1)!}{2n(n+\ell)!} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (11-2)$$

و انرژی [۷۰]

$$E = -\frac{1}{2\eta^2}, \quad \lambda = \frac{\eta}{2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (12-2)$$

است. از این رو، چگالی احتمال مربوطه به شکل زیر به دست می‌آید

$$\rho(\vec{r}) = |\Psi_{n,\ell,\mu}(\vec{r})|^2 = R_{n\ell}^2 |Y_{\ell,\mu}(\Omega)|^2 \quad (13-2)$$

این عبارت برای سیستم‌های هیدروژنی با $Z = 1$ به صورت زیر است

$$\rho(\vec{r}) = N_{n,\ell}^2 e^{-\frac{r}{\lambda}} \left(\frac{r}{\lambda}\right)^{2\ell} \left[L_{n-\ell-1}^{2\ell+1} \left(\frac{r}{\lambda}\right) \right]^2 |Y_{\ell,\mu}(\Omega)|^2 \quad (14-2)$$

۲-۱-۲-۲- چگالی احتمال در فضای تکانه

از طرف دیگر، چگالی احتمال در فضای تکانه $\gamma(\vec{p})$ با مربع تبدیل فوریه سه بعدی ویژه تابع

فضای مکان به دست می‌آید، یعنی تابع موج تکانه $[\gamma_2, \gamma_1]$

$$\bar{\psi}_{n,\ell,\mu}(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \psi_{n,\ell,\mu}(\vec{r}) e^{-ip \cdot r} r^2 dr d\Omega \quad (15-2)$$

که از روش تعمیم یافته فوک [۷۰] استفاده می‌کنیم، بنابراین تابع موج در فضای تکانه برای

حالت پایه ($n=1, \ell=0$) به شکل زیر می‌باشد

$$\bar{\psi}_{n,\ell,\mu}(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \left(\frac{p_0^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty r^2 e^{-rp_0} dr \underbrace{\int_0^\pi e^{-ipr \cos \theta} \sin \theta d\theta}_{(1)} \quad (16-2)$$

که مقدار انتگرال عبارت (۱) در معادله به فرم زیر حاصل می‌شود

$$\int_0^\pi e^{-ipr \cos \theta} \sin \theta d\theta = \frac{1}{ipr} (e^{ipr} - e^{-ipr}) \quad (17-2)$$

در این حالت با جایگذاری معادله (۱۷-۲) در عبارت (۱۶-۲)، می‌توان نوشت

$$\bar{\Psi}_{n,\ell,\mu}(\vec{p}) = \frac{-ip_0^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{2\pi p}} \int_0^\infty (re^{-(p_0-ip)r} - re^{-(p_0+ip)r}) dr \quad (18-2)$$

با استفاده از

$$\int_0^\infty e^{-\alpha r} r^n dr = \frac{n!}{\alpha^{n+1}} \quad (19-2)$$

تابع موج کل در فضای تکانه برای حالت پایه مطابق زیر به دست می‌آید

$$\bar{\Psi}_{n,\ell,\mu}(\vec{p}) = \frac{4p_0^{5/2}}{2^{1/2} \pi (p_0^2 + p^2)^2} \quad (20-2)$$

که چگالی احتمال متناظر با این تابع موج در فضای تکانه به صورت زیر به دست می‌آید

$$\gamma(\vec{p}) = |\bar{\Psi}_{n,\ell,\mu}(\vec{p})|^2 = \frac{8(p_0)^5}{\pi^2 (p_0^2 + p^2)^4} \quad (21-2)$$

که $p_0^2 = -2E_n = \eta^{-2}$ می‌باشد.

به بیانی دیگر (اما معادل) برای توابع موج در فضای مکان و تکانه اتم هیدروژن D بعدی در

جاهای دیگر [۷۴، ۷۳] منتشر شده است.

۲-۲-۲- معادله شرودینگر سه بعدی برای پتانسیل شبه هماهنگ

۱-۲-۲- تابع موج در فضای مکان

پتانسیل شبه هماهنگ در فرم استاندارد به صورت نوشته زیر می‌شود

$$V(r) = Ar^2 + \frac{B}{r^2} + C \quad (22-2)$$

این پتانسیل به پتانسیل‌های زیر قابل تبدیل است:

* نوسانگر هماهنگ همسانگرد به علاوه پتانسیل معکوس درجه دوم

$$V(r) = \mu\omega^2 \frac{r^2}{2} + \frac{g}{r^2} \quad (23-2)$$

در اینجا $A = \mu\omega^2$ ، $B = g$ و $C = 0$.

*پتانسیل شبه هماهنگ

$$V(r) = D_e \left(\frac{r}{r_e} - \frac{r_e}{r} \right)^2 \quad (24-2)$$

که D_e انرژی جداسازی مربوطه بین دو اتم در یک جامد و r_e فاصله تعادل بین ملکولی است.

$$C = -2D_e \text{ و } B = D_e r_e, A = \frac{D_e}{r_e^2}$$

معادله شرودینگر سه بعدی برای این پتانسیل به صورت زیر نوشته می شود

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + \frac{D_e}{r_e^2} r^2 + \frac{D_e}{r^2} r_e^2 - 2D_e \right\} \psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi) \quad (25-2)$$

با فرض

$$\psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,\ell}(r) Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) \quad (26-2)$$

آنگاه معادله (2,25) به دو معادله دیفرانسیل جدا [75] تبدیل می شود ($\hbar = \mu = 1$)

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \left[2E - 2 \left(\frac{D_e r^2}{r_e^2} + \frac{D_e r_e^2}{r^2} - 2D_e \right) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] \right\} R_{n,\ell}(r) = 0 \quad (27-2)$$

$$L^2 Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) = \ell(\ell+1) Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) \quad (28-2)$$

که $\ell = 0, 1, 2, \dots$ ، اعداد تکانه زاویه ای مداری کوانتومی، $n = 1, 2, 3, \dots$ ، عدد اصلی کوانتومی، μ

جرم کاهش یافته و \hbar ثابت پلانک تقسیم بر 2π و E ویژه مقادیر انرژی است. با $K^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$ ، معادله

(27-2) را می توان به فرم زیر نوشت

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \left[K^2 - \frac{2\mu D_e r^2}{r_e^2} - \frac{2\mu D_e r_e^2}{r^2} + \frac{4\mu D_e}{\hbar^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] \right\} R_{n,\ell}(r) = 0 \quad (29-2)$$

که

$$\gamma_\ell = \frac{1}{2} \left[-1 + \sqrt{(2\ell+1)^2 + \frac{8\mu D_e r_e^2}{\hbar^2}} \right] \quad (30-2)$$

جواب های معادله (29-2) بر حسب توابع فوق هندسی یا لاگر هستند [74]:

$$R_{n,\ell}(r) = N_{n,\ell} r^{\gamma_\ell} e^{-\lambda r^2} L_n^{\gamma_\ell + \frac{1}{2}}(2\lambda r^2) \quad (31-2)$$

که

$$\lambda = \sqrt{\frac{D_e}{2r_e^2}} \quad (32-2)$$

$L_n^k(x)$ توابع لاگر می باشند و $N_{n,\ell}$ ثابت بهنجارش است که از شرط بهنجارش

$$\int_0^\infty R_{n,\ell}(r) R_{n',\ell}(r) dr = \delta_{n,n'} \quad (33-2)$$

به صورت زیر تعیین می شود

$$N_{n,\ell} = \left[\frac{2(2\lambda^2)^{\frac{1}{4}(2\gamma_\ell+3)} n!}{\Gamma\left(n + \gamma_\ell + \frac{3}{2}\right)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (34-2)$$

انرژی حالت های مقید برای پتانسیل شبه هماهنگ به صورت زیر به دست می آید

$$E_{n,\ell} = (4n + 2\gamma_\ell + 3) \sqrt{\frac{\hbar^2 D_e}{2\mu r_e^2}} - 2D_e \quad (35-2)$$

که در آن γ_ℓ ، در معادله (30-2) بیان شده است.

۲-۲-۲-۲- تابع موج در فضای تکانه

تابع موج در معادله (۲-۳۰) تابع موج فضای مکان است. تابع موج فضای تکانه به صورت زیر به

دست می‌آید [۷۶]

$$R_{n,\ell}(p) = \left[\frac{2n!(2\lambda^2)^{\frac{\gamma_\ell - 3}{2}}}{\Gamma\left(n + \gamma_\ell + \frac{3}{2}\right)} \right]^{\frac{1}{2}} p^{\gamma_\ell} e^{-\frac{p^2}{\lambda}} L_n^{\gamma_\ell + \frac{1}{2}}\left(\frac{p^2}{2\lambda}\right) \quad (۲-۳۶)$$

بنابراین چگالی‌های احتمال در فضاهای مکان و تکانه به ترتیب عبارتند از

$$\rho(r) = N_{n,\ell}^2 r^{2\gamma_\ell} e^{-2\lambda r^2} \left[L_n^{\gamma_\ell + \frac{1}{2}}(2\lambda r^2) \right]^2 \quad (۲-۳۷)$$

و

$$\gamma(p) = \frac{2n!(2\lambda)^{-\gamma_\ell - \frac{3}{2}}}{\Gamma\left(n + \gamma_\ell + \frac{3}{2}\right)} p^{2\gamma_\ell} e^{-2\frac{p^2}{\lambda}} \left[L_n^{\gamma_\ell + \frac{1}{2}}\left(\frac{p^2}{2\lambda}\right) \right]^2 \quad (۲-۳۸)$$

در این فصل، آنتروپی‌های اطلاعات فیشر و شانون برای پتانسیل شبه هماهنگ به دست آمده

است.

۲-۳- محاسبه آنتروپی اطلاعات شانون برای سیستم‌های هیدروژن گونه و شبه هماهنگ

۲-۳-۱- آنتروپی شانون در فضای مکان برای سیستم هیدروژنی

بهتر است اندازه‌ی جهانی یا بخش عمده‌ای از چگالی احتمال مکان برای اتم‌های هیدروژن سه

بعدی به وسیله آنتروپی شانون S_ρ معادله (۱-۱۱) اندازه‌گیری شود. از معادلات (۱-۱۱) و (۲-۳۰)

آنتروپی شانون [۷۷] را برای حالت (n, ℓ, μ) در فضای مکان می‌توان نوشت

$$S_\rho = S(R_{n,\ell}) + S(Y_{\ell,\mu}) \quad (۲-۳۹)$$

که

$$S(R_{n,\ell}) \equiv - \int_0^\infty r^2 R_{n,\ell}^2(r) \ln R_{n,\ell}^2(r) dr \quad (40-2)$$

قسمت شعاعی آنتروپی شانون است و

$$S(Y_{\ell,\mu}) \equiv - \int |Y_{\ell,\mu}(\Omega)|^2 \ln |Y_{\ell,\mu}(\Omega)|^2 d\Omega \quad (41-2)$$

قسمت زاویه‌ای آن را می‌دهد. این مقادیر به دلیل ویژگی تقارن کروی پتانسیل کولنی به عدد کوانتومی مغناطیسی (آنتروپی شعاعی) یا عدد کوانتومی اصلی (آنتروپی زاویه‌ای) بستگی ندارد. بنابراین، برای قسمت شعاعی آنتروپی شانون داده شده در فضای مکان در معادله (40-2) می‌توان نوشت:

$$S(R_{n,\ell}) = - \ln N_{n,\ell}^2 + \lambda^3 N_{n,\ell}^2 (J_1 - 2\ell J_2 - J_3) \quad (42-2)$$

که جملات $J_i, i=1,2,3$ ، مقادیر زیر را دارند

$$J_1 = \frac{(n+\ell+2)!}{(n-\ell-1)!} + 4 \frac{(n+\ell+1)!}{(n-\ell-2)!} + \frac{(n+\ell)!}{(n-\ell-3)!} \quad (43a-2)$$

$$J_2 = \int_0^\infty t^{\alpha+1} e^{-t} \ln t [L_k^\alpha(t)]^2 dt \quad (43b-2)$$

$$J_3 = \int_0^\infty t^{\alpha+1} e^{-t} [L_k^\alpha(t)]^2 \ln [L_k^\alpha(t)]^2 dt \quad (43c-2)$$

که در آن $k = n - \ell - 1$ و $\alpha = 2\ell + 1$ می‌باشد.

اگرچه انتگرال‌های آنتروپی مرتبط با چند جمله‌ای‌های لاگر می‌توانند کاملاً دقیق به صورت عددی [78] حل شوند، حل تحلیلی آن‌ها به جز برای حالت‌های خاص هنوز ممکن نیست. به عنوان مثال آنتروپی شانون در فضای مکان برای حالت پایه ($n=1, \ell=0$) برای قسمت‌های شعاعی و زاویه‌ای مطابق زیر محاسبه می‌شوند:

$$S(R_{1,0}) = 3 \ln \lambda + \ln 2 + 3 \quad (44-2)$$

$$S(Y_{0,0}) = \ln(4\pi) \quad (45-2)$$

که آنتروپی شانون کل در فضای مکان با توجه به معادله (۳۹-۲) از جمع جبری معادلات (۲-۲) و (۴۴) و (۴۵-۲) به دست می‌آید و فرم صریح آن عبارتست از

$$S_p(\vec{r}) = \ln(\pi\lambda^3) + 3 \ln 2 + 3 \quad (46-2)$$

بنابراین آنتروپی را برای حالت‌های مختلف با مقادیر مختلف انرژی می‌توان محاسبه نمود.

مقدار صریح برای آنتروپی زاویه‌ای $S(Y_{\ell,\mu})$ داده شده در معادله (۳۱-۲) به ازای مقدار (ℓ, μ) شناخته شده نیست چرا که محاسبه آنتروپی شانون در حضور چند جمله‌ای‌های فوق هندسی کاری بسیار سخت است و جز برای برخی موارد خاص، و علی‌رغم تلاش‌های اخیر، انجام نشده است.

۲-۳-۲- آنتروپی شانون در فضای تکانه

در روشی مشابه، با استفاده از چگالی احتمال فضای تکانه $\gamma(\vec{p})$ (معادله (۳۱-۲))، می‌توان حالت جهانی سه بعدی مسأله هیدروژن گونه را (n, ℓ, μ) را در فضای تکانه پیدا کرد. به بیان دیگر، با استفاده از آنتروپی شانون در فضای تکانه

$$S_\gamma = - \int \gamma(\vec{p}) \ln \gamma(\vec{p}) d^3 \vec{p} = S(M_{n,\ell}) + S(Y_{\ell,\mu}) \quad (47-2)$$

آنتروپی حالت پایه در فضای تکانه با توجه به معادله (۴۷-۲) به صورت زیر محاسبه می‌شود

$$S_\gamma = 2 \ln 2 - 3 \ln \lambda + 2 \ln \pi - \frac{10}{3} \quad (48-2)$$

۲-۳-۳- آنتروپی اطلاعات شانون برای پتانسیل شبه هماهنگ

با استفاده از معادله (۱۱-۱)، آنتروپی اطلاعات شانون در فضای مکان:

$$S[\rho] = -4\pi \int_0^{\infty} r^2 \rho(r) \ln \rho(r) dr \quad (49-2)$$

به شکل زیر به دست می‌آید [۷۶،۲۲]

$$S_{n,\ell}[\rho] = -\ln \left(\frac{2n!}{\Gamma\left(n + \gamma_\ell + \frac{3}{2}\right)} \right) + \frac{3}{2}(1 - \ln(2\lambda)) + 2n + \gamma_\ell$$

$$- \frac{n!}{\Gamma\left(n + \gamma_\ell + \frac{3}{2}\right)} (I_1 + I_2) - I_3 \quad (50-2)$$

که در آن

$$I_1 = \int_0^{\infty} t^{\gamma_\ell - 1 + \frac{3}{2}} e^{-t} \ln t^{\gamma_\ell} \left[L_n^{\gamma_\ell - 1 + \frac{3}{2}}(t) \right]^2 dt \quad (51a-2)$$

$$I_2 = \int_0^{\infty} t^{\gamma_\ell - 1 + \frac{3}{2}} e^{-t} \left[L_n^{\gamma_\ell - 1 + \frac{3}{2}}(t) \right]^2 \ln \left[L_n^{\gamma_\ell - 1 + \frac{3}{2}}(t) \right]^2 dt \quad (51b-2)$$

$$I_3 = \int |Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)|^2 \ln |Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi \quad (51c-2)$$

مطابق با معادله (۵۰-۲)، با جایگذاری انتگرال‌های I_2 و I_3 ، داریم

$$S_{n,\ell}[\rho] = 2n + \gamma_\ell + \frac{3}{2} - \log \left(\frac{2n!}{\Gamma\left(n + \gamma_\ell + \frac{3}{2}\right)} \right)$$

$$- \gamma_\ell \psi \left(n + \gamma_\ell + \frac{3}{2} \right) - \frac{3}{2} \log(2\lambda) + E \left[\tilde{L}_n^{\gamma_\ell + \frac{1}{2}} \right] \quad (52-2)$$

انتگرال آنتروپی چند جمله‌ای‌های متعامد لاگری است، که در یک بعد می‌تواند به صورت زیر

نوشته شود [۲۲]

$$E \left[\tilde{L}_n^{\gamma_\ell + \frac{1}{2}} \right] = \int_0^\infty t^{\gamma_\ell + \frac{1}{2}} e^{-t} \left[\tilde{L}_n^{\gamma_\ell + \frac{1}{2}}(t) \right]^2 \ln \left[\tilde{L}_n^{\gamma_\ell + \frac{1}{2}}(t) \right] dt \quad (53-2)$$

$$= -2n + \left(\gamma_\ell + \frac{3}{2} \right) \log n - \left(\gamma_\ell + \frac{1}{2} \right) - 2 + \log(2\pi) + o(1)$$

آنتروپی اطلاعات شانون فضای تکانه

$$S[\gamma] = -4\pi \int_0^\infty p^2 \gamma(p) \log \gamma(p) dp \quad (54-2)$$

به صورت زیر به دست می‌آید [۷۶،۲۲]

$$S_{n,\ell}[\gamma] = -\ln \left(\frac{2n!}{\Gamma\left(n + \gamma_\ell + \frac{3}{2}\right)} \right) + \frac{3}{2}(1 + \ln(2\lambda)) \quad (55-2)$$

$$+ 2n + \gamma_\ell - \frac{n!}{\Gamma\left(n + \gamma_\ell + \frac{3}{2}\right)} (I_1 + I_2) - I_3$$

مطابق با معادله (۵۵-۲)، با جایگذاری انتگرال‌های I_2 و I_3 ، داریم

$$S_{n,\ell}[\gamma] = 2n + \gamma_\ell + \frac{3}{2} - \log \left(\frac{2n!}{\Gamma\left(n + \gamma_\ell + \frac{3}{2}\right)} \right) \quad (56-2)$$

$$- \gamma_\ell \psi \left(n + \gamma_\ell + \frac{3}{2} \right) + \frac{3}{2} \log(2\lambda) + E \left[\tilde{L}_n^{\gamma_\ell + \frac{1}{2}} \right]$$

جدول (۲-۲) شامل مقادیر عددی آنتروپی شانون در فضای مکان براساس معادله (۵۲-۲) می‌باشد. مشاهده می‌کنیم که آنتروپی شانون در فضای مکان با افزایش n افزایش می‌یابد. مقادیر عددی آنتروپی شانون در فضای تکانه در جدول (۳-۲) نشان داده شده است. تغییرات آنتروپی شانون با ℓ در شکل (۱-۲) برای ملکول‌های دو اتمی نشان داده شده است. مشاهده می‌کنیم که آنتروپی شانون $S[\rho]$ با افزایش ℓ کاهش می‌یابد و برای ℓ ‌های بزرگ، به صفر میل می‌کند.

جدول (۱-۲) ثابت‌های طیفی برخی ملکول‌های دو اتمی [۲۱]

molecular state	$D_e(eV)$	$r_e(A^0)$
$Na_2 : X^1\Sigma_g^+$	0.746707167	3.079
$Cl_2 : X^1\Sigma_g^+$	2.513903386	1.987
$O_2^+ : X^2I_g$	6.780447246	1.116
$N_2^+ : X^2\Sigma_g^+$	8.848131541	1.116
$NO^+ : X^1\Sigma^+$	10.99665353	1.063

جدول (۲-۲) آنتروپی اطلاعات شانون برای پتانسیل شبه هماهنگ برای برخی ملکول‌های دو اتمی با $\ell = 0$ در

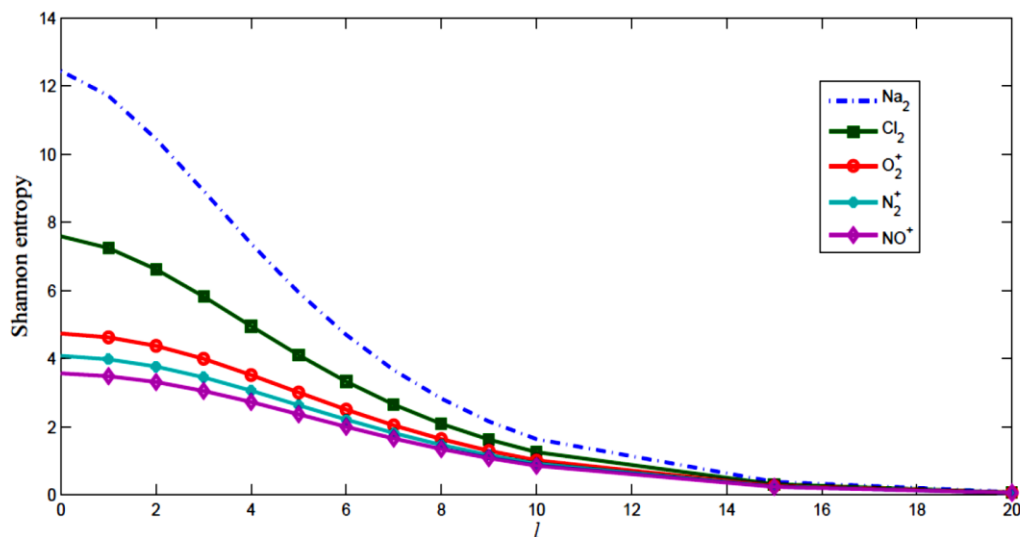
فضای مکان [۲۱].

n	$S[\rho](Na_2)$	$S[\rho](Cl_2)$	$S[\rho](O_2^+)$	$S[\rho](N_2^+)$	$S[\rho](NO^+)$
0	12.4333	7.58285	4.73017	4.07721	3.56137
1	13.5554	8.41921	5.69732	4.83464	4.23386
2	14.3281	8.99397	6.36283	5.35458	4.69475
3	14.9377	9.44880	6.88877	5.76628	5.05992
4	15.4466	9.83007	7.32886	6.11179	5.36671
5	15.8856	10.1602	7.70925	6.41130	5.63298
6	16.2725	10.4522	8.04514	6.67647	5.86899
7	16.6188	10.7145	8.34633	6.91483	6.08136
8	16.9326	10.9527	8.61959	7.13156	6.27465
9	17.2196	11.1711	8.86983	7.33042	6.45214
10	17.4841	11.3729	9.10074	7.51422	6.61633

جدول (۳-۲) آنتروپی اطلاعات شانون برای پتانسیل شبه هماهنگ برای برخی ملکول‌های دو اتمی با $\ell = 0$ در

فضای تکانه [۲۱].

n	$S[\gamma](Na_2)$	$S[\gamma](Cl_2)$	$S[\gamma](O_2^+)$	$S[\gamma](N_2^+)$	$S[\gamma](NO^+)$
0	0.316484	0.257021	0.438126	0.269701	0.214067
1	0.581714	0.632060	1.066130	0.737227	0.619039
2	0.699930	1.006880	1.698210	1.287190	1.130940
3	0.677853	1.314390	2.237290	1.826600	1.666120
4	0.557843	1.534280	2.656090	2.304790	2.169300
5	0.382078	1.671710	2.962040	2.703120	2.612640
6	0.181821	1.741740	3.174780	3.021470	2.987110
7	-0.022832	1.760900	3.315330	3.268260	3.294360
8	-0.220225	1.743700	3.401900	3.454700	3.541080
9	-0.404298	1.701700	3.448900	3.591960	3.735720
10	-0.572438	1.643560	3.467290	3.689930	3.886720



شکل (۳-۱): تغییر آنتروپی اطلاعات شانون در فضای مکان $(S[\rho])$ با ℓ برای Na_2, Cl_2, O_2^+, N_2^+ و NO^+

[۲۱].

۴-۲- محاسبه اطلاعات فیشر برای سیستم‌های غیرنسبیتی هیدروژن گونه سه بعدی و شبه

همانگ

۴-۲-۱- اطلاعات فیشر در فضای مکان برای سیستم هیدروژنی

برخلاف گسترش اندازه‌گیری چگالی احتمال در فضای مکان $\rho(\vec{r})$ که قبلاً بحث شد، اطلاعات فیشر، که در معادله (۱۶-۱) داده شده، تابعی از گرادیان $\rho(\vec{r})$ است و بنابراین خاصیت موضعی دارد. این کمیت همچنین می‌تواند به صورت زیر بیان شود

$$I_\rho(\vec{r}) = 4 \int_{R^3} [\vec{\nabla} \psi_{n,\ell,\mu}(\vec{r})]^2 d^3r \quad (۵۷-۲)$$

از معادله‌های (۱۷-۱)، (۲-۲) و (۵۷-۲) داریم [۷۱]

$$I_\rho = I(R_{n,\ell}) + \langle r^{-2} \rangle I(Y_{\ell,\mu}) \quad (۵۸-۲)$$

که قسمت شعاعی عبارتست از

$$I(R_{n,\ell}) = 4 \int_0^\infty \left[\frac{d}{dr} R_{n\ell}(r) \right]^2 r^2 dr \quad (۵۹-۲)$$

در اینجا برای تساوی دوم از معادله (۱۷-۱) در سه بعد استفاده می‌کنیم. قسمت زاویه‌ای

$$I(Y_{\ell,\mu}) = 4 \int_\Omega \left[\frac{1}{\prod_{k=0}^{\ell-1} \sin \theta_k} \frac{\partial}{\partial \theta} Y_{\ell,\mu}(\theta, 0) \right]^2 d\Omega = 4\ell(\ell+1) - 2\mu(2\ell+1) \quad (۶۰-۲)$$

آنترپی اطلاعات فیشر را برای حالت پایه ($n=1, \ell=0$) در فضای مکان محاسبه می‌کنیم و

مقدار پارامترها در معادلات (۵۸-۲)، (۵۹-۲) و (۶۰-۲) به صورت زیر به دست می‌آیند:

$$\langle r^{-2} \rangle = \frac{1}{2\lambda^2} \quad (۶۱a-۲)$$

$$I(Y_{0,0}) = 0 \quad (۶۱b-۲)$$

$$I(R_{1,0}(r)) = \frac{1}{4\lambda^3} \quad (۶۱c-۲)$$

با جایگذاری روابط بالا در معادله (۵۹-۲)، اطلاعات فیشر سیستم‌های هیدروژن گونه سه بعدی در فضای مکان برابر می‌شود با [۷۱]

$$I_\rho = \frac{1}{4\lambda^3} \quad (۶۲-۲)$$

۲-۴-۲- اطلاعات فیشر در فضای تکانه

می‌دانیم

$$I_\gamma = I(M_{n,\ell}) + \langle p^{-2} \rangle I(Y_{\ell,\mu}) \quad (۶۳-۲)$$

که قسمت شعاعی برای حالت پایه عبارتست از [۷۱]

$$I(M_{n,\ell}) = 4 \int_0^\infty \left[\frac{d}{dp} M_{n,\ell}(p) \right]^2 p^2 dp = \frac{2\pi}{p_0} = 4\pi\lambda \quad (۶۴-۲)$$

و قسمت زاویه‌ای $I(Y_{\ell,\mu})$ که از معادله (۶۰-۲) بیان شده است. با استفاده از معادلات (۶۰-۲)

و (۶۴-۲) و نیز این که

$$\langle p^{-2} \rangle = \int_0^\infty p^{-2} M_{n,\ell}^2(p) p^2 d^3 p = \frac{5}{2} \pi \frac{1}{p_0^3} = 20\pi\lambda^3 \quad (۶۵-۲)$$

اطلاعات فیشر در فضای تکانه و برای حالت پایه ($n=1, \ell=0$) برابر است با

$$I_\gamma = 4\pi\lambda \quad (۶۶-۲)$$

۲-۴-۳- آنتروپی اطلاعات فیشر برای پتانسیل شبه هماهنگ

از معادله (۱۶-۲)، آنتروپی اطلاعات فیشر در فضای مکان را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$I[\rho] = 4\pi \int_0^{\infty} \frac{r^2}{\rho(r)} \left(\frac{\partial \rho}{\partial r} \right)^2 dr \quad (۶۷-۲)$$

که $\rho(r)$ در معادله (۴۷-۲) داده شده است. پس از کمی محاسبه، انتگرال معادله (۶۷-۲) به صورت زیر به دست آورده می‌شود

$$I[\rho] = \frac{2^{(13-2\gamma_\ell)/4} \pi \lambda}{1+2\gamma_\ell} [(4n+3) + (8n+4)\gamma_\ell] \quad (۶۸-۲)$$

و اطلاعات فیشر به فرم زیر تعیین می‌شود

$$I[\gamma] = 4\pi \int_0^{\infty} \frac{p^2}{\gamma(p)} \left(\frac{\partial \gamma}{\partial p} \right)^2 dp \quad (۶۹-۲)$$

که $\gamma(p)$ در معادله (۳۸-۲) داده شده است. برای حالت پایه ($n=0, \ell=0$)، از معادله (۶۷-۲) داریم

$$I[\gamma] = \frac{2^{(7-6\gamma_\ell)/4} (3+4\gamma_\ell)}{\lambda(1+2\gamma_\ell)} \quad (۷۰-۲)$$

اطلاعات فیشر برای پتانسیل شبه هماهنگ برای برخی مولکول‌های دو اتمی به دست آورده شده و نتایج در جداول (۴-۲) و (۵-۲) داده شده است. مقادیر انرژی همبستگی D_e و جداسازی تعادل بین ملکولی r_e ملکول‌های دو اتمی در این کار استفاده شده در جدول (۱-۲) داده شده‌اند. این مقادیر از مراجع [۷۹،۷۵] هستند. از جداول (۴-۲) و (۴-۲) مشاهده می‌شود که اطلاعات فیشر (در هر دو فضای مکان و تکانه) با افزایش n برای ملکول‌های دو اتمی در نظر گرفته شده افزایش می‌یابد.

تغییرات اطلاعات فیشر بر حسب تکانه زاویه‌ای مداری ℓ در شکل (۲-۲) به ازای $n=0$ برای ۵ ملکول دو اتمی انتخاب شده نشان داده شده است. از شکل (۲-۲) مشاهده می‌شود که اطلاعات

فیشر در فضای مکان با افزایش l کاهش می‌یابد. آنتروپی اطلاعات فیشر برای همه ملکول‌های دو اتمی در نظر گرفته شده به ازای $1 \gg l$ به سمت صفر میل می‌کنند.

جدول (۴-۲) آنتروپی اطلاعات فیشر برای پتانسیل شبه هماهنگ برای برخی ملکول‌های دو اتمی با $l = 0$ در

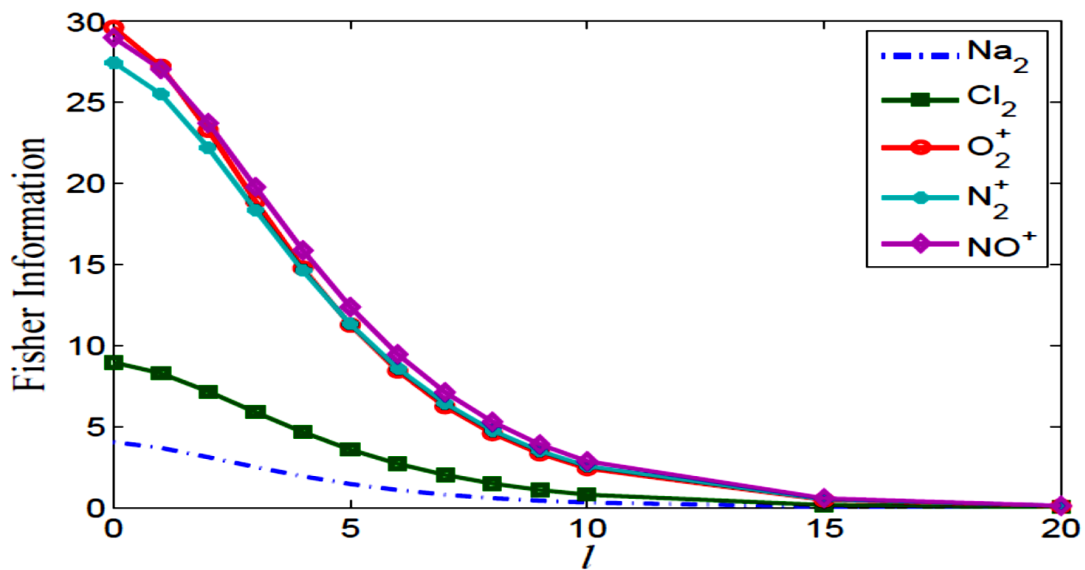
فضای مکان . واحد مربع $I[\rho]$ ، $(A^\circ)^2 / eV$ است [۲۱].

n	$I[\rho](Na_2)$	$I[\rho](Cl_2)$	$I[\rho](O_2^+)$	$I[\rho](N_2^+)$	$I[\rho](NO^+)$
0	4.03449	8.95359	29.6189	27.4679	29.0007
1	11.6049	25.9150	85.4832	79.6411	84.2456
2	19.1753	42.8764	141.348	131.814	139.490
3	26.7456	59.8378	197.212	183.987	194.735
4	34.3160	76.7992	253.076	236.161	249.980
5	41.8864	93.7605	308.941	288.334	305.225
6	49.4568	110.722	364.805	340.507	360.470
7	57.0272	127.683	420.669	392.680	415.715
8	64.5976	144.645	476.534	444.853	470.960
9	72.1680	161.606	532.398	497.026	526.204
10	79.7383	178.567	588.262	549.199	581.449

جدول (۲-۵) آنتروپی اطلاعات فیشر برای پتانسیل شبه هماهنگ برای برخی ملکول‌های دو اتمی با $\ell = 0$ در

فضای تکانه. واحد مربع $I[\gamma]$ ، $(A^\circ)^2 / eV$ است [۲۱].

n	$I[\gamma](Na_2)$	$I[\gamma](Cl_2)$	$I[\gamma](O_2^+)$	$I[\gamma](N_2^+)$	$I[\gamma](NO^+)$
0	3.68815	0.62866	0.30859	0.14658	0.09247
1	11.9955	2.28850	1.06359	0.55325	0.36408
2	24.5468	5.10871	2.27526	1.27083	0.86499
3	40.6289	9.05928	3.89987	2.30608	1.61329
4	59.5473	14.0403	5.87902	3.64230	2.60660
5	80.7177	19.9301	8.15580	5.25260	3.83137
6	103.670	26.6080	10.6799	7.10709	5.26891
7	128.032	33.9629	13.4085	9.17643	6.89883
8	153.505	41.8964	16.3058	11.4334	8.70091
9	179.852	50.3228	19.3421	13.8535	10.6560
10	206.884	59.1681	22.4924	16.4150	12.7465



شکل (۲-۲): تغییر آنتروپی اطلاعات فیشر در فضای مکان $(I[\rho])$ با ℓ برای NO^+ و Na_2, Cl_2, O_2^+, N_2^+

[۲۱].

۵-۲- روابط عدم قطعیت

در این قسمت در مورد روابط عدم قطعیت مربوط به اندازه‌گیری سیستم‌های هیدروژنی سه بعدی و پتانسیل شبه هماهنگ، که در قسمت‌های قبلی به دست آمده اند، بحث می‌کنیم.

۱-۵-۲- روابط عدم قطعیت بر مبنای آنتروپی شانون در سیستم هیدروژنی

جمع عدم قطعیت آنتروپی‌ها برای یک سیستم هیدروژنی در سه بعد، طبق معادلات (۲-۴۶) و

(۲-۴۸)، برابر است با

$$S_\rho + S_\gamma = 3(1 + \ln \pi) + 5 \ln 2 - \frac{10}{3} \quad (۲-۷۱)$$

که رابطه عدم قطعیت (۱-۲۱) را برآورده می‌کند که به طور کلی معتبر است.

۲-۵-۲- روابط عدم قطعیت بر مبنای آنتروپی شانون برای پتانسیل شبه هماهنگ

برای به دست آوردن عدم قطعیت آنتروپی در سیستم غیر نسبیتی با پتانسیل شبه هماهنگ با

استفاده از روابط به دست آمده از معادلات (۲-۵۲) و (۲-۵۶)، داریم

$$S_{n,\ell}[\rho] + S_{n,\ell}[\gamma] = 4n + 2\gamma_\ell + 3 - 2 \log \left(\frac{2n!}{\Gamma\left(n + \gamma_\ell + \frac{3}{2}\right)} \right) - 2\gamma_\ell \psi\left(n + \gamma_\ell + \frac{3}{2}\right) + 2E\left[\tilde{L}_n^{\gamma_\ell + \frac{1}{2}}\right] \quad (۲-۷۲)$$

۳-۵-۲- روابط عدم قطعیت بر مبنای اطلاعات فیشر برای سیستم هیدروژنی

از آنجایی که عبارت‌های صریحی برای اطلاعات فیشر مکان و تکانه یک حالت هیدروژنی

(n, ℓ, μ) به ترتیب توسط معادلات (۲-۶۲) و (۲-۶۶) داده شده است و عدم قطعیت فیشر در حالت

پایه $(n=1, \ell=0)$ به صورت زیر به محاسبه می‌شود [۷۹]

$$I_\rho I_\gamma = \frac{\pi}{\lambda^2} \quad (73-2)$$

۴-۵-۲- روابط عدم قطعیت بر مبنای اطلاعات فیشر برای پتانسیل شبه هماهنگ

برای عدم قطعیت فیشر با استفاده از (۶۸-۲) و (۷۰-۲) داریم

$$I[\rho]I[\gamma] = \left(\frac{2^{(13-2\gamma_\ell)/4} \pi \lambda}{(1+2\gamma_\ell)^2} \right) \left(\frac{2^{(7-6\gamma_\ell)/4} (3+4\gamma_\ell)}{\lambda} \right) [(4n+3) + (8n+4)\gamma_\ell] \quad (74-2)$$

۵-۵-۲- روابط کرامر-رائو در سیستم هیدروژنی

ترکیب مقادیر چشمداشتی $\langle r^2 \rangle$ و $\langle p^2 \rangle$ ، با اطلاعات فیشر I_ρ و I_γ ، که در معادلات (۶۲-۲) و

(۶۶-۲) داده شده‌اند، با ما این اجازه را می‌دهد تا روابط کرامر-رائو:

$$\langle r^2 \rangle I_\rho \geq 1 \quad ; \quad \langle p^2 \rangle I_\gamma \geq 1 \quad (75-2)$$

را به ترتیب در فضاهای مکان و تکانه ثابت کنیم. متوجه می‌شویم که این دو عبارت نابرابری‌های

کرامر-رائو را برای سیستم‌های تک ذره‌ای در پتانسیل مرکزی برآورده می‌کنند و در حالت پایه [۷۹]

$$\langle r^2 \rangle I_\rho = \frac{3}{\lambda} \geq 1 \quad (76-2)$$

$$\langle p^2 \rangle I_\gamma = 4\pi^2 \lambda^2 \geq 1 \quad (77-2)$$

۶-۲- نتیجه‌گیری

اندازه‌گیری اطلاعات تئوری را هم از لحاظ عددی و هم از لحاظ تحلیلی، برای پتانسیل شبه

هماهنگ با استفاده از اطلاعات فیشر و آنتروپی اطلاعات شانون در هر دو فضای مکان و تکانه مورد

بررسی قرار دادیم. با استفاده از مقادیر D_e و r_e برخی مولکول‌های دو اتمی، مقادیر اندازه‌گیری

اطلاعات تئوری برای پتانسیل شبه هماهنگ را به دست آوردیم.

مشاهده می‌کنیم که اطلاعات فیشر با افزایش n در هر دو فضای مکان و تکانه افزایش می‌یابد، اما با افزایش l برای همه مولکول‌های دو اتمی بررسی شده کاهش می‌یابد. آنتروپی شانون همچنین با افزایش n در فضای مکان افزایش می‌یابد ولی با افزایش l رفتاری کاهشی دارد.

فصل سوم

اندازه‌گیری آنترופی اطلاعات نظری از معادله‌های کلین

گوردون و دیراک

معادله کلین گوردون^۱، حالت نسبیتی معادله‌ی شرودینگر است و برای بررسی ذرات کوانتومی با اسپین صفر به کار می‌رود. این معادله به اسم دو فیزیکدان به نام‌های اسکار کلین و والتر گوردون نامگذاری شده است.

معادله دیگر، دیراک^۲، توسط فیزیکدان بریتانیایی پل دیراک پدید آمد که خود دیراک این معادله را بر مبنای معادله کلین-گوردون گسترش داد. در این مسیر او نیاز به حالت‌های با تکانه زاویه‌ای $j=1/2$ در طبیعت را کشف کرد. این موضوع به ویژه در تعبیر حالت‌های با انرژی منفی کارایی داشت [۸۰].

در پی یافتن معادله‌ای که جرم مثبت داشته باشد و هامیلتونی ظاهر شده در معادله موج هرمیتی باشد به معادله دیراک دست می‌یابیم که نسبت به مکان و زمان، مرتبه یک می‌باشد. معادله دیراک، ذرات با اسپین نیم، یعنی فرمیون‌ها را (مانند الکترون‌ها) توصیف می‌کند.

مدل ذره در جعبه یک بعدی [۸۱]، یک سیستم ایده‌آل متشکل از یک تک ذره نقطه‌ای در چاه پتانسیل بینهایت می‌باشد. در این مدل، روی بخش خطی (جعبه) نیرویی نیست (انرژی پتانسیل صفر) و در نقاط انتهایی پتانسیل به بینهایت صعود می‌کند و بنابراین دیواره‌های غیر قابل نفوذی شکل می‌گیرد. این مدل، ساده‌ترین مدل کوانتومی است و همراه با پتانسیل‌های نوسانگر هماهنگ همسانگرد و کولنی، جزو مدل‌های مقدماتی کوانتومی هستند که برای بررسی سیستم‌های فیزیکی به کار می‌روند. سیستم ایده‌آل جعبه در هر متن مقدماتی در مکانیک کوانتومی استفاده می‌شود تا برای بار اول ویژگی‌های اصلی رفتار کوانتومی یک ذره را نشان دهد (به عنوان مثال، انرژی کوانتیده و انرژی نقطه صفر) و تضاد با پیش‌بینی مکانیک کلاسیک معلوم می‌شود [۸۲]. دلیل این امر این است که معادله شرودینگر متناظر به صورت تحلیلی و با حساب دیفرانسیل مقدماتی قابل حل است.

¹Klein-Gordon

² Dirac

این مدل تئوری تا کنون برای تفسیر پدیده‌های مختلف در فیزیک اتمی و ملکولی [۸۳]، نانو [۸۴]، فیزیک هسته‌ای [۸۵]، علم پلیمر [۸۶] و ریاضی فیزیک [۸۷] مورد استفاده قرار گرفته است. این مدل برای بررسی چگال بوز-انیشتین محدود هم نسبتاً موفق بوده است [۸۸].

در این کار مدل ذره در جعبه برای نشان دادن عدم قطعیت و گسترش متغیرهای بنیادی نظریه اطلاعات سیستم‌های مکانیک کوانتومی استفاده شده است. با وجود این واقعیت این نظریه (الف) نسبتاً به سایر روش‌های نظری چون نظریه بنیادی چگالی [۴۲] و (ب) براساس محاسبات کوانتومی و اطلاعات کوانتومی قرار دارد [۱]، این نظریه در یک حالت شار است؛ که هنوز شامل سوالات باز بسیاری می‌باشد. هدف ما بررسی مدل در ارتباط با اندازه‌گیری‌های اطلاعات نظری نوع جهانی (شانون) و موضعی (فیشر) است. علاوه بر این، روابط عدم قطعیت مربوط به این اندازه‌گیری‌ها هم بحث خواهند شد.

در قسمت بعدی، ابتدا جواب‌های معادله کلین-گوردون در سه بعد و در حضور پتانسیل پوشل-تلا بدست می‌آوریم و سپس به بررسی آنتروپی مکان می‌پردازیم. سپس جواب‌های شبه دقیقی از معادله دیراک برای چاه پتانسیل بینهایت معرفی می‌کنیم. در قسمت ۵، ابتدا از طریق تبدیل فوریه، تابع موج را در فضای تکانه به دست می‌آوریم و سپس چگالی‌های آنتروپی اطلاعات مکان و تکانه را محاسبه می‌کنیم. سپس آنتروپی اطلاعات شانون برای حالت‌های پایین $n=1,2$ این سیستم نسبیتی محاسبه گردیده و نابرابری BBM (به صورت عددی) بررسی شده است. در قسمت بعدی اطلاعات فیشر و نابرابری‌های استم و کرامر-رائو مطالعه و برخی نتایج تکمیلی مطرح می‌شوند.

۲-۳- حل‌های معادله کلین-گوردون با پتانسیل پوشل-تلا

معادله کلین-گوردون در حضور پتانسیل برداری $V(r)$ و پتانسیل نرده‌ای $S(r)$ به صورت زیر

نوشته می‌شود ($\hbar = c = 1$) [۸۹]

$$\left[\hat{p}^2 + (M + S(r))^2 - (E - V(r))^2 \right] \psi(r) = 0 \quad (1-3)$$

که \hat{p} عملگر تکانه، E انرژی و M جرم سکون ذره می‌باشد. پتانسیل پوشل - تله دو حلقه‌ای شکل کولنی را در نظر می‌گیریم [۸۹]

$$V(r, \theta, \varphi) = V(r) + \frac{V(\theta)}{r^2} + \frac{V(\varphi)}{r^2} + \frac{V(\varphi)}{r^2 \sin^2 \theta} \quad (۲-۳)$$

که

$$V(r) = -\frac{\beta}{r} \quad (۳a-۳)$$

$$V(\theta) = \frac{b}{\sin^2 \theta} + \frac{A(A-1)}{\cos^2 \theta} \quad (۳b-۳)$$

$$V(\varphi) = \frac{\alpha^2 D(D-1)}{\sin^2(\alpha\varphi)} + \frac{\alpha^2 C(C-1)}{\cos^2(\alpha\varphi)} \quad (۳c-۳)$$

و $A, C, D > 1, \beta > 0, b \geq 0, \alpha = 1, 2, 3, \dots$ پارامترهای مثبت حقیقی هستند. با در نظر گرفتن

پتانسیل‌های برداری و نزده‌ای، معادله (۱-۳) به شکل زیر تبدیل می‌شود:

$$\left[\hat{p}^2 + (M^2 - E^2) + 2(M + E) \left(-\frac{\beta}{r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{b}{\sin^2 \theta} + \frac{A(A-1)}{\cos^2 \theta} \right) \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\alpha^2 D(D-1)}{\sin^2(\alpha\varphi)} + \frac{\alpha^2 C(C-1)}{\cos^2(\alpha\varphi)} \right) \right] \psi(r) = 0 \quad (۴-۳)$$

با در نظر گرفتن تابع موج به صورت زیر

$$\psi(r) = \frac{R(r)}{r} \frac{H(\theta)}{\sin^{1/2} \theta} K(\varphi) \quad (۵-۳)$$

و جایگذاری معادله (۵-۳) در معادله (۴-۳) و جداسازی متغیرها، معادله‌های دیفرانسیلی جدا

برای $R(r)$ ، $H(\theta)$ و $K(\varphi)$ به صورت زیر به دست می‌آوریم [۹۰]:

$$-\frac{d^2 R_{n,\ell,m}(r)}{dr^2} + \left[\left(\ell^2 - \frac{1}{4} \right) \frac{1}{r^2} - 2\beta(M + E_{n,\ell,m}) \frac{1}{r} \right] R_{n,\ell,m}(r) = (E_{n,\ell,m}^2 - M^2) R_{n,\ell,m}(r) \quad (6-3)$$

$$-\frac{d^2 H_\ell(\theta)}{d\theta^2} + \left[\frac{m^2 + 2b(M + E_{n,\ell,m}) - \frac{1}{4}}{\sin^2 \theta} + \frac{2A(A-1)(M + E_{n,\ell,m})}{\cos^2 \theta} \right] H_\ell(\theta) = \ell^2 H_\ell(\theta) \quad (7-3)$$

$$-\frac{d^2 K_m(\varphi)}{d\varphi^2} + 2(M + E_{n,\ell,m}) \left[\frac{\alpha^2 D(D-1)}{\sin^2(\alpha\varphi)} + \frac{\alpha^2 C(C-1)}{\cos^2(\alpha\varphi)} \right] K_m(\varphi) = m^2 K_m(\varphi) \quad (8-3)$$

که m و ℓ ثابت‌های جداسازی هستند.

برای حل معادله (8-3)، $z = \sin^2 \theta$ را معرفی می‌کنیم که معادله (8-3) را به شکل زیر تغییر

می‌دهد:

$$\left\{ \frac{d^2}{dz^2} + \frac{\frac{1}{2} - z}{z(1-z)} \frac{d}{dz} + \frac{1}{z^2(1-z)^2} \left[-\frac{m^2}{4\alpha^2} z^2 + \left(\frac{m^2}{4\alpha^2} + \frac{D(D-1)}{2} (M + E_{n,\ell,m}) \right) \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{C(C-1)}{2} (M + E_{n,\ell,m}) \right] z - \frac{D(D-1)}{2} (M + E_{n,\ell,m}) \right\} K_m(z) = 0 \quad (9-3)$$

با حل معادله (9-3) با استفاده از روش نیکوروف-اواروف، تابع موج متناظر به شکل زیر می‌باشد:

$$K_m(\varphi) = \left[\sin^2(\alpha\varphi) \right]^{\frac{1}{4} + \sqrt{\frac{1}{16} + \frac{D(D-1)(M+E_{n,\ell,m})}{2}}} \left(1 - \sin^2(\alpha\varphi) \right)^{\frac{1}{4} + \sqrt{\frac{1}{16} + \frac{C(C-1)(M+E_{n,\ell,m})}{2}}} \\ \times P_n' \left(2\sqrt{\frac{1}{16} + \frac{D(D-1)(M+E_{n,\ell,m})}{2}}, 2\sqrt{\frac{1}{16} + \frac{C(C-1)(M+E_{n,\ell,m})}{2}} \right) \left(1 - 2\sin^2(\alpha\varphi) \right) \quad (10-3)$$

با فرض $x = \sin^2 \theta$ ، معادله (7-3) تبدیل می‌شود به

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} + \frac{\frac{1}{2} - x}{x(x-1)} \frac{d}{dx} + \frac{1}{(x(x-1))^2} \left[-\frac{\ell^2}{4} x^2 + \left(\frac{m^2 + 2b(M + E_{n,\ell,m}) + \ell^2}{4} \right) \right] \right. \\ \left. - \frac{1}{2} A(A-1)(M + E_{n,\ell,m}) - \frac{1}{16} \right\} x - \left(\frac{m^2 + 2b(M + E_{n,\ell,m})}{4} - \frac{1}{16} \right) \Bigg\} H_{\ell,m}(x) = 0 \quad (11-3)$$

با همان روش قبلی، ویژه توابع قسمت قطبی برحسب چندجمله‌ای‌های ژاکوبی به صورت زیر

بیان می‌شوند:

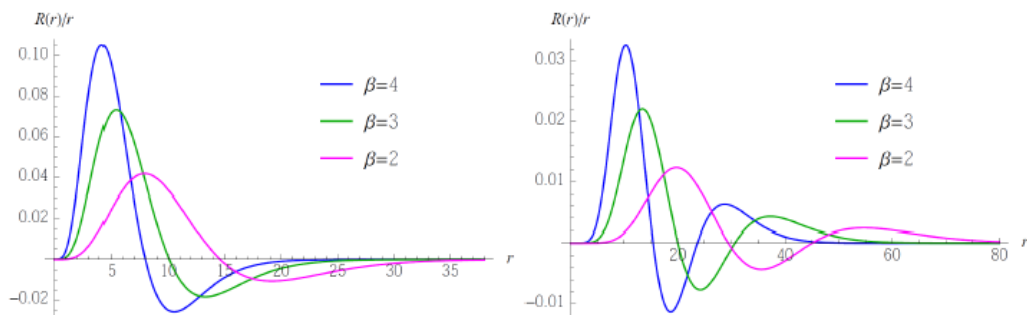
$$H_{\ell,m}(\theta) = (\sin^2 \theta)^{\frac{1}{4} + \frac{1}{2} \sqrt{m^2 + 2b(M + E_{n,\ell,m})}} (1 - \sin^2 \theta)^{\frac{1}{4} + \sqrt{\frac{1}{16} + \frac{A(A-1)}{2}} (M + E_{n,\ell,m})} \\ \times P_n^r \left(\sqrt{m^2 + 2b(M + E_{n,\ell,m})}, 2\sqrt{\frac{1}{16} + \frac{A(A-1)}{2}} (M + E_{n,\ell,m}) \right) (1 - 2\sin^2 \theta) \quad (12-3)$$

همچنین معادله قسمت شعاعی به شکل زیر می‌باشد:

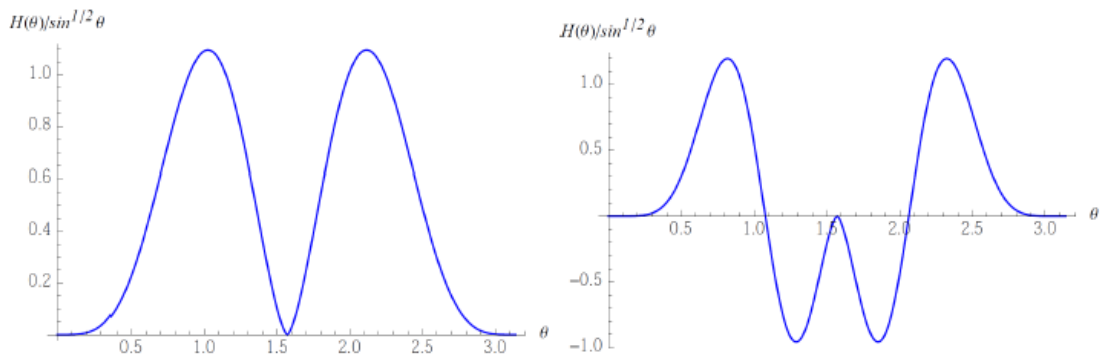
$$-\frac{d^2 R_{n,\ell,m}(r)}{dr^2} + \left[\left(\ell^2 - \frac{1}{4} \right) \frac{1}{r^2} - 2\beta(M + E_{n,\ell,m}) \frac{1}{r} \right] R_{n,\ell,m}(r) = (E_{n,\ell,m}^2 - M^2) R_{n,\ell,m}(r) \quad (13-3)$$

و ویژه توابع متناظر عبارتند از

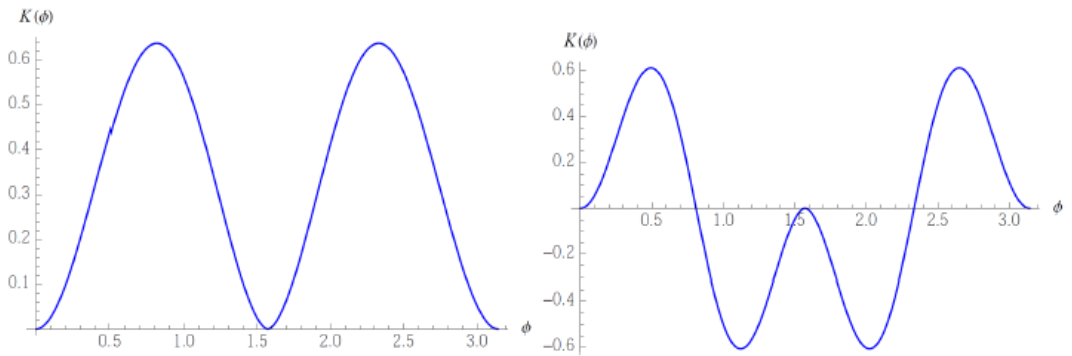
$$R_{n,\ell,m}(r) = r^{\frac{1}{2} + \ell} \exp\left(-\sqrt{M^2 - E_{n,\ell,m}^2} r\right) L_n^{2\ell} \left(2\sqrt{M^2 - E_{n,\ell,m}^2} r \right) \quad (14-3)$$



شکل (۱-۳) بخش شعاعی تابع موج برای حالت‌های پایه و برانگیخته



شکل (۲-۳) بخش قطبی تابع موج برای حالت‌های پایه و برانگیخته

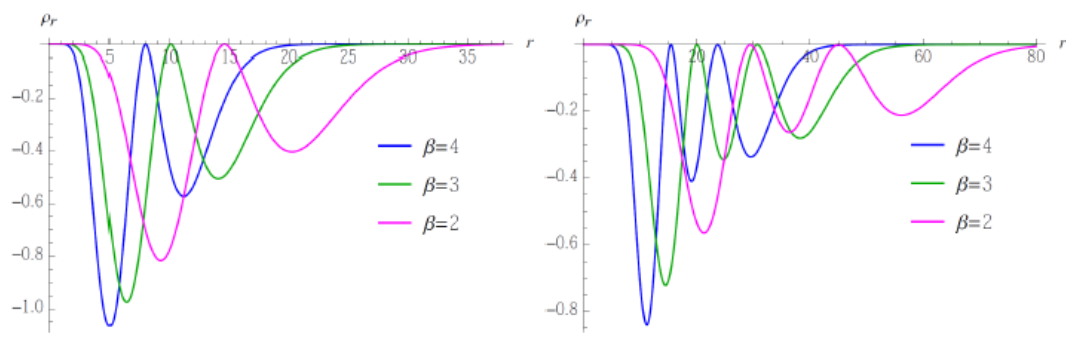


شکل (۳-۳) بخش سمتی تابع موج برای حالت‌های پایه و برانگیخته

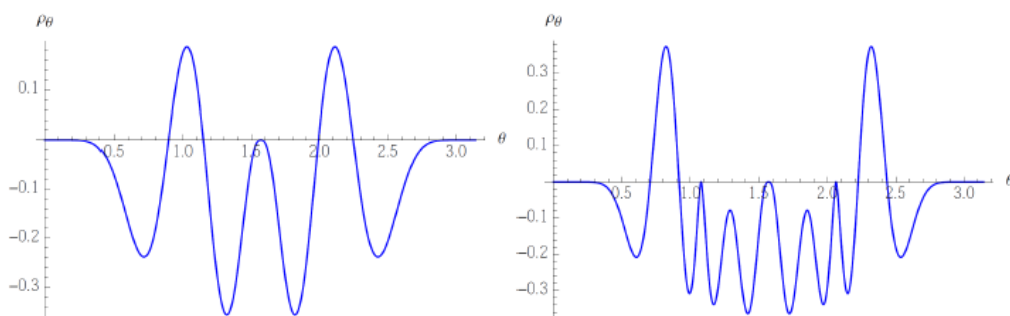
۳-۳- آنترپی اطلاعات برای معادله کلین-گوردون

آنترپی اطلاعات فضای مکان برای مسئله سه بعدی کلین-گوردون با پتانسیل پوشل-تلا را می‌توان با استفاده از معادله (۱۱-۱) محاسبه نمود. بخش‌های متفاوت توابع موج در حالت پایه و برانگیخته در شکل‌های (۱-۳) - (۳-۳) با فرض $m=1$ نشان داده شده‌اند. همچنین چگالی‌های آنترپی اطلاعات مکان عبارتست از $\rho_s(q) = |\psi_n(q)|^2 \ln |\psi_n(q)|^2$. این چگالی‌ها نقشی شبیه به چگالی‌های احتمال $\rho(r) = |\psi_n(r)|^2$ در مکانیک کوانتومی بازی می‌کنند. چگالی‌های آنترپی اطلاعات مکان در شکل‌های (۴-۳) - (۶-۳) برای حالت‌های پایه و برانگیخته نشان داده شده است.

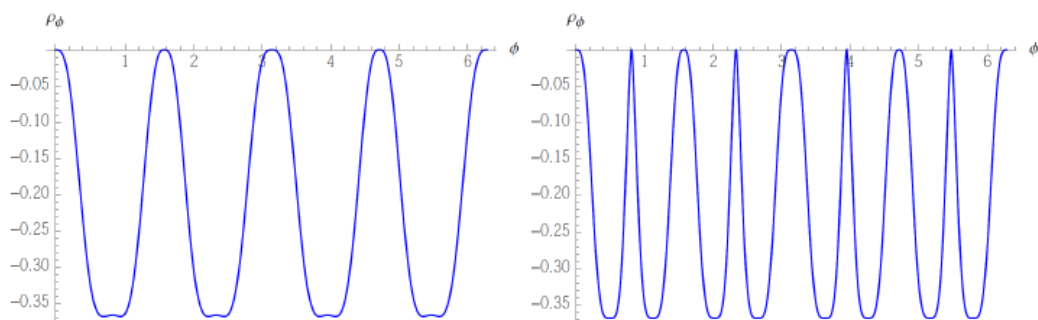
در شکل (۳-۷)، تغییرات آنترویی‌های اطلاعات فضای مکان S_x برای حالت‌های پایه و برانگیخته برحسب β برای α های متفاوت نشان داده شده است.



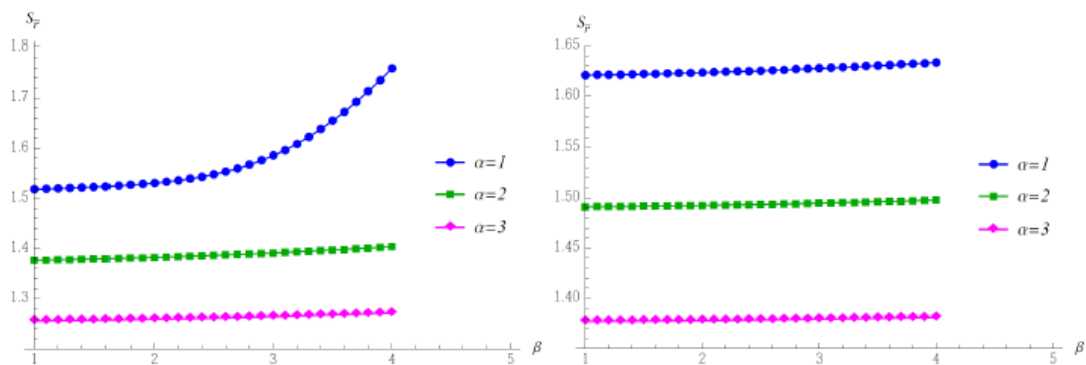
شکل (۳-۴) بخش شعاعی چگالی‌های آنترویی اطلاعات برای حالت‌های پایه و برانگیخته



شکل (۳-۵) بخش قطبی چگالی‌های آنترویی اطلاعات برای حالت‌های پایه و برانگیخته



شکل (۳-۶) بخش سمتی چگالی‌های آنترویی اطلاعات برای حالت‌های پایه و برانگیخته



شکل (۷-۳) تغییرات آنترپی اطلاعات مکان برای حالت‌های پایه و برانگیخته

۳-۴- جواب معادله دیراک برای چاه پتانسیل بینهایت

معادله دیراک به شکل زیر نوشته می‌شود [۹۱]

$$\left(\gamma^\mu p_\mu - mcI - \frac{V}{c} \right) \Psi = 0 \quad (۱۵-۳)$$

که

$$\gamma^\mu = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_\mu \\ \sigma_\mu & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad p_\mu = -i\hbar\partial_\mu \quad (۱۶-۳)$$

که γ^μ ماتریس‌های دیراک هستند، m نشان‌دهنده جرم ذره می‌باشد و پتانسیل عبارتست از

$$V = \gamma^\mu A_\mu + IV_s \quad (۱۷-۳)$$

که A_μ و V_s به ترتیب پتانسیل‌های برداری و نرده ای می‌باشند. پتانسیل مورد مطالعه در اینجا

پتانسیل چاه مربعی در نظر گرفته می‌شود:

$$V_s(x) = \begin{cases} 0 & -a \leq x \leq a \\ \infty & otherwise \end{cases} \quad (۱۸-۳)$$

با انتخاب $\mu = 0, 1$ ، هامیلتونی در $(1+1)$ بعد به صورت زیر داده می‌شود

$$H = \gamma^5 c \left(p_1 + \frac{A_1}{c} \right) + IA_0 + \gamma^0 (mc^2 + V_s) \quad (19-3)$$

که $\gamma^5 = \gamma^0 \gamma^1$ با جایگذاری

$$A_1 = 0, \quad \Psi = \begin{pmatrix} \Phi_+ \\ \Phi_- \end{pmatrix}, \quad \gamma^0 = \sigma_3, \quad \gamma^5 = \sigma_1, \quad p = -i\hbar \frac{d}{dx}, \quad A_0 = V_s \quad (20-3)$$

معادله به شکل زیر ظاهر می شود

$$i\hbar c \frac{d}{dx} \Phi_- + (mc^2 + 2V_s - E) \Phi_+ = 0 \quad (21-3)$$

برای چاه پتانسیل بینهایت، داریم

$$i\hbar c \frac{d}{dx} \Phi_- + (mc^2 - E) \Phi_+ = 0 \quad (22-3)$$

$$i\hbar c \frac{d}{dx} \Phi_+ - (mc^2 + E) \Phi_- = 0 \quad (23-3)$$

از معادله (23-3)،

$$\Phi_- = -\frac{i\hbar c}{(mc^2 + E)} \frac{d}{dx} \Phi_+ \quad (24-3)$$

با جایگذاری معادله (24-3) در معادله (22-3)، معادله شرودینگر گونه زیر به دست می آید

$$-\hbar^2 c^2 \frac{d^2}{dx^2} \Phi_+ + ((mc^2)^2 - E^2) \Phi_+ = 0 \quad (25-3)$$

با انتخاب

$$k^2 = \frac{(E^2 - (mc^2)^2)}{\hbar^2 c^2} \quad (26-3)$$

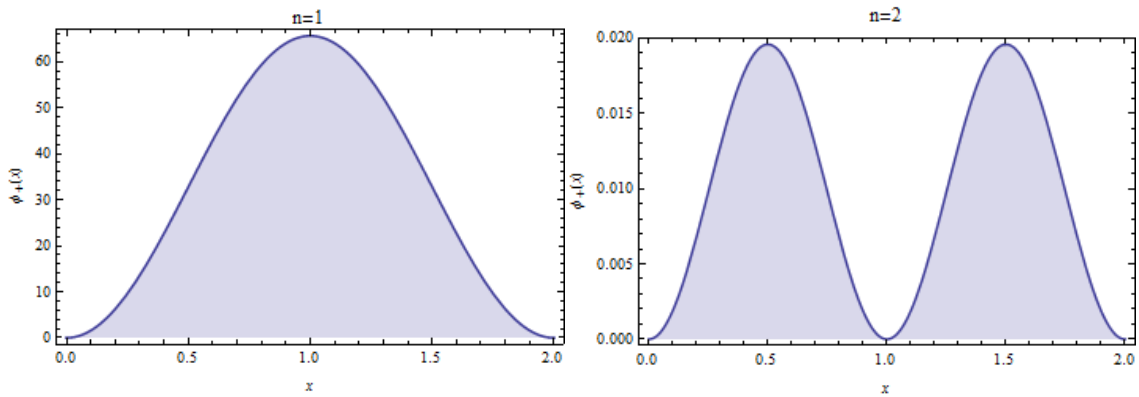
معادله (۲۵-۳) ساده‌تر نوشته می‌شود:

$$\frac{d^2}{dx^2} \Phi_+ + k^2 \Phi_+ = 0 \quad (۲۷-۳)$$

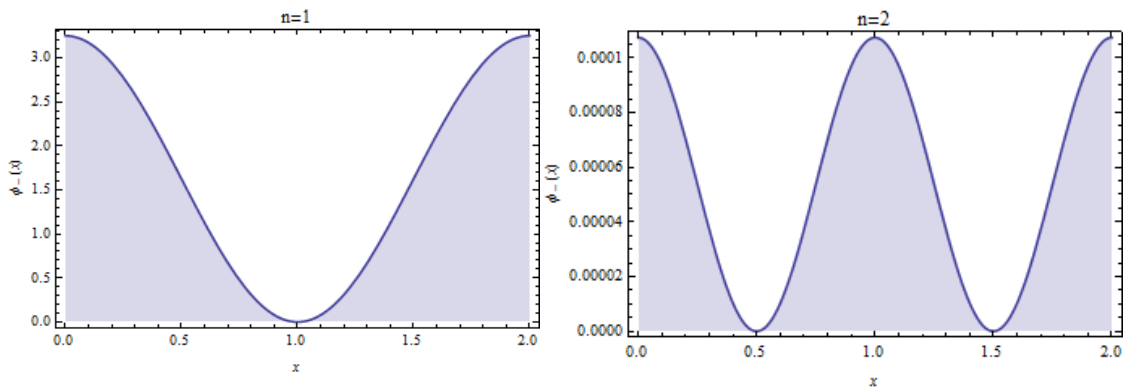
و ویژه حالت‌ها را به آسانی می‌توان در شکل زیر نوشت

$$\Phi_n^+ = \text{Sin}\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \quad (۲۸a-۳)$$

$$\Phi_n^- = -\frac{i\hbar c}{(mc^2 + E)} \left(\frac{a}{n\pi}\right) \text{Cos}\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \quad (۲۸b-۳)$$



شکل (۸-۳): چگالی‌های آنترابی فضای مکان $\Phi_n^+(x)$ برای $n=1,2$ و $a=2$.



شکل (۹-۳): چگالی‌های آنترابی فضای مکان $\Phi_n^-(x)$ برای $n=1,2$ و $a=2$.

و تابع موج چاه پتانسیل بینهایت در شکل زیر نوشته می‌شود

$$\Psi_n(x) = N_n \left(\begin{array}{c} \text{Sin}\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \\ -\frac{i\hbar c}{(mc^2 + E_n)}\left(\frac{a}{n\pi}\right)\text{Cos}\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \end{array} \right) \quad (29-3)$$

که ثابت بهنجارش برابر است با

$$N_n = n\pi(mc^2 + E_n) \sqrt{\frac{2}{n^2\pi^2 a (mc^2 + E_n)^2 + (\hbar c)^2 a^3}} \quad (30-3)$$

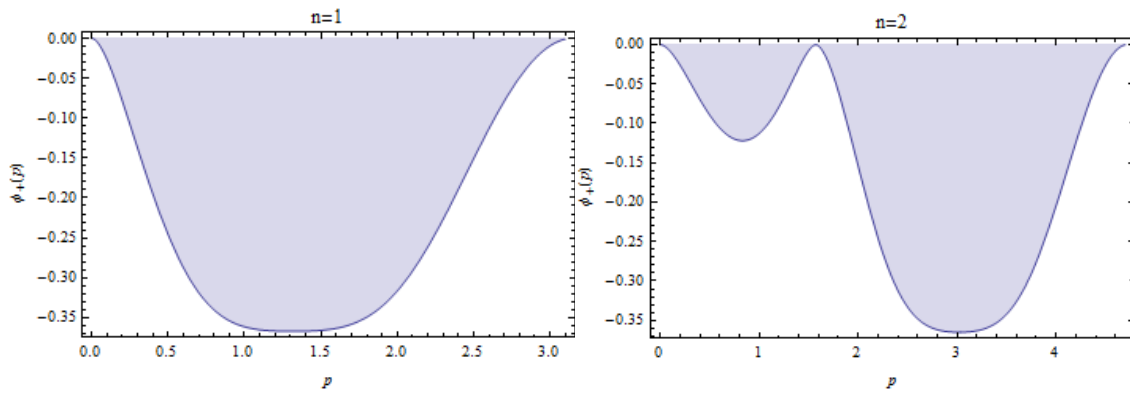
از معادله (3-26) ویژه مقادیر انرژی به صورت زیر به دست می آیند

$$E_n = \sqrt{\frac{n^2\pi^2}{a^2}\hbar^2 c^2 + (mc^2)^2} \quad (31-3)$$

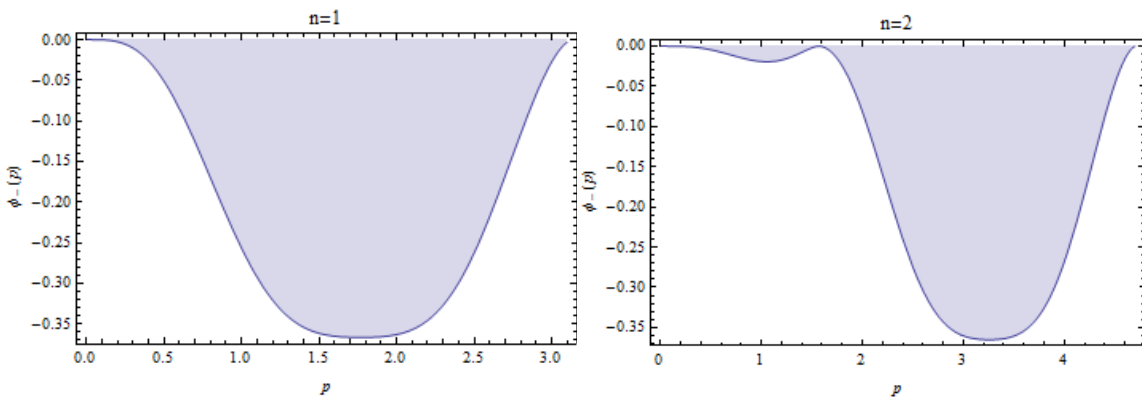
3-5- آنتروپی اطلاعات شانون

با استفاده از معادله (1-11)، آنتروپی اطلاعات در فضاهای مکان و تکانه را برای چاه پتانسیل بینهایت یک بعدی می توان محاسبه نمود. به طور کلی، استخراج آنتروپی اطلاعات به فرم صریح بسیار دشوار است. به طور مشخص، استخراج عبارت تحلیلی برای S_{ρ_n} ، همان طور که در کارهای انجام شده نشان داده شده، اغلب غیر ممکن است. برای به دست آوردن آنتروپی اطلاعات در فضای تکانه، بایستی از تبدیل فوریه استفاده کنیم. چگالی های آنتروپی اطلاعات در فضاهای مکان و تکانه به ترتیب به صورت $\gamma_n^s(p) = |\Psi_n(p)|^2 \ln |\Psi_n(p)|^2$ و $\rho_n^s(x) = |\Psi_n(x)|^2 \ln |\Psi_n(x)|^2$ نشان داده می شوند. از طرفی تبدیل فوریه مولفه ها را به صورت زیر معرفی می کنیم ($\hbar = c = m = 1$)

$$\Phi_n^\pm(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-a}^a e^{-ipx} \Phi_n^\pm(x) dx \quad (32-3)$$



شکل (۳-۱۰): چگالی‌های آنتروپی فضای تکانه $\Phi_n^+(p)$ برای $n=1, 2$ و $a=2$.



شکل (۳-۱۱): چگالی‌های آنتروپی فضای تکانه $\Phi_n^-(p)$ برای $n=1, 2$ و $a=2$.

بنابراین ویژه حالت‌های متناظر در فضای تکانه

$$\Psi_n(p) = N_n^p \left(\begin{array}{l} \frac{ia\sqrt{\frac{2}{\pi}}(-n\pi \cos(n\pi)\sin(ap) + ap \cos(ap)\sin(n\pi))}{(p^2 a^2 - n^2 \pi^2)} \\ \frac{i}{(1+E_n)} \frac{a^2 \sqrt{\frac{2}{\pi}}(ap \cos(n\pi)\sin(ap) - n\pi \cos(ap)\sin(n\pi))}{n\pi (p^2 a^2 - n^2 \pi^2)} \end{array} \right) \quad (3-33)$$

می باشند. بدین ترتیب چگالی‌های احتمال در فضای مکان به صورت زیر نوشته می‌شوند

$$\rho_n(x) = \Psi_n^* (\Psi)_n \times \left(\frac{n\pi}{a} \right) + x \frac{1}{\left(1 + \frac{\pi^2}{a^2}\right)} \left(\frac{a}{\pi}\right)^2 \left(\frac{\pi}{a}\right) \quad (34-3)$$

برای حالت پایه $n=1$

$$\rho_1(x) = \pi^2 \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\pi^2}{a^2}}\right)^2 \left(\frac{a^2 \text{Cos}^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)}{\pi^2 \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\pi^2}{a^2}}\right)^2} + \text{Sin}^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right) \quad (35-3)$$

$$\times \left(a^2 + a\pi^2 \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\pi^2}{a^2}}\right)^2 \right)^{-1}$$

و برای اولین حالت برانگیخته $n=2$

$$\rho_2(x) = 4\pi^2 \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4\pi^2}{a^2}}\right)^2 \left(\frac{a^2 \text{Cos}^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right)}{4\pi^2 \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4\pi^2}{a^2}}\right)^2} + \text{Sin}^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \right) \quad (36-3)$$

$$\times \left(a^3 + 4a\pi^2 \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4\pi^2}{a^2}}\right)^2 \right)^{-1}$$

نمایش حالت پایه تابع موج متناظر از طریق تبدیل فوریه به دست می‌آوریم

$$\gamma_1(p) = \left(\frac{\pi^2 \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\pi^2}{a^2}}\right)^2}{a^3 + 2a\pi^2 + \frac{\pi^4}{a} 2\pi^2 \sqrt{a^2 + \pi^2}} \right) \times$$

$$\left(\frac{2a^2 \pi \text{Sin}^2(ap)}{(a^2 p^2 - \pi^2)^2} - \frac{2a^6 p^2 \text{Sin}^2(ap)}{\pi^3 (a^2 p^2 - \pi^2)^2 \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\pi^2}{a^2}}\right)^2} + \frac{4a^2 p \text{Sin}^2(ap)}{\pi (a^2 p^2 - \pi^2)^2 \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\pi^2}{a^2}}\right)} \right) \quad (37-3)$$

و برای اولین حالت برانگیخته $n = 2$

$$\gamma_2(p) = \left(\frac{4a^2\pi^2 \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4\pi^2}{a^2}}\right)^2}{|a| \left((a^2 + 4\pi^2)^2 + 8\pi^2 \sqrt{a^2 + 4\pi^2} |a| \right)} \right) \times \left(- \frac{a^6 p^2 \text{Sin}^2(ap)}{2\pi^3 (a^2 p^2 - 4\pi^2)^2 \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4\pi^2}{a^2}}\right)^2} \right. \\ \left. + \frac{8a^2\pi \text{Sin}^2(ap)}{(a^2 p^2 - 4\pi^2)^2} + \frac{4a^2 p \text{Sin}^2(ap)}{\pi (a^2 p^2 - 4\pi^2)^2 \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4\pi^2}{a^2}}\right)} \right) \quad (3-38)$$

فرض کردیم که آنتروپی‌های اطلاعات مکان و تکانه را S_{ρ_n} و S_{γ_n} بگیریم. بر مبنای معادلات (۱) - (۱۱) و (۲۱-۱)، نتایج به صورت عددی در جدول (۳-۱) لیست شده است.

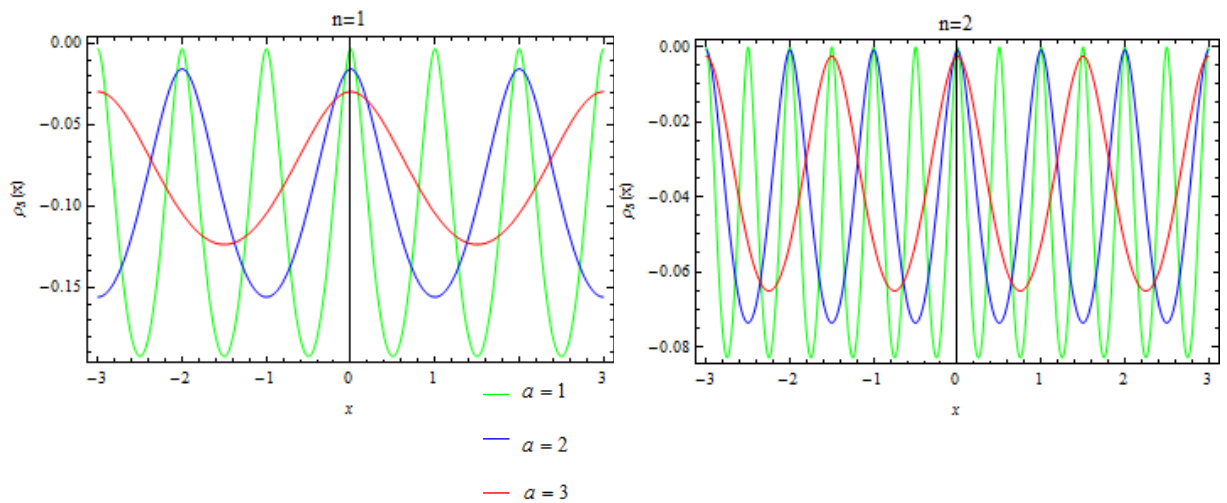
جدول (۳-۱) آنتروپی اطلاعات شانون ویژه حالت‌های $n = 1, 2$ برای مقادیر $a = 1, 2, 3$.

state	a	S_{ρ_n}	S_{γ_n}	$S_{\rho_n} + S_{\gamma_n}$	$1 + \ln \pi$
$n = 1$	1	0.3962	2.2217	2.6179	2.1447
	2	1.1499	1.4799	2.6298	2.1447
	3	1.6450	0.9970	2.6420	2.1447
$n = 2$	1	0.3872	2.4422	2.8294	2.1447
	2	1.0893	1.7416	2.8309	2.1447
	3	1.5184	1.3140	2.8324	2.1447

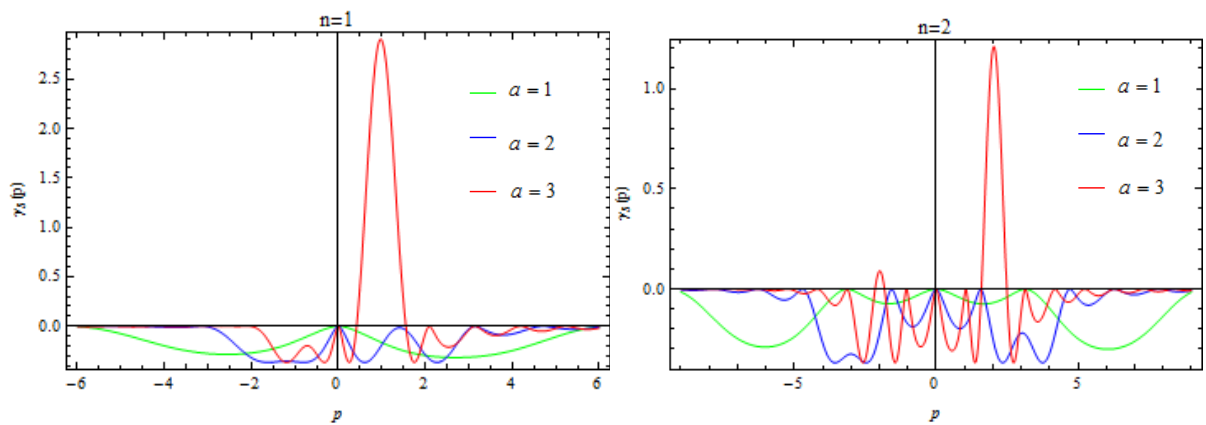
ویژگی‌های مشخصه آنتروپی‌های اطلاعات مکان و تکانه $\Phi_n^+(p), \rho_n^s(x), \Phi_n^-(x), \Phi_n^+(x)$

در شکل‌های (۳-۸) - (۳-۱۳) برای پایین‌ترین حالت‌ها $n = 1, 2$ و $a = 1, 2, 3$ نشان

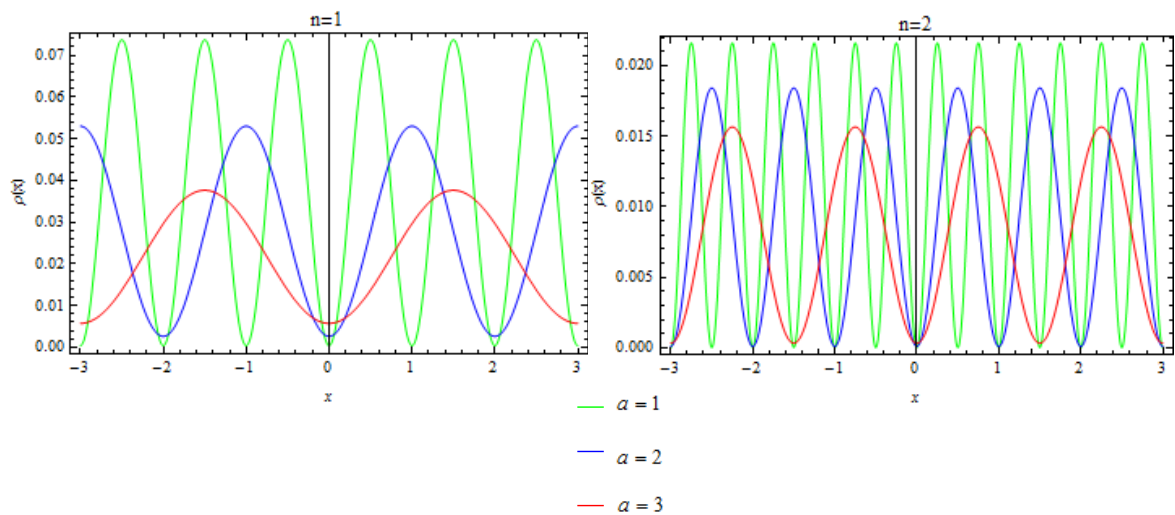
داده شده است. چگالی‌های احتمالی $\rho_n(x)$ و $\gamma_n(p)$ در شکل‌های (۳-۱۴) و (۳-۱۵) نشان داده شده است. می‌بینیم که دامنه‌های چگالی برای حالت $n=1$ بزرگ‌تر از حالت $n=2$ می‌باشد. برای چگالی‌های احتمال مکان و تکانه، $\rho_n(x)$ و $\gamma_n(p)$ ، خواص مربوطه را به خوبی می‌توان با تجزیه و تحلیل روابط بین سطوح انرژی بر حسب پارامتر a توضیح داد [۹۲].



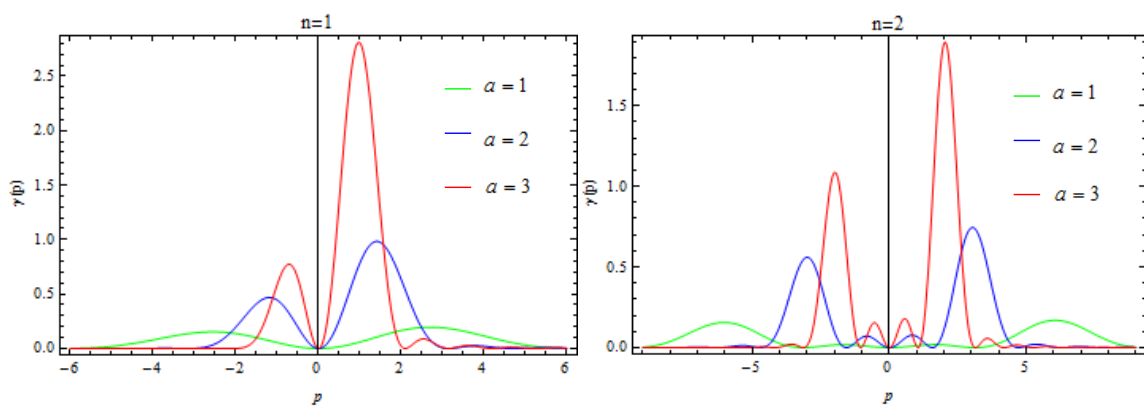
شکل (۳-۱۲): چگالی‌های آن‌تروپی فضای مکان $\rho_n^s(x)$ برای حالت‌های $n=1, 2$.



شکل (۳-۱۳): چگالی‌های آن‌تروپی فضای تکانه $\gamma_n^s(p)$ برای حالت‌های $n=1, 2$.

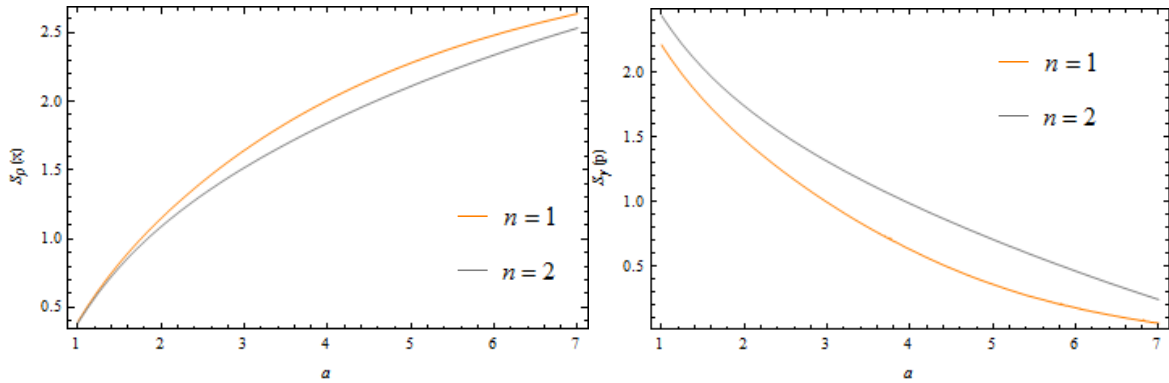


شکل (۳-۱۴): چگالی های احتمال آنتروپی فضای مکان $\rho_n(x)$ برای حالت های $n=1, 2$.



شکل (۳-۱۵): چگالی های احتمال آنتروپی فضای تکانه $\gamma_n(p)$ برای حالت های $n=1, 2$.

در جدول (۳-۱) و شکل (۳-۱۶)، نتایج عددی آنتروپی های اطلاعات S_{ρ_n} و S_{γ_n} و مجموع آن ها برای پایین ترین حالت ها $n=1, 2$ برای چاه پتانسیل بینهایت با پارامترهای $a=1, 2, 3$ نشان داده شده است. بایستی توجه داشته باشیم که مجموع آنتروپی ها، در مطابقت با نابرابری BBM بایستی دارای کران پایین $1 + \ln \pi$ باشد.



شکل (۳-۱۶): آنتروپی اطلاعات شانون برای حالت‌های $n=1, 2$.

۳-۶- اطلاعات فیشر و اصل عدم قطعیت

اطلاعات فیشر را به صورت تحلیلی برای ذره در جعبه و تحت معادله دیراک بررسی می‌کنیم. ابتدا، تابع موج سیستم به دست می‌آوریم تا چگالی‌های احتمال را بیابیم و سپس اطلاعات فیشر را تجزیه و تحلیل نماییم. کمیت اطلاعات فیشر در فضای مکان برای $n=1$ در نظر می‌گیریم:

$$I_{\rho_1(x)} = \left\langle \left[\frac{d}{dx} \ln \rho_1(x) \right]^2 \right\rangle = \int_{-a}^a \frac{[\rho_1'(x)]^2}{\rho_1(x)} dx = 4 \int_{-a}^a \left[\frac{d}{dx} \sqrt{\rho_1(x)} \right]^2 dx \quad (۳۹-۳)$$

$$= 4 \int_{-a}^a [\psi_1'(x)]^2 dx = 4 \langle (\Delta p)^2 \rangle = \frac{16\pi^2}{a^2}$$

برای حالت $n=2$

$$I_{\rho_2(x)} = 4 \int_{-a}^a [\psi_2'(x)]^2 dx = 4 \langle (\Delta p)^2 \rangle = \frac{64\pi^2}{a^2} \quad (۴۰-۳)$$

از آن جایی که سهم اصلی در انتگرال (۳۹-۳) به نواحی‌ای متعلق است که وقتی چگالی بیش‌ترین گره را بر واحد آرگومان x دارد، این کمیت (الف) تخمینی از ویژگی‌های نوسانی تابع موج و چگالی فراهم می‌سازد، و (ب) از آن جایی که متأثر به نقاط خاصی از فضای پیکر بندی بر روی سیستم می‌باشد، یعنی بازه‌ی $[-a, a]$ برای این حالت، دارای خواص موضعی می‌باشد.

اطلاعات فیشر در فضای تکانه یک ذره در جعبه را با روشی مشابه می‌توان به دست آورد. برای

حالت $n=1$ داریم

$$\begin{aligned}
 I_{\gamma_1(p)} &= \left\langle \left[\frac{d}{dp} \ln \gamma_1(p) \right]^2 \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{[\gamma_1'(p)]^2}{\gamma_1(p)} dp \\
 &= 4 \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{d}{dx} \sqrt{\gamma_1(p)} \right]^2 dp = 4 \int_{-\infty}^{\infty} [\phi_1'(p)]^2 dp = 4 \langle x^2 \rangle \quad (41-3) \\
 &= \frac{2 \left(a^2 \pi^4 (-3 + 2\pi^2) + a^6 (3 + 2\pi^2) + 2a^4 \pi^2 (-3 + 2\pi^2) \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\pi^2}{a^2}} \right) \right)}{3\pi^2 \left(a^4 + \pi^4 + 2a^2 \pi^2 \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\pi^2}{a^2}} \right) \right)}
 \end{aligned}$$

و برای حالت $n=2$

$$\begin{aligned}
 I_{\gamma_2(p)} &= 4 \int_{-\infty}^{\infty} [\phi_2'(p)]^2 dp = 4 \langle x^2 \rangle \\
 &= \frac{16a^2 \pi^4 (-3 + 8\pi^2) + a^6 (3 + 8\pi^2) + 8a^4 \pi^2 (-3 + 8\pi^2) \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4\pi^2}{a^2}} \right)}{6\pi^2 \left(a^4 + 16\pi^4 + 8a^2 \pi^2 \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\pi^2}{a^2}} \right) \right)} \quad (42-3)
 \end{aligned}$$

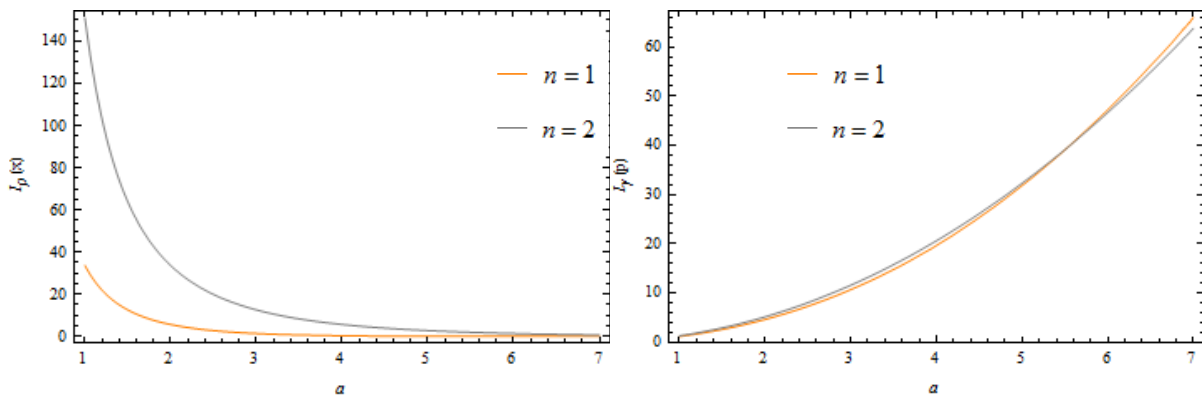
و حاصل ضرب اطلاعات فیشر می‌شود

$$I_{\rho_1} I_{\gamma_1} = \frac{32 \left(a^2 \pi^4 (-3 + 2\pi^2) + a^6 (3 + 2\pi^2) + 2a^4 \pi^2 (-3 + 2\pi^2) \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\pi^2}{a^2}} \right) \right)}{3a^2 \left(a^4 + \pi^4 + 2a^2 \pi^2 \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\pi^2}{a^2}} \right) \right)} \quad (43-3)$$

$$I_{\rho_2} I_{\gamma_2} = \frac{64 \left(16a^2 \pi^4 (-3 + 8\pi^2) + a^6 (3 + 8\pi^2) + 8a^4 \pi^2 (-3 + 8\pi^2) \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4\pi^2}{a^2}} \right) \right)}{6a^2 \left(a^4 + 16\pi^4 + 8a^2 \pi^2 \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\pi^2}{a^2}} \right) \right)} \quad (44-3)$$

که رابطه عدم قطعیت $I_{\rho} I_{\gamma} \geq 4$ [۵۳] را برآورده می‌کند که برای همه پتانسیل‌های متقارن یک بعدی مکانیک کوانتومی صادق می‌باشد.

مطابق با نامساوی‌های استم [۹۳] و کرامر- راثو [۴۳]، می‌توان اطلاعات فشر را با مقادیر چشمداشتی $\langle x^2 \rangle$ و $\langle p^2 \rangle$ مرتبط نمود (معادلات (۱۹-۱) و (۲۳-۱)). نتایج در جدول (۲-۳) و شکل (۱۷-۳) نشان داده شده‌اند. علاوه بر این، اطلاعات فشر را برای مقادیر چشمداشتی از طریق روابط $I_{\rho} = 4 \langle (\Delta p)^2 \rangle$ و $I_{\gamma} = 4 \langle x^2 \rangle$ در فضاهای مکان و تکانه می‌توان به دست آورد. می‌بینیم که I_{ρ} با افزایش پارامتر a کاهش می‌یابد در حالی که I_{γ} رفتاری افزایشی دارد.



شکل (۱۷-۳): آنتروپی اطلاعات فشر برای حالت‌های $n = 1, 2$.

جدول (۲-۳) نتایج عددی برای رابطه عدم قطعیت و آنتروپی اطلاعات فیشر برای ویژه حالت‌های $n=1,2$ با مقادیر $a=1,2,3$.

State	a	$\langle x^2 \rangle$	Δx	$\langle p \rangle$	$\langle p^2 \rangle$	Δp	$\Delta x \Delta p$	I_ρ	I_γ
$n=1$	1	0.2833	0.5322	0.4624	39.478	6.2661	3.3347	33.6613	1.1330
	2	1.1498	1.0723	0.6699	9.870	3.0694	3.2913	5.6860	4.5998
	3	2.6645	1.6323	0.7146	4.3865	1.9687	3.2136	1.4162	10.6583
$n=2$	1	0.3207	0.5663	0.2721	157.91	12.5633	7.1144	151.089	1.2827
	2	1.2832	1.1328	0.4644	39.478	6.2667	7.0989	33.6613	5.1330
	3	2.8906	1.7002	0.5810	17.546	4.1505	7.0566	12.6028	11.563

۳-۷- نتایج

در این فصل، آنتروپی اطلاعات شانون در فضای مکان برای معادله کلین-گوردون سه بعدی و تحت پتانسیل پوشل-تلا، و نیز آنتروپی شانون و اطلاعات فیشر تحت معادله دیراک و چاه پتانسیل بینهایت، محاسبه شدند. آنتروپی اطلاعات شانون مکان S_{ρ_n} و تکانه S_{γ_n} ، اطلاعات فیشر مکان I_ρ و تکانه I_γ و همچنین عدم قطعیت های مکان و تکانه برای پایین ترین حالت‌ها $n=1,2$ ، با پارامترهای $a=1,2,3$ برای چاه پتانسیل محاسبه شدند. برخی ویژگی‌های جالب چگالی‌های آنتروپی اطلاعات $\rho_n(x)$ و $\gamma_n^s(p)$ ، همچنین چگالی‌های احتمال $\Phi_n^-(p)$ ، $\Phi_n^+(p)$ ، $\rho_n^s(x)$ ، $\Phi_n^-(x)$ ، $\Phi_n^+(x)$ و $\gamma_n(p)$ بررسی شدند. علاوه بر این، نابرابری BBM، اصل عدم قطعیت، نابرابری‌های استم و کرامر-رائو برای حالت‌های در نظر گرفته شده مطالعه شدند.

فصل چهارم

آنتروپی اطلاعات شانون و آنتروپی فیشر برای

نوسانگرهای هماهنگ وابسته به زمان

در سال ۱۹۲۴، دوبروی^۱ برای هر ذره در حال حرکت یک موج مرتبط با آن را تعریف کرد که اکنون به عنوان ماهیت موج-ماده شناخته شده است. علاوه بر این، اروین شرودینگر در ادامه فرضیه دوبروی، یک معادله موج دیفرانسیلی مرتبه دوم معرفی کرد تا ماهیت موجی ماده و ذرات مرتبط با موج را توضیح دهد. این معادله شبیه معادله موج در اپتیک است و فرض می‌کند که ذره به عنوان موج رفتار کند و رفتار برحسب یک تابع به نام تابع موج بیان می‌شود. هنگامی که این معادله حل می‌شود، دو چیز، یعنی تابع موج ψ و انرژی E حاصل می‌شود. می‌توان از تابع موج ψ ، همه چیز در مورد ذرات استنباط شود. بنابراین تابع موج ψ مهم‌ترین چیز است، که به خودی خود هیچ اهمیت فیزیکی ندارد، با این حال مربع قدر مطلق ψ ، یعنی $|\psi|^2$ ، احتمال یافتن ذره در یک ناحیه خاصی از فضا در یک لحظه از زمان را می‌دهد. جمله E در معادله، انرژی ذره بسته به پتانسیل V و شرایط مرزی (محدودیت بر روی ذرات) می‌تواند پیوستار یا کوانتیده باشد. تعیین میزان انرژی ذره یکی از ویژگی‌های قابل توجه مکانیک کوانتومی است. یعنی یک ذره نمی‌تواند هر انرژی‌ای داشته باشد و تنها می‌تواند انرژی مجازی را دارا باشد که از معادله شرودینگر و بسته به پتانسیل V و شرایط مرزی تعیین می‌شود [۹۴].

هایزنبرگ یک مکانیک ماتریسی تعریف کرد که در آن کمیت‌های فیزیکی برحسب ویژه مقادیر ماتریس توضیح داده می‌شد [۹۵]. معادلات ریاضی به طور موفقیت آمیزی در هم‌ارزی با مکانیک ماتریسی بودند که توسط شرودینگر در سری مقالات منتشر شده در سال ۱۹۲۶ نشان داده شده بود. از این زمان به بعد، مکانیک ماتریسی هایزنبرگ و مکانیک موجی شرودینگر به عنوان دو توصیف موفق مکانیک کوانتومی شناخته شدند [۹۶].

معادله شرودینگر در دو شکل بررسی می‌شود: یکی شامل زمان (وابسته به زمان) و دیگری که در آن عامل زمان حذف شده است و از این‌رو مستقل از زمان نامیده می‌شود [۹۷].

¹ de-Broglie

بنابراین معادله شرودینگر دو فرم دارد که در یکی زمان به فرم صریح نمایان می‌شود و توضیح می‌دهد چگونه تابع موج ذره در زمان تکامل خواهد یافت. دیگری معادله‌ای است که در آن وابستگی زمان حذف شده است و از این رو به عنوان معادله مستقل از زمان شرودینگر شناخته می‌شود و اغلب برای تعیین انرژی‌های مجاز به کار می‌رود. این دو، معادلات مستقل از زمان و معادلات وابسته به زمان، جدای از هم نیستند. معادله مستقل از زمان را به آسانی از معادله وابسته به زمان می‌توان بدست آورد (به جز حالتی که پتانسیل وابسته به زمان باشد).

در سال ۲۰۱۱، بیسا^۱ و گودس^۲ [۹۸] از روش نوردایی لویس^۳ و رزنفیلد^۴ [۹۹] استفاده کردند و تبدیلی یکانی به دست آوردند تا توابع موج معادله شرودینگر را برای نوسانگرهای لگاریتم دوره‌ای وابسته به زمان به دست آورند.

در این کار، واریانس وابسته به زمان $(\Delta x, \Delta p)$ ، آنتروپی شانون $(S_{x,p})$ و اطلاعات فیشر $(I_{x,p})$ ، برای سه نوسانگر لگاریتم دوره‌ای محاسبه می‌شود. به دلیل اینکه این سیستم‌ها میرا هستند، ما تغییر زمانی اطلاعات فیشر را بررسی می‌کنیم. آنتروپی شانون نقش اندازه‌گیری گستردگی توزیع احتمال را بازی می‌کند، در حالی که اطلاعات فیشر اندازه‌گیری موضعی است و رفتار زمانی اطلاعات فیشر تا حد زیادی تحت تاثیر ترتیب موضعی توزیع احتمال است. عبارات کلی برای $I_{x,p}$ و $S_{x,p}$ در حالت $n = 0$ برحسب ν است، که معادله دیفرانسیلی غیر خطی را برآورده می‌کند. برای یک نوسانگر لگاریتم دوره‌ای رابطه عدم قطعیت هایزنبرگ حداقل است و $S_{x,p}$ و $I_{x,p}$ وابسته به زمان نمی‌باشند، به بیان دیگر این نوسانگرها به عنوان نوسانگرهای غیر وابسته به زمان رفتار می‌کنند. برای دو نوسانگر دیگر Δx ، Δp ، $S_{x,p}$ و $I_{x,p}$ به زمان بستگی دارند. برای همه این نوسانگرهای لگاریتم دوره‌ای $S_x + S_p$ و $I_x I_p$ وابسته به زمان نیستند. از آنجایی که هامیلتونی وابسته به زمان است، نتایج

¹ Bessa

² Guedes

³ Lewis

⁴ Riesenfeld

جالبی وجود دارد. نتایج به ما اجازه می‌دهند تا نابرابری $I_x I_p \geq 4$ برای همه نوسانگرهای لگاریتم دوره‌ای بنویسیم. همچنین برقراری نابرابری‌های کرامر-رائو و استم را بررسی می‌کنیم. بنابراین، در قسمت‌های ۴ و ۵، آنتروپی اطلاعات شانون و فیشر برای این سیستم‌های نوسانی وابسته به زمان و همچنین روابط عدم قطعیت محاسبه می‌گردد. نتایج در قسمت آخر نشان داده شده است.

۲-۴- ملاحظات اولیه

در این فصل ما آنتروپی شانون و اطلاعات فیشر را به ترتیب، برای فضاهای مکان و تکانه، در حالت کلی برای نوسانگری که جرم و فرکانس آن وابسته به زمان است، محاسبه می‌کنیم. برای این کار، ابتدا باید تابع موج این سیستم را پیدا کنیم. برای هامیلتونی ای که صریحاً وابسته به زمان است، با استفاده از روش لوئیس و رزنفیلد توابع موج سیستم را پیدا [۹۹] و از آن برای محاسبه آنتروپی شانون و اطلاعات فیشر استفاده می‌کنیم.

۳-۴- ویژگی‌های نظریه کوانتومی وابسته به زمان

می‌خواهیم یک سیستم کوانتومی را که هامیلتونی آن صریحاً وابسته به زمان است $H(t)$ ، بررسی نماییم. برای این سیستم معادله شرودینگر وابسته به زمان به صورت زیر داده می‌شود

$$i\hbar \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = H(t)\psi(t) \quad (1-4)$$

اکنون فرض می‌کنیم که عملگر هرمیتی در زمان ثابت است، یعنی این که وابستگی صریح زمانی وجود ندارد

$$\frac{dI}{dt} = \frac{\partial I}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [I, H] = 0 \quad (2-4)$$

و

$$I = I^\dagger \quad (3-4)$$

معادله (۲-۴) را بر روی حالت $\psi(t)$ بکار می‌بریم:

$$\begin{aligned} \frac{dI}{dt}\psi(t) &= \frac{\partial I}{\partial t}\psi(t) + \frac{1}{i\hbar}[I, H]\psi(t) = 0 \\ &= \frac{\partial I}{\partial t}\psi(t) + \frac{1}{i\hbar}IH\psi(t) + \frac{1}{i\hbar}HI\psi(t) \end{aligned}$$

با استفاده از معادله (۱-۴) داریم

$$i\hbar \frac{\partial [I\psi(t)]}{\partial t} = H(t)[I\psi(t)] \quad (۴-۴)$$

ما می‌بینیم که $I\psi(t)$ یک جواب از معادله شرودینگر است و در نتیجه برای هر ثابتی معتبر است. حال فرض می‌کنیم که ثابت $I(t)$ حاوی عملگری با مشتقات زمانی نیست. برای سهولت در مراحل کار ویژه حالت‌های $I(t)$ را انتخاب می‌کنیم، سپس با حل معادله شرودینگر این ویژه حالت‌ها در یک عامل فازی دلخواه وابسته به زمان ضرب می‌شوند. بنابراین مجموعه کاملی از ویژه حالت‌های متعامد $|\lambda, k; t\rangle$ از $I(t)$ وجود دارد و

$$I(t)|\lambda, k; t\rangle = \lambda|\lambda, k; t\rangle \quad (۵-۴)$$

$$\langle \lambda', k'; t | \lambda, k; t \rangle = \delta_{\lambda'\lambda} \delta_{k'k} \quad (۶-۴)$$

که در آن ویژه مقادیر λ ناوردا هستند و k نشان‌دهنده عدد کوانتومی لازم برای مشخص کردن ویژه حالت‌های $|\lambda, k; t\rangle$ می‌باشد. این واقعیت که $I(t)$ هرمیتی است نشان می‌دهد که ویژه مقادیر آن حقیقی هستند. ما همچنین می‌توانیم نشان دهیم که ویژه مقادیر مستقل از زمان هستند. برای این کار ما معادله (۵-۴) را با در نظر گرفتن زمان به دست می‌آوریم

$$\frac{\partial I}{\partial t}|\lambda, k; t\rangle + I \frac{\partial}{\partial t}|\lambda, k; t\rangle = \frac{\partial \lambda}{\partial t}|\lambda, k; t\rangle + \lambda \frac{\partial}{\partial t}|\lambda, k; t\rangle \quad (۷-۴)$$

با استفاده از معادله (۲-۴) بر ویژه حالت‌های $|\lambda, k; t\rangle$ ، نتیجه می‌گیریم که

$$i\hbar \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle + IH |\lambda, k; t\rangle - HI |\lambda, k; t\rangle = 0$$

با استفاده از معادله (۵-۴)، داریم

$$i\hbar \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle + IH |\lambda, k; t\rangle - \lambda H |\lambda, k; t\rangle = 0 \quad (۸-۴)$$

اکنون دو طرف معادله (۸-۴) را در $|\lambda', k'; t\rangle$ ضرب می‌کنیم و

$$i\hbar \langle \lambda', k'; t | \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle + \langle \lambda', k'; t | IH |\lambda, k; t\rangle - \lambda \langle \lambda', k'; t | H |\lambda, k; t\rangle = 0$$

با استفاده از معادله (۵-۴)

$$i\hbar \langle \lambda', k'; t | \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle + (\lambda' - \lambda) \langle \lambda', k'; t | H |\lambda, k; t\rangle = 0 \quad (۹-۴)$$

برای $\lambda = \lambda'$ ، معادله (۹-۴) به صورت زیر می‌شود

$$i\hbar \langle \lambda, k'; t | \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle = 0 \quad (۱۰-۴)$$

با در نظر گرفتن حاصل ضرب نرده‌ای معادله (۷-۴) در $|\lambda, k; t\rangle$ ، به دست می‌آوریم

$$\langle \lambda, k; t | \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle + \langle \lambda, k; t | I \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle = \langle \lambda, k; t | \frac{\partial \lambda}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle + \lambda \langle \lambda, k; t | \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle$$

و دوباره با استفاده از معادله (۵-۴) داریم

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} = \langle \lambda, k; t | \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle \quad (۱۱-۴)$$

از معادلات (۱۰-۴) و (۱۱-۴) می‌توان نشان داد

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} = 0 \quad (۱۲-۴)$$

در این مرحله ارتباط ویژه حالت‌های $I(t)$ به جواب‌های معادله شرودینگر را بررسی می‌کنیم. برای این کار ابتدا معادله (۷-۴) را با استفاده از نتیجه به دست آمده در معادله (۴-۱۲) باز نویسی می‌کنیم، به طوری که

$$(\lambda - I) \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle = \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle \quad (۱۳-۴)$$

اکنون با در نظر گرفتن حاصل ضرب نرده ای معادله (۴-۱۳) در $|\lambda', k'; t\rangle$ ، به دست می‌آوریم

$$\begin{aligned} \langle \lambda', k'; t | \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle &= \lambda \langle \lambda', k'; t | \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle - \langle \lambda', k'; t | I \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle \\ &= (\lambda - \lambda') \langle \lambda', k'; t | \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle \end{aligned} \quad (۱۴-۴)$$

بنابراین با استفاده از معادله (۴-۹)، معادله (۴-۱۴) تبدیل می‌شود به

$$i\hbar (\lambda - \lambda') \langle \lambda', k'; t | \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle = (\lambda - \lambda') \langle \lambda', k'; t | H |\lambda, k; t\rangle \quad (۱۵-۴)$$

برای $\lambda \neq \lambda'$ ، معادله اخیر نتیجه می‌دهد

$$i\hbar \langle \lambda', k'; t | \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle = \langle \lambda', k'; t | H |\lambda, k; t\rangle \quad (۱۶-۴)$$

معادله (۴-۱۵)، برای $\lambda = \lambda'$ معتبر باقی نمی‌ماند، اگر چنین بود می‌توانستیم بگوییم که حالت $|\lambda, k; t\rangle$ ، در معادله شرودینگر صدق می‌کند. با این حال، حالت فاز $|\lambda, k; t\rangle$ ثابت نشده است و ما هنوز هم در ضرب کردن حالت‌های فاز $|\lambda, k; t\rangle$ در یک عامل وابسته به زمان آزاد هستیم. بنابراین مجموعه‌ای جدید از ویژه حالت‌های $I(t)$ ، که در زمان مطابق با معادله شرودینگر تحول می‌یابند، تعریف می‌کنیم. رابطه بین مجموعه جدید و حالت‌های قبلی $|\lambda, k; t\rangle$ عبارتست از

$$\psi_{\lambda k}(t) = e^{i\theta_{\lambda k}(t)} |\lambda, k; t\rangle \quad (۱۷-۴)$$

که در آن $\theta_{\lambda k}(t)$ یک تابع حقیقی وابسته به زمان است. حالت‌های ویژه حالت‌های متعامد بهنجار از $I(t)$ می‌باشند و بنابراین برحسب ویژه حالت‌های جدید، معادله ویژه مقداری $I(t)$ به فرم زیر می‌باشد

$$I(t)\psi_{\lambda k}(t) = \lambda\psi_{\lambda k}(t) \quad (18-4)$$

معادله (15-4) در حالت $\lambda \neq \lambda'$ ، برای این ویژه حالت‌های جدید معتبر باقی می‌ماند. بنابراین اگر فازهایی را انتخاب کنیم که معادله (15-4) در $\lambda = \lambda'$ را معتبر نگه دارد، ویژه حالت‌های جدید، ویژه حالت‌های معادله شرودینگر هستند. سپس با استفاده از ویژه حالت‌های جدید و معادله (13-4)، به دست می‌آوریم

$$(\lambda - I) \left[\frac{\partial}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle + i \frac{d\theta_{\lambda k}}{dt} |\lambda, k; t\rangle \right] = \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle \quad (19-4)$$

حاصل ضرب نرده‌ای معادله (19-4) در $|\lambda', k'; t\rangle$ ، را محاسبه می‌کنیم و با استفاده از معادلات (4-4) و (5) و (9-4) به دست می‌آوریم

$$\hbar(\lambda' - \lambda) \delta_{\lambda'\lambda} \delta_{k'k} \frac{d\theta_{\lambda k}}{dt} = (\lambda' - \lambda) \langle \lambda', k'; t | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H | \lambda, k; t \rangle \quad (20-4)$$

برای $\lambda = \lambda'$ ، معادله تبدیل می‌شود به

$$\hbar \delta_{k'k} \frac{d\theta_{\lambda k}}{dt} = \langle \lambda, k'; t | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H | \lambda, k; t \rangle \quad (21-4)$$

ما باید حالت‌های $|\lambda, k; t\rangle$ ای را انتخاب کنیم به طوری که سمت راست معادله (21-4) برای

$k' \neq k$ در معادله صدق کند. $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H$ ، به عنوان یک عملگر هرمیتی است، که قطری کردن آن

همیشه ممکن است. اکنون مراحل زیر را پی می‌گیریم. از رابطه زیر شروع می‌کنیم

$$\hbar \frac{d\theta_{\lambda k}}{dt} = \langle \lambda, k; t | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H | \lambda, k; t \rangle \quad (22-4)$$

بنابراین چون هر ویژه حالت $\psi_{\lambda k}(t)$ ، در معادله شرودینگر صدق می‌کند، ما می‌توانیم یک جواب کلی به عنوان یک ترکیب خطی از جواب‌ها بنویسیم:

$$\psi(t) = \sum_{\lambda, k} C_{\lambda, k} e^{i\theta_{\lambda k}(t)} |\lambda, k; t\rangle \quad (23-4)$$

که $C_{\lambda, k}$ ، ضرایب وابسته به زمان هستند. اکنون یک نوسانگر هماهنگ با جرم و فرکانس وابسته به زمان را در نظر می‌گیریم. هامیلتونی این سیستم عبارتست از

$$H(t) = \frac{p^2}{2m(t)} + \frac{m(t)\omega^2(t)x^2}{2} \quad (24-4)$$

که $m(t)$ و $\omega(t)$ ، به ترتیب جرم و فرکانس نوسانگر هستند و x و p متغیرهای مزدوج کانونی هستند که در

$$[x, p] = i\hbar \quad (25-4)$$

صدق می‌کنند. با نوشتن معادلات هایزنبرگ برای این سیستم، داریم

$$\dot{x} = \frac{p}{m(t)} \quad (26a-4)$$

$$\dot{p} = -m(t)\omega^2(t)x \quad (26b-4)$$

از معادلات (۲۶-۴)، معادله حرکت را مطابق زیر به دست می‌آوریم

$$\ddot{x} + \gamma(t)\dot{x} + \omega^2(t)x = 0 \quad (27-4)$$

و

$$\gamma(t) = \frac{\dot{m}(t)}{m(t)} \quad (28-4)$$

معادله حرکت مشابه هامیلتونی کلاسیک است:

$$\ddot{x}_{cl} + \gamma(t)\dot{x}_{cl} + \omega^2(t)x_{cl} = 0 \quad (29-4)$$

که اندیس cl نشان می‌دهد متغیر کلاسیکی است.

برای یافتن جواب‌های دقیقی از سیستم‌های هامیلتونی کوانتومی وابسته به زمان، لوئیس و روزنفیلد یک عملگر ناوردای برای سیستمی با جرم ثابت و فرکانس $\omega = \omega(t)$ ، به دست آوردند. پیش از این روش، پدروسا^۱ یک عملگر متغیر برای هامیلتونی داده شده در معادله (۴-۲۴) به دست آورده بود. در مرجع [۱۰۰] پدروسا، سیرا و گودس با استفاده از عملگر ناوردای به دست آمده در مرجع [۹۹]، تابع موج دقیق نوسانگر هماهنگ با جرم و فرکانس وابسته به زمان را بدون اختلال به دست آوردند.

ثابت‌های ساخته شده توسط لوئیس و روزنفیلد [۹۹] فرم زیر را دارد

$$I(t) = \frac{1}{2} [\alpha(t)x^2 + \beta(t)p^2 + \xi(t)\{x, p\}] \quad (30-4)$$

که در آن $\alpha(t)$ ، $\beta(t)$ و $\xi(t)$ ، توابع حقیقی وابسته به زمان، و $\{x, p\}$ نماد معمول برای پادجابه‌جایی x و p هستند.

با مشتق گرفتن از معادله (۴-۳۰) نسبت به زمان، داریم

$$\frac{dI}{dt} = \frac{1}{2} [\dot{\alpha}x^2 + \dot{\beta}p^2 + \dot{\xi}\{x, p\} + 2(x\dot{x}\alpha + p\dot{p}\beta) + \xi(\dot{x}p + p\dot{x} + \dot{p}x + x\dot{p})] \quad (31-4)$$

اکنون با استفاده از معادلات (۴-۲) و (۴-۲۶a) و (۴-۲۶b)، روابط زیر را به دست می‌آوریم

$$\dot{\alpha} - 2m(t)\omega^2(t)\xi = 0 \quad (32a-4)$$

$$\dot{\beta} + \frac{2\xi}{m(t)} = 0 \quad (32b-4)$$

¹ Pedrosa

$$\frac{\alpha}{m(t)} - \beta m(t) \omega^2(t) + \dot{\xi} = 0 \quad (32c-4)$$

با استفاده از سه معادله اخیر، یک معادله دیفرانسیل تکین، که یک معادله کمکی برای سیستم است، به دست می‌آوریم. برای این منظور، ابتدا جایگذاری زیر را انجام می‌دهیم

$$\beta(t) = \sigma^2(t) \quad (33-4)$$

با انجام این کار، معادله (32b-4) نتیجه می‌دهد

$$\xi = -m(t) \sigma \dot{\sigma} \quad (34-4)$$

حال، با استفاده از معادلات (33-4) و (34-4)، معادله (32c-4) را به صورت زیر می‌نویسیم

$$\alpha = m^2 \omega^2 \sigma^2 + \dot{m} m \sigma \dot{\sigma} + m^2 \dot{\sigma}^2 + m^2 \sigma \ddot{\sigma} \quad (35-4)$$

ترکیب معادله اخیر با معادلات (32a-4)، (34-4) و (35-4)، نتیجه می‌دهد

$$\frac{d}{dt} (m^2 \omega^2 \sigma^2 + \dot{m} m \sigma \dot{\sigma} + m^2 \dot{\sigma}^2 + m^2 \sigma \ddot{\sigma}) + 2m^2 \omega^2 \sigma \dot{\sigma} = 0 \quad (36-4)$$

یا

$$3m\dot{m}\dot{\sigma}^2 + 2\dot{\sigma}\ddot{m}m^2 + 3m\dot{m}\sigma\ddot{\sigma} + m^2\dot{\sigma}\ddot{\sigma} + m^2\dot{\sigma}\ddot{\sigma} + 2m\dot{m}\sigma^2\omega^2 + 4m^2\sigma^2\omega\dot{\omega} + 2m^2\omega^2\sigma\dot{\sigma} + \dot{m}^2\sigma\dot{\sigma} + m\dot{m}\sigma\dot{\sigma} = 0 \quad (37-4)$$

یا

$$\sigma \left(3 \frac{\dot{m}}{m} \ddot{\sigma} + 4 \dot{\sigma} \omega^2 + \ddot{\sigma} + 2 \frac{\dot{m}}{m} \sigma \omega^2 + 2 \sigma \omega \dot{\omega} + \frac{\dot{m}^2}{m^2} \dot{\sigma} + \frac{\dot{m}}{m} \dot{\sigma} \right) + 3 \left(\frac{\dot{m}}{m} \dot{\sigma}^2 + \dot{\sigma} \ddot{\sigma} \right) = 0 \quad (38-4)$$

معادله (38-4) را به صورت زیر می‌نویسیم

$$\sigma \left(\frac{\dot{m}}{m} \ddot{\sigma} + \dot{\sigma} \omega^2 + \ddot{\sigma} + 2\sigma \omega \dot{\omega} - \frac{\dot{m}^2}{m^2} \dot{\sigma} + \frac{\ddot{m}}{m} \dot{\sigma} \right) + \left(3\dot{\sigma} + 2\frac{\dot{m}}{m} \sigma \right) \left(\ddot{\sigma} + \frac{\dot{m}}{m} \dot{\sigma} + \omega^2 \sigma \right) = 0 \quad (39-4)$$

توجه کنید که

$$\frac{\dot{m}}{m} \ddot{\sigma} + \dot{\sigma} \omega^2 + \ddot{\sigma} + 2\sigma \omega \dot{\omega} - \frac{\dot{m}^2}{m^2} \dot{\sigma} + \frac{\ddot{m}}{m} \dot{\sigma} = \frac{d}{dt} \left(\ddot{\sigma} + \frac{\dot{m}}{m} \dot{\sigma} + \omega^2 \sigma \right) \quad (40-4)$$

سپس با ضرب معادله (39-4) در $m^2 \sigma^2$ و استفاده از معادله (40-4)، به دست می‌آوریم

$$m^2 \sigma^3 \frac{d}{dt} \left(\ddot{\sigma} + \frac{\dot{m}}{m} \dot{\sigma} + \omega^2 \sigma \right) + (3\dot{\sigma} \sigma^2 m^2 + 2m \dot{m} \sigma^3) \left(\ddot{\sigma} + \frac{\dot{m}}{m} \dot{\sigma} + \omega^2 \sigma \right) = 0 \quad (41-4)$$

و می‌دانیم که

$$\frac{d}{dt} (m^2 \sigma^3) = 3\dot{\sigma} \sigma^2 m^2 + 2m \dot{m} \sigma^3 \quad (42-4)$$

از معادله (41-4) می‌توان نوشت

$$\frac{d}{dt} \left[m^3 \sigma^3 \left(\ddot{\sigma} + \frac{\dot{m}}{m} \dot{\sigma} + \omega^2 \sigma \right) \right] = 0 \quad (43-4)$$

با انتگرال‌گیری از معادله (43-4)، به دست می‌آوریم

$$\ddot{\sigma} + \frac{\dot{m}}{m} \dot{\sigma} + \omega^2 \sigma = \frac{C^2}{m^2 \sigma^3} \quad (44-4)$$

که C^2 یک ثابت دلخواه انتگرال‌گیری است.

اکنون از معادلات (33-4)، (43-4)، (44-4) و (45-4) داریم

$$I(t) = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{Cx}{\sigma} \right)^2 + (\sigma p - m \dot{\sigma} x)^2 \right] \quad (45-4)$$

که در آن $\sigma(t)$ معادله کمکی (۴-۴۴) را برآورده می‌کند. با تغییر متغیر $\sigma(t) = C^{\frac{1}{2}}v(t)$ و با جایگذاری آن در معادله (۴-۴۵) و قرار دادن $C=1$ ، داریم

$$I(t) = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{x}{p} \right)^2 + (pv - m\dot{x})^2 \right] \quad (4-46)$$

و معادله کمکی جدید عبارتست از

$$\ddot{v} + \frac{\dot{m}}{m} \dot{v} + \omega^2 v = \frac{1}{m^2 v^3} \quad (4-47)$$

که به عنوان معادله تعمیم یافته میلن-پینر^۱ [۱۰۲، ۱۰۱] شناخته می‌شود.

بنابراین، هرگونه راه حل خاصی از معادله (۴-۴۷) را می‌توان برای ایجاد یک عملگر ثابت داده شده در معادله (۴-۴۶) مورد استفاده قرار داد.

متوجه می‌شویم که معادلات (۴-۲۷) و (۴-۴۷) و ثابت (۴-۴۶)، سیستمی از ارماکوو^۲ [۱۰۴، ۱۰۳] برای هامیلتونی داده شده در معادله (۴-۲۴) تشکیل می‌دهند. ثابت داده شده در معادله (۴-۴۶) توسط ارماکوو [۱۰۵] و لوئیس [۱۰۶] به دست آورده شده که در نوشته‌ها به عنوان ثابت ارماکوو-لوئیس شناخته می‌شود.

با ایجاد عملگر ناوردا $I(t)$ ، ما باید ویژه حالت‌ها و ویژه مقادیر آن را تعیین کنیم. بدین منظور، ما دو عملگر وابسته به زمان، $a(t)$ و $a^\dagger(t)$ ، تعریف می‌کنیم:

$$a = \left(\frac{1}{2\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \left[\left(\frac{x}{p} \right) + i(vp - m\dot{x}) \right] \quad (4-48a)$$

¹ Milne-Pinnery

² Ermakov

$$a^\dagger = \left(\frac{1}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \left[\left(\frac{x}{p}\right) - i(\nu p - m\nu x) \right] \quad (48b-4)$$

که در رابطه جابه‌جایی زیر صدق می‌کند

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad (49-4)$$

فرض کنید با استفاده از معادله (48-4)، p و x را بر حسب a و a^\dagger بنویسیم:

$$x = \left(\frac{1}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \nu (a + a^\dagger) \quad (50a-4)$$

$$p = i \left(\frac{1}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \left[\left(\frac{1}{\nu} - im\nu\right) a^\dagger - \left(\frac{1}{\nu} + im\nu\right) a \right] \quad (50b-4)$$

با جایگذاری معادلات (50-4) در (46-4)، داریم

$$I(t) = \hbar \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (51-4)$$

که عملگر جدیدی را معرفی می‌کند:

$$N = N^\dagger = a^\dagger a \quad (52-4)$$

و معادله (51-4) را می‌توان نوشت

$$I(t) = \hbar \left(N + \frac{1}{2} \right) \quad (53-4)$$

بنابراین از آنجایی که ویژه حالت‌های $I(t)$ ، ویژه حالت‌های $N(t)$ نیز هستند، داریم

$$N|n, t\rangle = n|n, t\rangle \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (54-4)$$

و

$$I|n, t\rangle = \lambda_n |n, t\rangle \quad (55-4)$$

با جایگذاری معادله (۴-۵۳) در معادله (۴-۵۵)، به دست می‌آوریم

$$\hbar \left(N |n, t\rangle + \frac{1}{2} |n, t\rangle \right) = \lambda_n |n, t\rangle$$

با استفاده از معادله (۴-۵۴)، ویژه مقادیر $I(t)$ را به دست می‌آوریم:

$$\lambda_n = \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (۴-۵۶)$$

بنابراین، داریم

$$a |n, t\rangle = n^{1/2} |n-1, t\rangle \quad (۴-۵۷a)$$

$$a^\dagger |n, t\rangle = (n+1)^{1/2} |n+1, t\rangle \quad (۴-۵۷b)$$

$$\langle n', t | n, t \rangle = \delta_{n,n'} \quad (۴-۵۷c)$$

توجه داشته باشید که عملگرهای a ، a^\dagger و N ، از همان جبر عملگرهای کاهش پیروی می‌کنند که برای قطری کردن یک عملگر هامیلتونی نوسانگر هماهنگ وابسته به زمان استفاده می‌شود.

حال، توابع موج دقیقی برای $I(t)$ ناوردا محاسبه می‌کنیم. معادله شرودینگر را در نظر می‌گیریم:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H(t) \psi(x, t) \quad (۴-۵۸)$$

با

$$H(t) = -\frac{\hbar^2}{2m(t)} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m(t)\omega^2(t)x^2}{2} \quad (۴-۵۹)$$

که در آن تابع موج $\psi(x, t) = \langle x | \psi(t) \rangle$ در این نمایش، ناوردایی (۴-۴۶)، معادله (۴-۲) را

برآورده می‌کند و ویژه مقادیر (همان‌طور که در معادلات (۴-۵) و (۴-۵۵) دیدید) عبارتند از

$$I \varphi_n(x, t) = \lambda_n \varphi_n(x, t) \quad (۴-۶۰)$$

که در آن $\langle \varphi'_n | \varphi_n \rangle = \delta_{n'n}$ و ویژه مقادیر λ_n ، ثابت هستند. بنابراین ما می‌توانیم جواب‌های معادله شرودینگر را با ویژه مقادیر $\varphi_n(x,t)$ در $I(t)$ مرتبط کنیم:

$$\psi_n(x,t) = e^{i\theta_n(t)} \varphi_n(x,t) \quad (۶۱-۴)$$

که در آن فازهای $\theta_n(t)$ (طبق معادله (۴-۲۲)) به صورت زیر داده می‌شوند

$$\hbar \frac{d\theta_n(t)}{dt} = \langle \varphi_n(x,t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) | \varphi_n(x,t) \rangle \quad (۶۲-۴)$$

بنابراین، می‌توان جواب کلی معادله شرودینگر برای معادله (۴-۵۸) را مطابق زیر نوشت

$$\psi(x,t) = \sum_n C_n e^{i\theta_n(t)} \varphi_n(x,t) \quad (۶۳-۴)$$

اکنون، برای محاسبه توابع موج نوسانگر که توسط هامیلتونی (۴-۵۹) توصیف می‌شوند، از تبدیل

یکانی زیر استفاده می‌کنیم [۱۰۷، ۱۰۰]

$$\varphi'_n(x,t) = U \varphi_n(x,t) \quad (۶۴-۴)$$

که

$$I(t) = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{x}{p} \right)^2 + (pv - mv^2 x)^2 \right] \quad (۶۵-۴)$$

از این تبدیل، می‌توان معادله (۴-۶۰) را در شکل زیر نوشت

$$I' \varphi'_n(x,t) = \lambda_n \varphi'_n(x,t) \quad (۶۶-۴)$$

که

$$I' = UIU^\dagger \quad (۶۷-۴)$$

و با استفاده از معادلات (۴-۶۰)، (۴-۶۵) و (۴-۶۷)، داریم

$$I' = -\frac{\hbar^2}{2} v^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{x^2}{2v^2} \quad (68-4)$$

با جایگذاری معادله (68-4) در معادله (66-4)، و تغییر متغیر $I_p(t)$ ، به دست می‌آوریم

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial \sigma^2} + \frac{\sigma^2}{2} \right) \varphi_n(\sigma) = \lambda_n \varphi_n(\sigma) \quad (69-4)$$

که

$$\varphi'_n(x, t) = \frac{1}{v^{1/2}} \varphi_n(\sigma) = \frac{1}{v^{1/2}} \varphi_n(x/v) \quad (70-4)$$

و جمله $1/v^{1/2}$ ، در معادله (70-4) برای بهنجارش وارد شده است:

$$\int \varphi_n^* \varphi'_n dx = \int \varphi_n^* \varphi_n d\sigma = 1 \quad (71-4)$$

معادله (69-4)، مشابه معادله شرودینگر نوسانگر هماهنگ مستقل از زمان یک بعدی است که

جواب‌های آن عبارتند از

$$\varphi_n(\sigma) = \left(\frac{1}{\pi^{1/2} \hbar^{1/2} n! 2^n} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{\sigma^2}{2\hbar}\right) \times H_n \left[\left(\frac{1}{\hbar} \right)^{1/2} \sigma \right] \quad (72-4)$$

که در آن

$$\lambda_n = \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (73-4)$$

و H_n چند جمله‌ای هرمیت از مرتبه n است. بنابراین، با استفاده از معادلات (64-4)، (65-4)،

(70-4) و (72-4)، به دست می‌آوریم

$$\int \varphi_n^* \varphi'_n dx = \int \varphi_n^* \varphi_n d\sigma = 1 \quad (74-4)$$

اکنون تنها باید فازهای $\theta_n(t)$ ، را بیابیم که معادله (۴-۶۲) را برای دادن جواب‌های دقیق از معادله شرودینگر (۴-۵۸) برقرار کند. با جایگذاری معادلات (۴-۵۹) و (۴-۶۴) در معادله (۴-۶۲)، داریم

$$\hbar \frac{d\theta_n}{dt} = \langle \varphi'_n | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar \frac{\dot{v}}{v} x \frac{\partial}{\partial x} + i\hbar \frac{\dot{v}}{2v} - \frac{I'}{m(t)v^2} | \varphi'_n \rangle \quad (۴-۷۵)$$

حال با جایگذاری معادله (۴-۷۰) در معادله (۴-۷۵)، می‌رسیم به

$$\hbar \frac{d\theta_n}{dt} = \langle \varphi_n | -\frac{I'}{m(t)v^2} | \varphi_n \rangle = \frac{\lambda_n}{m(t)v^2} \langle \varphi_n | \varphi_n \rangle \quad (۴-۷۶)$$

با استفاده از معادلات (۴-۷۳) و (۴-۷۶) داریم

$$\theta_n(t) = -\left(n + \frac{1}{2}\right) \int_0^t \frac{1}{m(t')v^2} dt' \quad (۴-۷۷)$$

در نهایت، جواب معادله شرودینگر (۴-۵۸)، برای نوسانگر هماهنگ با فرکانس و جرم وابسته به زمان، با استفاده از معادلات (۴-۶۱) و (۴-۷۴)، عبارتست از

$$\psi_n(x,t) = \exp[i\theta_n(t)] \left[\frac{1}{\pi^{1/2} \hbar^{1/2} n! 2^n v} \right]^{1/2} \exp \left[i \frac{m(t)}{2\hbar} \left(\frac{\dot{v}}{v} + \frac{i}{m(t)v^2(t)} \right) x^2 \right] \times H_n \left[\left(\frac{1}{\hbar} \right)^{1/2} \left(\frac{x}{v} \right) \right] \quad (۴-۷۸)$$

که فازهای $\theta_n(t)$ در معادله (۴-۷۷) داده شده‌اند. برای به دست آوردن جواب کلی معادله شرودینگر (۴-۵۸)، معادلات (۴-۷۴) و (۴-۷۷) را در معادله (۴-۶۳) وارد می‌کنیم.

در قسمت‌های زیر، از این نتایج برای محاسبه آنتروپی اطلاعات شانون و آنتروپی فیشر برای نوسانگرهای وابسته به زمان استفاده می‌کنیم. در این روند، از روش لوئیس و رزنفیلد بهره می‌گیریم.

۴-۴- آنتروپی اطلاعات شانون و واریانس

حاصل ضرب عدم قطعیت‌ها برای حالت پایه کم‌ترین مقدار را دارد. در محاسبات، ما تنها تابع

موج (۷۸-۴) را به ازای $n=0$ ، در نظر می‌گیریم:

$$\psi_0(x,t) = \left[\left(\frac{1}{\pi\hbar} \right) \frac{1}{v} \right]^{\frac{1}{2}} e^{i\theta_0(t)} \exp \left[-\frac{1}{2\hbar} \left(\frac{1-im(t)v\dot{v}}{v^2} \right) x^2 \right] \quad (۷۹-۴)$$

که $\theta_0(t)$ از معادله (۷۷-۴) و به ازای $n=0$ قابل محاسبه است.

از طریق معادله (۷۹-۴) تبدیل فوریه را محاسبه می‌کنیم، بنابراین به دست می‌آوریم

$$\phi_0(p,t) = \left[\left(\frac{1}{\pi\hbar} \right) \frac{1}{v} \right]^{\frac{1}{2}} g(t) \left[v^2 \zeta(t) \right]^{\frac{1}{2}} \exp \left[-\frac{v^2 p^2}{2\hbar} \zeta(t) \right] \quad (۸۰-۴)$$

که

$$g(t) = \exp \left(-\frac{i}{2} \int_0^t \frac{1}{m(t')v^2} dt' \right) \quad (۸۱-۴)$$

و

$$\zeta(t) = \frac{1+im(t)v\dot{v}}{1+m^2(t)v^2\dot{v}^2} \quad (۸۲-۴)$$

با استفاده از معادلات بالا روابط زیر را می‌توان یافت (در واحد $\hbar=1$)

$$\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0 \quad (۸۳-۴)$$

$$\langle x^2 \rangle = v^2 \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (۸۴-۴)$$

$$\langle p^2 \rangle = \frac{1}{v^2} (1+m(t)^2 v^2 \dot{v}^2) \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (۸۵-۴)$$

$$(\Delta x \Delta p)_{\psi_n} = \left(1 + m(t)^2 v^2 \dot{v}^2\right)^{\frac{1}{2}} \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (۸۶-۴)$$

معادله (۸۶-۴)، که با استفاده از معادلات (۸۳-۴)، (۸۴-۴) و (۸۵-۴) به دست آمده، کمترین مقدار رابطه عدم قطعیت هایزنبرگ برای $n=0$ و $v = const$ ، را نشان می‌دهد. آنتروپی‌های شانون وابسته به زمان برای $n=0$ در فضاهای مکان ($S_x(t)$) و تکانه ($S_p(t)$) برای هامیلتونی (۷۸-۴) عبارتند از

$$S_x(t) = -\int |\psi_0(x,t)|^2 \ln |\psi_0(x,t)|^2 dx = \frac{1}{2} \ln(e\pi v^2) \quad (۸۷-۴)$$

$$S_p(t) = -\int |\phi_0(p,t)|^2 \ln |\phi_0(p,t)|^2 dx = \frac{1}{2} \ln \left[\left(\frac{e\pi}{v^2} \right) (1 + m^2 v^2 \dot{v}^2) \right] \quad (۸۸-۴)$$

که e عدد اویلر است.

برای $m(t)$ و $\omega(t)$ معین از معادله (۴۷-۴) استفاده می‌کنیم تا مقادیر $\Delta x \Delta p$ ، S_x و S_p را از رابطه میلن-پینری، که یک معادله دیفرانسیل غیرخطی است، به دست آوریم [۱۰۷]. بنابراین مطابق روش لوئیس و رزنفیلد [۹۹]، تنها جواب‌های حقیقی $v(t)$ قابل قبول است. برای این منظور نوسانگرهای لگاریتم دوره‌ای زیر را در نظر می‌گیریم: (۱) $m(t) = m_0 t$ (۲) $m(t) = m_0 = const$ و (۳) $m(t) = m_0 t^2$.

در تمام این سه مورد $\omega(t) = \omega_0 t^{-1}$ ، که $\omega_0 = m_0^{-1/2}$ می‌باشد.

برای نوسانگر (۱)، از معادله (۴۷-۴) داریم [۹۸]

$$\ddot{v} + \frac{1}{t} \dot{v} + \frac{\omega_0^2}{t^2} v = \frac{1}{m_0^2 t^2 v^3} \quad (۸۹-۴)$$

$$v = \frac{1}{\sqrt{\omega_0 m_0}} \quad (۹۰-۴)$$

و $\Delta p = \sqrt{\frac{\omega_0 m_0}{2}}$ ، $\Delta x = \frac{1}{\sqrt{2\omega_0 m_0}}$ و اصل عدم قطعیت هایزنبرگ عبارتست از $\Delta x \Delta p = \frac{1}{2}$. با توجه

به

$$\psi_0(x, t) = e^{-\frac{i\omega_0 \ln t}{2}} \left(\frac{m_0 \omega_0}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \exp \left[-\frac{m_0^2 \omega_0^2 x^2}{2\hbar} \right] \quad (91-4)$$

آنتروپی شانون متناظر عبارتست از

$$S_x(t) = \frac{1}{2} \ln \left(e \frac{\pi}{m_0 \omega_0} \right) \quad (92-4)$$

$$S_p(t) = \frac{1}{2} \ln (e \pi m_0 \omega_0) \quad (93-4)$$

که از این معادلات رابطه عدم قطعیت زیر به دست می‌آید

$$S_x + S_p = 1 + \ln \pi \quad (94-4)$$

برای نوسانگر (۲)، از معادله (۴-۴۷) داریم

$$\ddot{v} + \frac{\omega_0^2}{t^2} v = \frac{1}{m_0^2 v^3} \quad (95-4)$$

و جواب حقیقی آن عبارتست از

$$v = \sqrt{\frac{2}{m_0}} \left[\frac{t}{(4\omega_0^2 - 1)^{1/2}} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (96-4)$$

در این حالت، واریانس $\Delta x = \sqrt{\frac{t}{m_0}} \frac{t}{(4\omega_0^2 - 1)^{1/4}}$ و $\Delta p = \sqrt{\frac{m_0}{t}} \frac{\omega_0}{(4\omega_0^2 - 1)^{1/4}}$ به زمان وابسته

است، در حالی که رابطه عدم قطعیت هایزنبرگ $\Delta x \Delta p = \frac{\omega_0}{(4\omega_0^2 - 1)^{1/2}}$ وابسته به زمان نیست.

آنتروپی شانون در این حالت برابر است با

$$S_x(t) = \frac{1}{2} \ln \left[e\pi \frac{2}{m_0} \frac{t}{(4\omega_0^2 - 1)^{1/2}} \right] \quad (97-4)$$

$$S_p(t) = \frac{1}{2} \ln \left[\left(\frac{e\pi m_0}{2t} \right) \frac{4\omega_0^2}{(4\omega_0^2 - 1)^{1/2}} \right] \quad (98-4)$$

برای نوسانگر (۳)، جواب حقیقی

$$\ddot{v} + \frac{2}{t} \dot{v} + \frac{\omega_0^2}{t^2} v = \frac{1}{m_0^2 t^4 v^3} \quad (99-4)$$

به صورت [۹۸]

$$v = \sqrt{\frac{2}{m_0 t}} \frac{1}{(4\omega_0^2 - 1)^{1/4}} \quad (100-4)$$

است و بنابراین $\Delta x = \sqrt{\frac{1}{m_0 t}} \frac{1}{(4\omega_0^2 - 1)^{1/4}}$ ، $\Delta p = \sqrt{m_0 t} \frac{\omega_0}{(4\omega_0^2 - 1)^{1/4}}$ و $\Delta x \Delta p = \frac{\omega_0}{(4\omega_0^2 - 1)^{1/2}}$

نتایج در این حالت برای Δx و Δp با نوسانگر دومی کاملاً متفاوت می‌باشند. آنتروپی شانون برای این

نوسانگر به صورت زیر به دست می‌آید

$$S_x(t) = \frac{1}{2} \ln \left[e\pi \frac{2}{m_0 t} \frac{t_0^2}{(4\omega_0^2 t_0^2 - 1)^{1/2}} \right] \quad (101-4)$$

$$S_p(t) = \frac{1}{2} \ln \left[e\pi \frac{m_0 t}{2t_0^2} \frac{4\omega_0^2 t_0^2}{(4\omega_0^2 t_0^2 - 1)^{1/2}} \right] \quad (102-4)$$

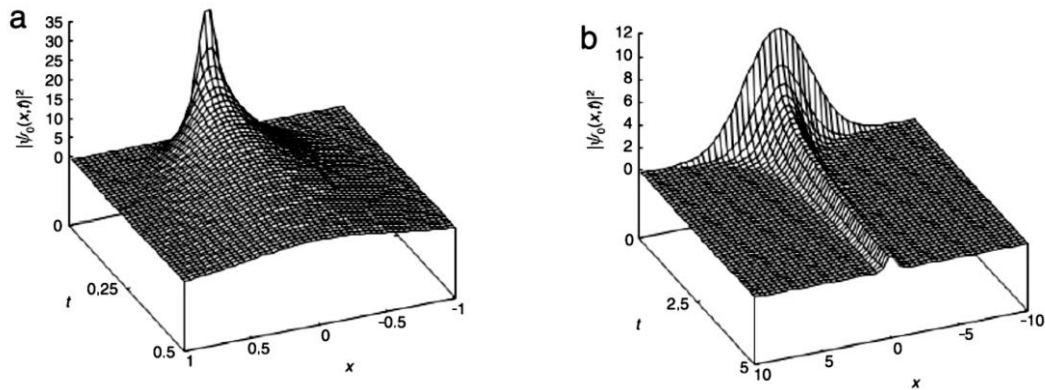
از شکل (a) (1-4) و (b) می‌توان فهمید که $|\psi_0(x,t)|^2$ برای نوسانگر (۳) (شکل ۱-۴ (b)) با افزایش زمان نسبت به نوسانگر (۲) (شکل ۱-۴ (a)) موضعی‌تر می‌شود، به بیان دیگر دقت (اطلاعات) در موضعیت (مکان) ذرات افزایش می‌یابد.

مقدار $S_x(t) + S_p(t)$ ، برای نوسانگرهای (۲) و (۳) یکسان و عبارتست از

$$S_T = 1 + \ln \pi + \frac{1}{2} \ln \left[\frac{4\omega_0^2}{4\omega_0^2 - 1} \right] \quad (103-4)$$

که برای داشتن مقادیر حقیقی از معادلات (۴-۹۶) و (۴-۱۰۰)، $\omega_0 \geq \frac{1}{2}$.

بنابراین مشاهده می‌کنیم برای همه نوسانگرها $S_x(t)$ با افزایش زمان کاهش می‌یابد درحالی‌که $S_p(t)$ با افزایش زمان، رفتاری افزایشی دارد.



شکل (۱-۴): ارزیابی $|\psi_0(x,t)|^2$ برای (a) نوسانگر (۲) و (b) برای نوسانگر (۳). در شکل‌ها از $\omega_0 = 5$ استفاده

کرده‌ایم [۲۴].

۴-۵- اطلاعات فیشر

اطلاعات فیشر در یک بعد و بر حسب چگالی احتمال $\rho(x)$ با رابطه (۱-۱۶) داده می‌شود

[۱۰۹،۹۷]:

$$I_x = \int \rho(x) \left[\frac{d \ln \rho(x)}{dx} \right]^2 dx > 0$$

اکنون یک سیستم کوانتومی را در نظر می‌گیریم که توسط تابع موج $\psi_n(x,t)$ توصیف می‌شود.

چگالی احتمال در فضای مکان به صورت $\rho(x,t) = |\psi_n(x,t)|^2$ است و بنابراین اطلاعات فیشر در

معادله (۱-۱۵) عبارتست از

$$I_x = 4 \int \psi_n^{*'}(x,t) \psi_n'(x,t) dx + \int \left[\frac{\psi_n'(x,t)}{\psi_n(x,t)} - \frac{\psi_n^{*'}(x,t)}{\psi_n^*(x,t)} \right]^2 |\psi_n(x,t)|^2 dx \quad (۴-۱۰۴)$$

که $\psi_n' = \frac{d\psi_n}{dx}$ برای موجی از یک تابع نوسانگر هماهنگ با جرم و فرکانس وابسته به زمان که

در معادله (۴-۷۸) داده شده است و برای حالت $n=0$ ، اطلاعات فیشر برای فضای مکان که در

معادله (۴-۱۰۴) داده شده، به فرم زیر به دست می‌آید

$$I_x(t) = \frac{2}{\hbar v^2} \quad (۴-۱۰۵)$$

به طور مشابه، اطلاعات فیشر برای فضای تکانه برابر است با

$$I_p = 4 \int \phi_n^{*'}(p,t) \phi_n'(p,t) dp + \int \left[\frac{\phi_n'(p,t)}{\phi_n(p,t)} - \frac{\phi_n^{*'}(p,t)}{\phi_n^*(p,t)} \right]^2 |\phi_n(p,t)|^2 dp \quad (۴-۱۰۶)$$

که $\phi_n(p,t)$ تابع موج در فضای تکانه است و $\phi_n' = \frac{d\phi_n}{dp}$ (معادله (۳-۸۱)).

بنابراین برای تابع موج داده شده در معادله (۴-۷۸) با $n=0$ ، اطلاعات فیشر برای فضای تکانه

برابر می‌شود با

$$I_p(t) = \frac{2v^2}{\hbar} \left(\frac{1}{1+m^2(t)v^2\dot{v}^2} \right) \quad (107-4)$$

و حاصل ضرب $I_x I_p$ فرم زیر را دارد

$$I_x(t)I_p(t) = \frac{4}{\hbar^2} \left(\frac{1}{1+m^2(t)v^2\dot{v}^2} \right) \quad (108-4)$$

مجدداً، تنها جواب معادله میلن-پینری را تعیین می‌کنیم تا $I_x(t)$ و $I_p(t)$ ، را به دست آوریم.

برای نوسانگر (۱)، طبق معادله (۴-۹۰)، اطلاعات فیشر به دست می‌آید

$$I_x(t) = 2m_0\omega_0 \quad (109a-4)$$

$$I_p(t) = \frac{2}{m_0\omega_0} \quad (109b-4)$$

$$I_x(t)I_p(t) = 4 \quad (109c-4)$$

همچنین برای نوسانگر (۲)، طبق معادله (۴-۹۶)، به دست می‌آوریم

$$I_x(t) = \frac{m_0}{t} (4\omega_0^2 - 1)^{\frac{1}{2}} \quad (110a-4)$$

$$I_p(t) = \frac{4t}{m_0} \frac{(4\omega_0^2 - 1)^{\frac{1}{2}}}{4\omega_0^2} \quad (110b-4)$$

سرانجام، برای نوسانگر (۳) از معادله (۴-۱۰۰) داریم

$$I_x(t) = \frac{m_0 t}{t_0} (4\omega_0^2 t_0^2 - 1)^{\frac{1}{2}} \quad (111a-4)$$

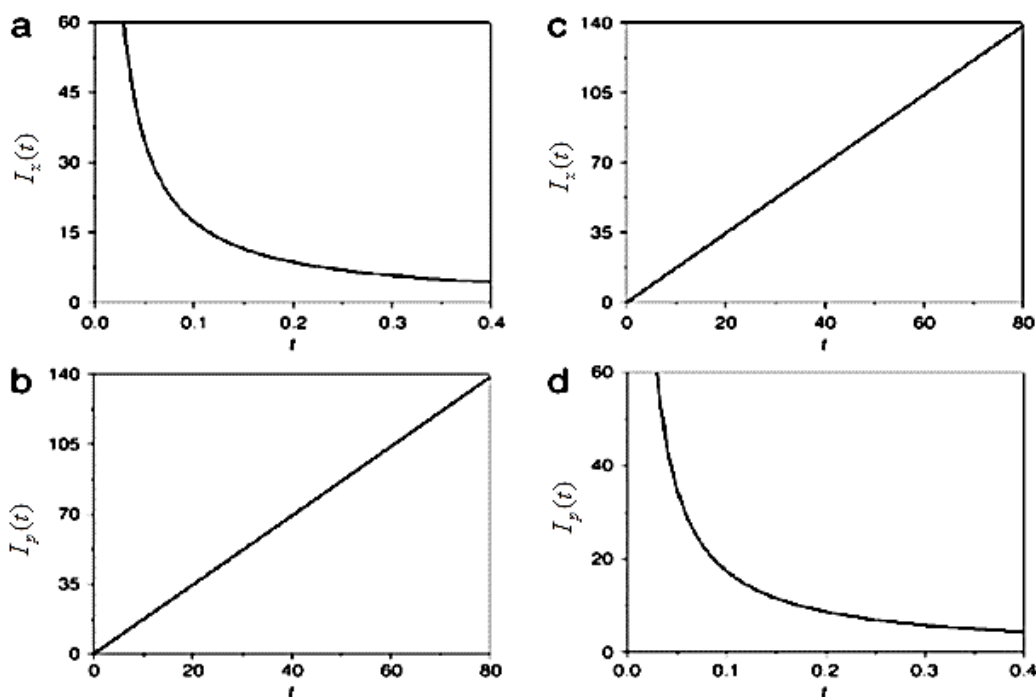
$$I_p(t) = \frac{4t_0}{m_0 t} \frac{(4\omega_0^2 t_0^2 - 1)^{\frac{1}{2}}}{4\omega_0^2 t_0^2} \quad (111b-4)$$

مقدار $I_x(t)I_p(t)$ ، برای نوسانگرهای (۲) و (۳) یکسان و عبارتست از:

$$I_x(t)I_p(t) = 4 - \frac{1}{\omega_0^2} \quad (۱۱۲-۴)$$

$I_x(t)$ و $I_p(t)$ در شکل‌های (۲-۴) (a) و (b) برای نوسانگر (۲) و در شکل‌های (۲-۴) (c) و (d) و

برای نوسانگر (۳) نشان داده شده است. مشاهده می‌کنیم که $I_p(t)$ برای نوسانگر (۲) با افزایش زمان کاهش می‌یابد، در حالی که برای نوسانگر (۳) افزایش می‌یابد.



شکل (۲-۴): (a) و (b) رسم‌هایی از $I_p(t)$ و $I_x(t)$ برای نوسانگر (۲) و (c) و (d) رسم‌هایی از $I_p(t)$ و $I_x(t)$

برای نوسانگر (۳). در شکل‌ها از $m_0 = \omega_0 = 1$ استفاده کرده‌ایم [۲۴].

از طریق عبارات موجود در معادلات (۱۹-۱) و (۲۳-۱) می‌توان نابرابری‌های استم [۱۰۲] و

کرامر-رائو [۱۰۳] را به مقادیر چشمداشتی $\langle p^2 \rangle$ و $\langle x^2 \rangle$ مرتبط کرد.

با استفاده از معادلات (۴۷-۴) و (۲۲-۱)، می‌توانیم $I_x I_p = (\Delta x \Delta p)^{-2}$ را بیابیم. از نابرابری‌های

استم، $I_x = (\Delta p)^2$ و $I_p = (\Delta x)^2$ را می‌یابیم.

روابط کرامر-رائو برای نوسانگرهای (۲) و (۳) یکسان است ولی نوسانگر (۱) این طور نیست، یعنی

$$I_p \leq 4(\Delta x)^2 \text{ و } I_x \leq 4(\Delta p)^2 \text{ و } I_x I_p = (\Delta x \Delta p)^{-2}$$

۴-۶- نتایج

برای نوسانگر لگاریتم دوره‌ای (۱) می‌یابیم که ν ثابت است. در این حالت اصل عدم قطعیت هایزنبرگ برای $n=0$ حداقل است. کمیت‌های S_x ، S_p ، I_x و I_p همه ثابت هستند و این نشان می‌دهد که بدون از دست دادن اطلاعات در این سیستم وجود دارد. این نتایج نشان می‌دهد که نوسانگر (۱) مانند نوسانگر هماهنگ غیروابسته به زمان رفتار می‌کند. این نتیجه بسیار جالب است چرا که نوسانگر (۱)، سیستمی وابسته به زمان است. همچنین روابط کرامر-رائو که $I_x(t) = (\Delta x)^{-2}$ و $I_p(t) = (\Delta p)^{-2}$ می‌باشند را بررسی کردیم، در حالی که روابط استم توسط $I_x = 4(\Delta p)^2$ و $I_p = 4(\Delta x)^2$ داده می‌شوند.

برای نوسانگر لگاریتم دوره‌ای (۲) می‌بینیم که $\nu \sim \sqrt{t}$. در این حالت، $\Delta x \sim \sqrt{t}$ و $\Delta p \sim t^{-\frac{1}{2}}$ اثر فشرده‌گی مشاهده شده در تکانه p وقتی زمان افزایش می‌یابد را نشان می‌دهد. این فشرده‌گی در تکانه p برای گسترده‌گی در مکان x جبران شده است، به طوری که رابطه عدم قطعیت هایزنبرگ $\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2}$ هنوز حفظ می‌شود. مطابق با معادلات (۴-۹۷) و (۴-۹۸)، $I_x \sim t^{-1}$ و $I_p \sim t$ نشان می‌دهد با افزایش زمان، اطلاعات در مکان کاهش می‌یابد، در حالی که در فضای تکانه رفتار افزایشی است. در وابستگی به زمان، ممکن است $S_x < 0$ و $S_p < 0$ ، هرچند از نظر فیزیکی بی‌معنی است. از طرف دیگر، آنتروپی شانون کل، $S_x + S_p$ به زمان وابسته نیست و اطلاعاتی در مورد تحول زمانی آنتروپی نمی‌دهد. علی‌رغم این که I_p و I_x به زمان بستگی دارند، حاصل $I_x I_p$ وابسته به زمان نیست.

برای نوسانگر (۳)، $v \sim t^{-\frac{1}{2}}$ و در نتیجه $\Delta x \sim t^{-\frac{1}{2}}$ و $\Delta p \sim \sqrt{t}$ یعنی نوسانگر (۳) برخلاف نوسانگر (۲) رفتار می کند.

برای تمام سه نوسانگر لگاریتم دوره‌ای برابری بکنر، بیرولا و میسیلیسکی، $S_x + S_p > 1 + \ln \pi$ ثابت شده است، در حالی که برای نوسانگر (۱) داریم $S_x + S_p = 1 + \ln \pi$. هر سه نوسانگر در رابطه کرامر-رائو $I_x(t)I_p(t) = (\Delta x \Delta p)^{-2}$ صدق می کنند. با توجه به نابرابری استم برای نوسانگر (۱) $I_p < 4(\Delta x)^2$ و $I_x < 4(\Delta p)^2$ از معادله (۴-۱۱۳) مشاهده می کنیم که در حد $\omega_0 \rightarrow \infty$ ، $I_x(t)I_p(t)$ به سمت ۴ میل می کند.

فصل پنجم

روند خواص جهانی آنترופی اطلاعات برای سیستم‌های

تک فرمیونی

روش‌های اطلاعات نظری در سال‌های اخیر نقش مهمی در مطالعه سیستم‌های مکانیک کوانتومی در دو مورد بازی کرده است: ابتدا در روشن سازی مفاهیم بنیادی مکانیک کوانتومی و دوم در به هم پیوستگی چگالی‌های احتمال در فضاهای مکان و تکانه. اخیراً [۱۱۰] آنتروپی اطلاعات در فضاهای مکان و تکانه برای سیستم‌های متفاوتی مانند توزیع چگالی هسته، توزیع چگالی الکترون در اتم‌ها و توزیع چگالی الکترون ظرفیت در خوشه‌های اتمی بررسی شده است.

در این فصل تلاش می‌کنیم تا میزان S_r و S_k برای توابع موج حالت‌های تک ذره‌ای (به جای چگالی کل در مرجع [۱۱۰]) برای سیستم‌هایی مانند یک نوکلئون در هسته و یک ذره Λ در ابرهسته محاسبه کنیم. هدف این است که وابستگی S_r و S_k در تحریک یک فرمیون در یک سیستم کوانتومی و همچنین وابستگی به تعداد ذرات را بررسی نماییم.

۵-۲- ملاحظات اولیه

رابطه عدم قطعیت آنتروپی برای بهنجارسازی به تعداد ذرات N ، از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$S_r + S_k \geq 3N(1 + \ln \pi) - 2N \ln N = 6.434N - 2N \ln N \quad (۱-۵)$$

گادر^۱ [۴۹] عبارت تقریبی زیر را برای آنتروپی‌های اطلاعات توزیع‌های الکترونی در اتم‌ها به دست آورد:

$$S_r + S_k \approx 6.65N - N \ln N \quad (۲-۵)$$

با استفاده از نظریه توماس-فرمی^۲، گادر و همکارانش [۱۱۱] با محاسبات هاتری-فوک^۳ نشان دادند

$$S_r + S_k \approx 6.257N - 0.993N \ln N \quad (۳-۵)$$

^۱ Gadre

^۲ Tomas-Fermi

^۳ Hartee-Fock

در اینجا N تعداد الکترون‌ها می‌باشد. پانوس^۱ و ماسن^۲ [۱۱۲] با بکار بردن مدل نوسانگر هماهنگ ساده از هسته‌ها، عبارت زیر را برای توزیع‌های هسته‌ای یافتند:

$$S_r + S_k \approx 5.287N - 1.13N \ln N \quad (۴-۵)$$

که N تعداد نوکلئون‌ها در هسته است. با توجه به روابط شکل تابعی یکسانی برای S_r و S_k به دست می‌آید اما مقدار مهم، $S_r + S_k$ است.

شباهت قابل توجه روابط (۲-۵)، (۳-۵) و (۴-۵) با نابرابری عدم قطعیت آنتروپی در رابطه (۱-۵) نشان می‌دهد که شکل تابعی

$$S_r + S_k \approx aN + bN \ln N \quad (۵-۵)$$

برای سیستم‌های چند فرمی در میدان متوسط جهانی است.

با این حال رابطه بالا برای یک $\rho(\vec{r})$ و $n(\vec{k})$ بهنجار برای تعداد ذرات N به دست آورده شد. این تابع را به شکل زیر راحت‌تر می‌توان به یک بهنجار نمود. یک رابطه ساده بین دو حالت وجود دارد و براحتی می‌توانیم یک حالت را مطابق زیر به دیگری تبدیل نمود:

$$S_r[norm = 1] = \frac{S_r[norm = N]}{N} + \ln N \quad (۶a-۵)$$

$$S_k[norm = 1] = \frac{S_k[norm = N]}{N} + \ln N \quad (۶b-۵)$$

از این رو، آنتروپی اطلاعات S_r در فضای مکان برای یک تابع موج تک ذره‌ای $\psi(\vec{r})$ به صورت زیر تعریف می‌شود

$$S_r = - \int |\psi(\vec{r})|^2 \ln |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r} \quad (۷-۵)$$

^۱ Panos

^۲ Massen

در حالی که آنروپی S_k در فضای تکانه

$$S_k = -\int |\phi(\vec{k})|^2 \ln |\phi(\vec{k})|^2 d\vec{k} \quad (۸-۵)$$

می باشد که $\phi(\vec{k})$ تبدیل فوری $\psi(r)$ است.

از این رو با بهنجار کردن به یک، داریم

$$S_r + S_k \approx 6.65 + \ln N \quad (\text{atoms, Tomas-Fermi}) \quad (۹-۵)$$

$$S_r + S_k \approx 6.257 + 1.007 \ln N \quad (\text{atoms, Hartee-Fock}) \quad (۱۰-۵)$$

$$S_r + S_k \approx 5.287 + 0.875 \ln N \quad (\text{nuclei-H.O.}) \quad (۱۱-۵)$$

نشان می دهیم که تابعی مشابه $S = a + b \ln N$ برای آنروپی به صورت تابعی از تعداد ذرات N

برای سیستم های ذکر شده تعیین می شوند که در این فصل دو مورد از آن ها ذکر خواهد شد.

۵-۳- آنروپی اطلاعات برای یک نوکلئون در هسته

در این قسمت، S_r و S_k را برای حالت های تک ذره ای $1s, 1p, 1d, \dots$ از یک نوکلئون در هسته

در چارچوب مدل نوسانگر هماهنگ (HO) محاسبه می کنیم. برای پارامتر HO از عبارت شناخته

شده $\hbar\omega = 41A^{-1/3} \text{ MeV}$ استفاده می کنیم.

مشاهده می شود که مقدار $\hbar\omega$ تنها برای S_r و S_k مهم است و مقدار اطلاعات خالص $S = S_r + S_k$

مستقل از $\hbar\omega$ و تنها تابعی از A است که به حالت مورد نظر و خصوصیات آن بستگی دارد. این

مقادیر برای حالت های $1s, 1p, 1d$ و $2s$ به ترتیب $۶,۴۳۴۱, ۷,۸۳۸۲, ۸,۶۶۵۱$ و $۸,۳۰۱۵$ می باشند.

با این حال مدل HO تنها یک ساده و مقدماتی می باشد. بنابراین، یک پارامتر واقعی تر از میدان

متوسط هسته ای یعنی تعامل اسکایرم^۱ (SkIII) [۱۱۳] را بکار می بریم. در این مدل پروتون ها و

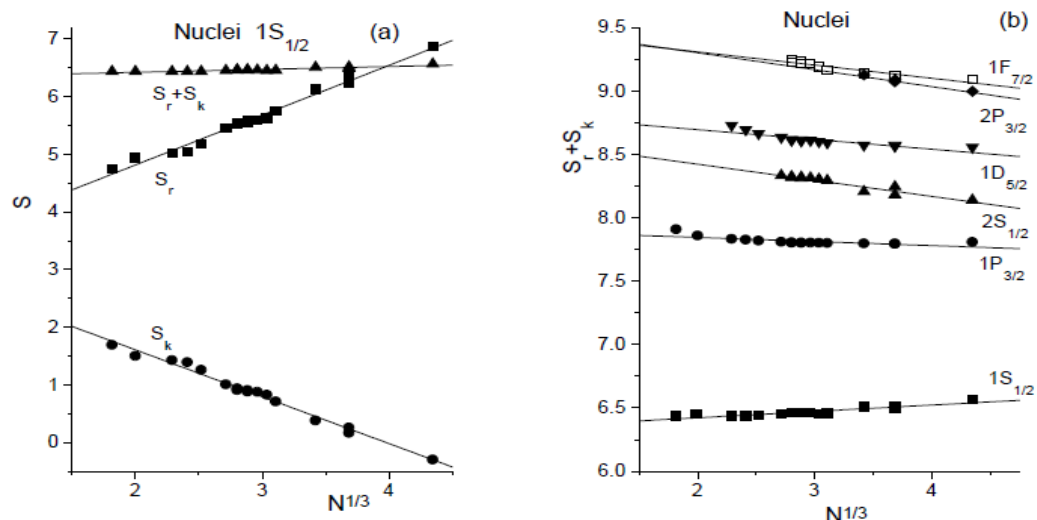
^۱ Skyrme

نوترون‌ها در پتانسیل‌های متفاوتی حرکت می‌کنند. کار با پروتون‌ها را انتخاب می‌کنیم. می‌یابیم که مقادیر به دست آمده برای S_r و S_k از توابع موج حالت‌های تک ذره‌ای محاسبه شده با توجه به SkIII به خوبی با عبارت زیر نشان داده می‌شود

$$S_r \text{ (or } S_k) = a + bN^{1/3} \quad (12-5)$$

که $S_r + S_k$ یک تابع کند-تغییر از N با همان ساختار تابع (12-5) می‌باشد. مقادیر پارامترها در جدول (1-5) نشان داده شده است.

در شکل (1a-5) عبارت‌های (SkIII) برازش شده با $S_r \text{ (or } S_k) = a + bN^{1/3}$ برای آنتروپی‌های S_r ، S_k و $S_r + S_k$ از حالت‌های 1s به عنوان تابعی از $N^{1/3}$ رسم شده است. خطوط با عبارت‌های برازش شده ما متناسب است، درحالی‌که مقادیر متناظر از محاسبات عددی با مربعاتی برای S_r ، دایره‌هایی برای S_k و مثلث‌هایی برای $S_r + S_k$ نشان داده می‌شود. شکل‌های مشابهی برای حالت‌های بالاتر $1p, 1d, 2s, \dots$ می‌توان رسم کرد. از شکل (1a-5) می‌بینیم که مقادیر آنتروپی‌ها به خوبی با عبارت‌های برازش شده ما نشان داده می‌شوند. در شکل (1b-5) حاصل $S_r + S_k = a + bN^{1/3}$ را برای حالت‌های تک ذره‌ای متفاوت مقایسه می‌کنیم. مشاهده می‌کنیم که جمع آنتروپی $S_r + S_k$ با تحریک حالت‌های تک ذره‌ای افزایش می‌یابد. می‌بینیم که $S_r + S_k$ یک تابع کند-تغییر از N است. توجه داشته باشیم که شکافتگی اسپین-مدار به درستی انجام شده است، یعنی حالت $1p_{3/2}$ کندتر از $1p_{1/2}$ می‌باشد و غیره (هرچند تفاوت آن‌ها کوچک است).



شکل (۵-۱): (a) مقادیر آنتروپی اطلاعات S_r (مربع‌ها)، S_k (دایره‌ها) و $S_r + S_k$ (مثلث‌ها)، به صورت عددی محاسبه می‌شوند، برحسب تعداد ذرات N . خطوط مطابق با عبارتهای فیت شده S_r (or S_k) = $a + bN^{1/3}$ می‌باشند. (b) مقایسه جمع $S_r + S_k$ برای حالت‌های متفاوت تک ذره‌ای پروتون [۲۸].

۵-۴- ابرهستی اطلاعات برای یک ذره Λ در یک ابرهسته

یک مدل ساده و (شبه) نسبیتی تحلیلی از یک ابرهسته را به کار می‌بریم [۱۱۴، ۱۱۵] که در آن معادله دیراک با پتانسیل نرده‌ای $U_S(r)$ و مولفه چهارم یک پتانسیل برداری $U_V(r)$ در حالت‌های مستطیل شکلی از این پتانسیل‌ها با شعاع یکسان در نظر گرفته می‌شود:

$$R = r_0 A_{core}^{1/3} \quad (۵-۱۳)$$

در مرجع [۱۱۴]، با حل معادله دیراک، مولفه‌های بزرگ و کوچک برای یک ذره Λ در یک ابرهسته تعیین شده‌اند. این مولفه‌ها را می‌توان در روابط (۱۰) و (۱۱) از [۱۱۴] یافت.

اسپینورهای دیراک را می‌توان برحسب مولفه‌های بزرگ (G) و کوچک (F) بیان کرد:

$$\psi = \begin{pmatrix} iG(r) \\ F(r) \end{pmatrix} \quad (۵-۱۴)$$

توزیع چگالی از یک ذره Λ در فضای مکان عبارتست از

$$\rho(r) = \frac{1}{4\pi} \left[\frac{G^2(r)}{r^2} + \frac{F^2(r)}{r^2} \right] \quad (15-5)$$

و ثابت بهنجارش

$$4\pi \int_0^\infty \rho(r) r^2 dr = 1 \quad (16-5)$$

است. در فضای تکانه داریم

$$\phi(k) = \begin{pmatrix} iX(k) \\ Y(k) \end{pmatrix} \quad (17-5)$$

که $X(k)$ و $Y(k)$ به ترتیب تبدیل فوریه $G(r)/r$ و $F(r)/r$ می‌باشند. بنابراین توزیع چگالی در فضای تکانه به صورت زیر داده می‌شود

$$n(k) = \frac{1}{4\pi} [X^2(k) + Y^2(k)] \quad (18-5)$$

و ثابت بهنجارش از

$$4\pi \int_0^\infty n(k) k^2 dk = 1 \quad (19-5)$$

تعیین می‌شود. آنتروپی اطلاعات یک ذره Λ با توجه به روابط زیر محاسبه می‌شود:

$$S_r = -4\pi \int \rho(r) \ln \rho(r) r^2 dr \quad (20-5)$$

$$S_k = -4\pi \int n(k) \ln n(k) k^2 dk \quad (21-5)$$

که $\rho(r)$ و $n(k)$ توسط معادلات (15-5) و (18-5) داده می‌شوند.

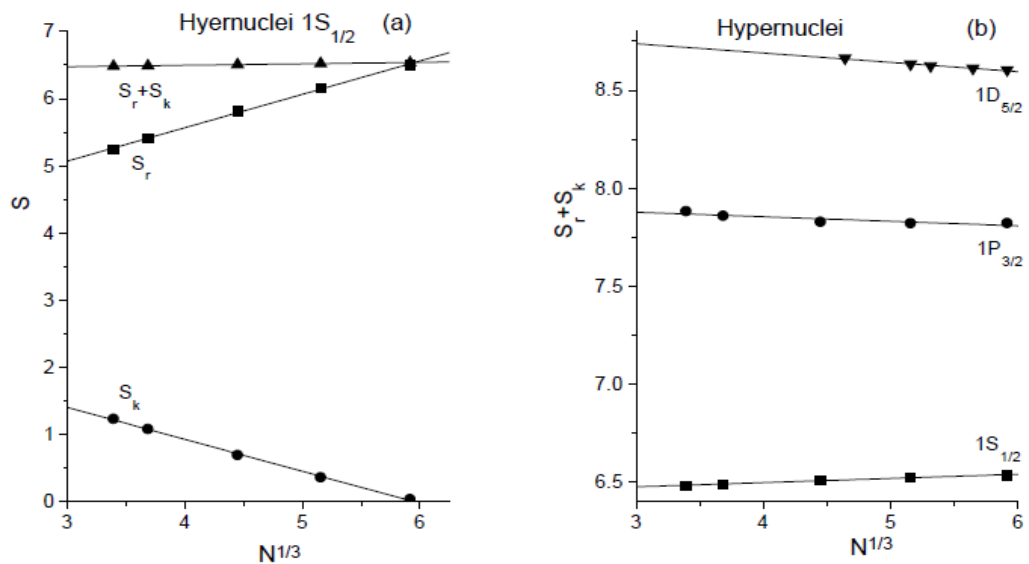
برای عمق پتانسیل ها از مقادیر $r_0 = 1.01 \text{ fm}$ ، $D_- = 300 \text{ MeV}$ ، $D_+ = 30.55 \text{ MeV}$ استفاده

می‌کنیم و پارامتر شعاعی $R = r_0 A_{core}^{1/3}$ با برازش انرژی‌های بستگی تجربی حالت پایه از ذره Λ به

دست می‌آید. در محاسبات ما $A_{core} = N$ ، که N تعداد ذرات است. سپس با برازش عبارت

حالت‌های مختلف در جدول (۱-۵) تعیین شده‌اند. با مقادیر S_r و S_k از معادلات (۲۰-۵) و (۲۱-۵)، مقادیر a و b برای S_r (or S_k) = $a + bN^{1/3}$

در شکل ۲a-۵ عبارت‌های برازش شده برای S_r ، S_k و $S_r + S_k$ به عنوان تابعی از $N^{1/3}$ برای حالت 1s رسم شده است. در (شکل ۱a-۵) این کمیت برای یک ذره Λ در یک ابرهسته رسم شده است. می‌توان شکل‌های مشابهی برای حالت‌های بالاتر رسم کرد. در شکل (۲b-۵)، جمع $S_r + S_k$ را برای حالت‌های تک ذره‌ای متفاوت از یک ذره Λ (مشابه با شکل ۱b-۵) مقایسه می‌کنیم.



شکل (۲-۵): به همان صورت شکل ۱-۵ برای یک ذره در یک ابرهسته با بکار بردن یک مدل نسبیتی [۲۸].

۵-۵- بحث و نتایج

با مقایسه نتایج بخش‌های ۳ و ۴، مشاهده می‌شود با وجود متفاوت بودن پتانسیل‌های تک ذره‌ای، شکل تابعی به فرم S_r (or S_k) = $a + bN^{1/3}$ به خوبی آنتروپی اطلاعات S_r و S_k حالت‌های تک ذره‌ای برای یک نوکلئون در هسته و یک ذره Λ در یک ابرهسته را توصیف می‌کند. رفتار مشاهده شده مانند یک روند جهانی از آنتروپی اطلاعات S_r و S_k برای یک فرمون در یک میدان متوسط

است، درحالی که مقدار اطلاعات خالص $S_r + S_k$ حالت‌های تک ذره‌ای یک فرمیون در یک میدان متوسط تابع کند تغییری از N به‌ازا $S = a + bN^{1/3}$ برای سیستم‌های مذکور می‌باشد. توجه داشته باشید که در مرجع [۱۱۰] خواص جهانی $S = a + b \ln N$ برای توزیع‌های چگالی کل از توزیع‌های متفاوت می‌باشد. در هر دو حالت روشن نیست که چرا S به صورت خطی به $\ln N$ (چگالی کل) یا به صورت خطی به $N^{1/3}$ (حالت‌های تک ذره‌ای) بستگی دارد اما متوجه می‌شویم که در فیزیک اتمی در حال حاضر یک رابطه‌ای بین آنتروپی اطلاعات با آزمایش یعنی با مقادیر تجربی یا بنیادی وجود دارد.

جدول (۱-۵) مقادیر پارامترهای a و b که در عبارت S_r (or S_k) = $a + bN^{1/3}$ برای یک نوکلئون (پروتون) در هسته‌ها با توجه به تعامل SkIII و یک ذره Λ در یک ابرهسته با مدل نسبیتی به دست می‌آید [۲۸].

Case	State	S_r		S_k		$S_r + S_k$	
		a	b	a	b	a	b
Nucleus	$1s_{1/2}$	3.0831	0.8652	3.2353	-0.8140	6.3217	0.0501
	$1p_{3/2}$	4.2824	0.6368	3.6256	-0.6688	7.9084	-0.0322
	$1p_{1/2}$	4.2724	0.6235	3.6799	-0.6675	7.9521	-0.0439
	$1d_{5/2}$	4.7500	0.5743	4.0980	-0.6513	8.8480	-0.0771
	$1d_{3/2}$	4.9553	0.5042	4.0080	-0.6071	8.9618	-0.1024
	$2s_{1/2}$	5.2456	0.3364	3.4355	-0.4641	8.6756	-0.1260
Hyper-nucleus	$1s_{1/2}$	3.5817	0.4967	2.8303	-0.4756	6.4120	0.0214
	$1p_{3/2}$	4.4347	0.3789	3.5123	-0.4021	7.9475	-0.0232
	$1p_{1/2}$	4.3764	0.3835	3.6575	-0.4199	8.0342	-0.0364
	$1d_{5/2}$	5.2553	0.2462	3.6249	-0.2938	8.8803	-0.0475
	$1d_{3/2}$	4.9910	0.2819	4.0503	-0.3543	9.0414	-0.0724

نتایج

آنتروپی‌های اطلاعات شانون و فیشر و روابط عدم قطعیت مربوط به آن‌ها به یک شکل برای سیستم‌های نسبیتی و غیر نسبیتی استفاده می‌شود که بسته به شرایط متفاوتی چون بعد، وابسته یا وابسته نبودن به زمان و پتانسیل به کار رفته در معادله، می‌توانند مقادیر متفاوتی داشته باشند.

در هر یک از این سیستم‌ها، کمیت‌های گسترش ویژگی جهانی، اغلب به عنوان اندازه‌گیری‌های عدم قطعیت کوانتومی، یعنی انحراف معیار و اندازه‌گیری‌های واحد اطلاعات نظری چون شانون در نظر گرفته می‌شوند. در مقابل، آنتروپی شانون، که گسترش توزیع احتمال را اندازه می‌گیرد و به دلیل فرم تابع لگاریتمی آن یک کمیت جهانی است، اطلاعات فیشر نرمی توزیع را اندازه می‌گیرد و به دلیل فرم گرادیانی آن خواص موضعی دارد.

آنتروپی شانون، اندازه‌گیری عدم قطعیت یک توزیع احتمال به عنوان یک اندازه‌گیری از اطلاعات است. معمولاً، رشد عدم قطعیت با افزایش آنتروپی مشخص می‌شود، که به عنوان اطلاعات از دست رفته تلقی می‌شود.

علاوه بر این، آنتروپی‌های اطلاعات شانون در دو فضای مکان و تکانه عکس هم عمل می‌کنند و با کاهش یکی در فضای مکان، آنتروپی نظیر آن در فضای تکانه افزایش می‌یابد ولی مجموع آن‌ها در شرایط فیزیکی یکسان بایستی مقدار یکسانی بدهد، که همان رابطه عدم قطعیت آنتروپی است و به نوعی شبیه به رابطه عدم قطعیت هایزنبرگ می‌باشد.

- [1] Nielsen, Michael A., and Isaac L. Chuang. *Quantum computation and quantum information*. Cambridge university press, 2010.
- [2] Białynicki-Birula, Iwo, and Jerzy Mycielski. "Uncertainty relations for information entropy in wave mechanics." *Communications in Mathematical Physics* 44.2 (1975): 129-132.
- [3] Sears, Stephen B., Robert G. Parr, and Uri Dinur. "On the Quantum-Mechanical Kinetic Energy as a Measure of the Information in a Distribution." *Israel Journal of Chemistry* 19.1-4 (1980): 165-173.
- [4] Gadre, Shridhar R., and Stephen B. Sears. "An application of information theory to Compton profiles." *The Journal of Chemical Physics* 71.11 (1979): 4321-4323.
- [5] Gadre, Shridhar R. "Information entropy and Thomas-Fermi theory." *Physical Review A* 30.1 (1984): 620.
- [6] Gadre, S. R., and R. D. Bendale. "Information entropies in quantum-chemistry." *Current Science* 54.19 (1985): 970-977.
- [7] Gadre, Shridhar R., and Rajeev D. Bendale. "Rigorous relationships among quantum-mechanical kinetic energy and atomic information entropies: Upper and lower bounds." *Physical Review A* 36.4 (1987): 1932.
- [8] Alhassid, Y., and R. D. Levine. "Entropy and chemical change. III. The maximal entropy (subject to constraints) procedure as a dynamical theory." *The Journal of Chemical Physics* 67.10 (1977): 4321-4339.
- [9] Angulo, J. C. "Information entropy and uncertainty in D-dimensional many-body systems." *Physical Review A* 50.1 (1994): 311.
- [10] Angulo, J. C., and J. S. Dehesa. "Tight rigorous bounds to atomic information entropies." *The Journal of chemical physics* 97.9 (1992): 6485-6495.
- [11] Romera, E., and J. S. Dehesa. "Weizsäcker energy of many-electron systems." *Physical Review A* 50.1 (1994): 256.

- [12] Yáñez, R. J., Walter Van Assche, and J. S. Dehesa. "Position and momentum information entropies of the D-dimensional harmonic oscillator and hydrogen atom." *Physical Review A* 50.4 (1994): 3065.
- [13] Ho, Minhuy, et al. "Atomic information entropies beyond the Hartree-Fock limit." *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 27.21 (1994): 5149.
- [14] Hô, Minhuy, et al. "A numerical study of molecular information entropies." *Chemical physics letters* 219.1 (1994): 15-20.
- [15] Esquivel, Rodolfo O., et al. "Physical interpretation of information entropy: numerical evidence of the Collins conjecture." *Physical Review A* 54.1 (1996): 259.
- [16] Fisher, Ronald Aylmer. "Theory of statistical estimation." *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*. Vol. 22. No. 05. Cambridge University Press, 1925.
- [17] Shannon, Claude E., and Warren Weaver. "The mathematical theory of communication. 1949." *Urbana, Univ. Illinois Press* (1963).
- [18] Dehesa, Jesús S., Walter Van Assche, and Rafael J. Yáñez. "Information entropy of classical orthogonal polynomials and their application to the harmonic oscillator and Coulomb potentials." *Methods and Applications of Analysis* 4 (1997): 91-110.
- [19] Dehesa, J. S., et al. "Information theory of D-dimensional hydrogenic systems: Application to circular and Rydberg states." *International Journal of Quantum Chemistry* 110.8 (2010): 1529-1548.
- [20] Hey, J. D. "On the momentum representation of hydrogenic wave functions: Some properties and an application." *American journal of physics* 61.1 (1993): 28-35.
- [21] Yahya, W. A., K. J. Oyewumi, and K. D. Sen. "Position and momentum information-theoretic measures of the pseudoharmonic potential." *International Journal of Quantum Chemistry* 115.21 (2015): 1543-1552.
- [22] Dehesa, Jesús S., Andrei Martínez-Finkelshtdein, and Jorge Sánchez-Ruiz. "Quantum information entropies and orthogonal polynomials." *Journal of computational and applied mathematics* 133.1 (2001): 23-46.

- [23] Ghafourian, M., and H. Hassanabadi. "Shannon information entropies for the three-dimensional Klein-Gordon problem with the Poschl-Teller potential." *Journal of the Korean Physical Society* 68.11 (2016): 1267-1271.
- [24] Aguiar, V., and I. Guedes. "Shannon entropy, Fisher information and uncertainty relations for log-periodic oscillators." *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 423 (2015): 72-79.
- [25] Aguiar, V., and I. Guedes. "Fisher information of quantum damped harmonic oscillators." *Physica Scripta* 90.4 (2015): 045207.
- [26] Massen, S. E., and C. P. Panos. "Universal property of the information entropy in atoms, nuclei and atomic clusters." *Physics Letters A* 246.6 (1998): 530-533.
- [27] Massen, S. E., Ch C. Moustakidis, and C. P. Panos. "Comparison of the information entropy in fermionic and bosonic systems." *Physics Letters A* 299.2 (2002): 131-136.
- [28] Panos, C. P., S. E. Massen, and C. G. Koutroulos. "Universal trend of the information entropy of a fermion in a mean field." *Physical Review C* 63.6 (2001): 064307.
- [29] Kennard, Earle H. "Zur quantenmechanik einfacher bewegungstypen." *Zeitschrift für Physik* 44.4-5 (1927): 326-352.
- [30] Hilgevoord, Jan, and Jos Uffink. "The mathematical expression of the uncertainty principle." *Microphysical Reality and Quantum Formalism* 1 (1988): 93.
- [31] Slepian, David, and Henry O. Pollak. "Prolate spheroidal wave functions, Fourier analysis and uncertainty—I." *Bell System Technical Journal* 40.1 (1961): 43-63.
- [32] Shannon, Claude E. "A Mathematical Theory of Communication, 27 Bell Sys." *Technical J* 379 (1948).
- [33] Cover Thomas, M., and A. Thomas Joy. "Elements of information theory." *New York: Wiley* 3 (1991): 37-38.
- [34] Hatori, Hirohisa. "A note on the entropy of a continuous distribution." *Kodai Mathematical Seminar Reports*. Vol. 10. No. 4. Department of Mathematics, Tokyo Institute of Technology, 1958.

- [35] Martin, M. T., J. Perez, and A. Plastino. "Fisher information and nonlinear dynamics." *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 291.1 (2001): 523-532.
- [36] Frieden, B. Roy. *Science from Fisher information: a unification*. Cambridge University Press, 2004.
- [37] Gadre, Shridhar R. "A Celebration of the Contributions of Robert G Parr (In 2 Volumes)." *Reviews of Modern Quantum Chemistry* 2002 (1880).
- [38] Massen, S. E., and C. P. Panos. "A link of information entropy and kinetic energy for quantum many-body systems." *Physics Letters A* 280.1 (2001): 65-69.
- [39] González-Férez, R., and J. S. Dehesa. "Shannon entropy as an indicator of atomic avoided crossings in strong parallel magnetic and electric fields." *Physical review letters* 91.11 (2003): 113001.
- [40] Frieden, B. Roy, and B. H. Soffer. "A critical comparison of three information-based approaches to physics." *Foundations of Physics Letters* 13.1 (2000): 89-96.
- [41] Luo, Shunlong. "Fisher information, kinetic energy and uncertainty relation inequalities." *Journal of Physics A: Mathematical and General* 35.25 (2002): 5181.
- [42] Parr, Robert G., and Weitao Yang. "Density-Functional Theory of Atoms and Molecules, International Series of Monographs on Chemistry, vol. 16." *Breslow, R* (1989): 160-180.
- [43] Dembo, Amir, Thomas M. Cover, and Joy A. Thomas. "Information theoretic inequalities." *Information Theory, IEEE Transactions on* 37.6 (1991): 1501-1518.
- [44] López-Rosa, S., J. C. Angulo, and J. Antolín. "Rigorous properties and uncertainty-like relationships on product-complexity measures: Application to atomic systems." *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 388.10 (2009): 2081-2091.
- [45] Plastino, A., A. R. Plastino, and Bernard H. Soffer. "Fisher info and thermodynamics' first law." *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 369.2 (2006): 432-438.

- [46] Frieden, B. R. "Fisher information as a measure of time." *Astrophysics and Space Science* 244.1-2 (1996): 387-391.
- [47] Vignat, Christophe, and J-F. Bercher. "Analysis of signals in the Fisher–Shannon information plane." *Physics Letters A* 312.1 (2003): 27-33.
- [48] Angulo, J. C. "Uncertainty relationships in many-body systems." *Journal of Physics A: Mathematical and General* 26.22 (1993): 6493.
- [49] Montgomery Jr, Henry E. "Information Entropy and Uncertainty Relations." *The Chemical Educator* 7.6 (2002): 334-338.
- [50] Hirschman, Isidore I. "A note on entropy." *American journal of mathematics* 79.1 (1957): 152-156.
- [51] Zozor, Steeve, Mariela Portesi, and Christophe Vignat. "Some extensions of the uncertainty principle." *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 387.19 (2008): 4800-4808.
- [52] Romera, E. "Stam's principle D-dimensional uncertainty-like relationships and some atomic properties." *Molecular Physics* 100.20 (2002): 3325-3329.
- [53] Dehesa, J. S., A. Martínez-Finkelshtein, and V. N. Sorokin. "Information-theoretic measures for Morse and Pöschl–Teller potentials." *Molecular Physics* 104.4 (2006): 613-622.
- [54] Amelino-Camelia, Giovanni, and Jurek Kowalski-Glikman, eds. *Planck scale effects in astrophysics and cosmology*. Vol. 669. Springer Science & Business Media, 2005.
- [55] Li, Shu-Shen, and Jian-Bai Xia. "Electronic states of a hydrogenic donor impurity in semiconductor nano-structures." *Physics Letters A* 366.1 (2007): 120-123.
- [56] Harrison, Paul. *Quantum wells, wires and dots: theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures*. John Wiley & Sons, 2005.
- [57] Nieto, Michael Martin. "Electrons above a helium surface and the one-dimensional Rydberg atom." *Physical Review A* 61.3 (2000): 034901.
- [58] Dykman, M. I., P. M. Platzman, and P. Seddighrad. "Qubits with electrons on liquid helium." *Physical Review B* 67.15 (2003): 155402.

- [59] Dahl, J. P., et al. "Dimensional Scaling in Chemical Physics." (1993): 165-178.
- [60] Witten, Edward. "Quarks, atoms, and the $1/N$ expansion." (1980).
- [61] Dong, Shi-Hai, and Zhong-Qi Ma. "Nonrelativistic Levinson's theorem in D dimensions." *Physical Review A* 65.4 (2002): 042717.
- [62] Tarasov, V. F. "EXACT NUMERICAL VALUES OF DIAGONAL MATRIX ELEMENTS n_l , AS $n \leq 8$ and $7 \leq k \leq 4$, AND THE SYMMETRY OF APPELL'S FUNCTION $F_2(1, 1)$." *International Journal of Modern Physics B* 18.23n24 (2004): 3177-3184..
- [63] Van Assche, Walter, et al. "Functionals of Gegenbauer polynomials and D -dimensional hydrogenic momentum expectation values." *Journal of Mathematical Physics* 41.9 (2000): 6600-6613.
- [64] Morse, Philip M. "Diatomic molecules according to the wave mechanics. II. Vibrational levels." *Physical Review* 34.1 (1929): 57.
- [65] Berkdemir, Cüneyt, and Jianguang Han. "Any 1-state solutions of the Morse potential through the Pekeris approximation and Nikiforov–Uvarov method." *Chemical physics letters* 409.4 (2005): 203-207.
- [66] Oyewumi, K. J., and K. D. Sen. "Exact solutions of the Schrödinger equation for the pseudoharmonic potential: an application to some diatomic molecules." *Journal of Mathematical Chemistry* 50.5 (2012): 1039-1059.
- [67] Oyewumi, Kayode John, and Ezekiel Adeniyi Bangudu. "Isotropic harmonic oscillator plus inverse quadratic potential in N -dimensional spaces." *Arabian Journal for Science and Engineering* 28.2 (2003): 173-182.
- [68] Patil, S. H., and K. D. Sen. "Uncertainty relations for modified isotropic harmonic oscillator and Coulomb potentials." *Physics Letters A* 362.2 (2007): 109-114.
- [69] Tezcan, Cevdet, and Ramazan Sever. "A general approach for the exact solution of the Schrödinger equation." *International Journal of Theoretical Physics* 48.2 (2009): 337-350.
- [70] Avery, John S. *Hyperspherical harmonics: applications in quantum theory*. Vol. 5. Springer Science & Business Media, 2012.

- [71] Dehesa, J. S., et al. "Fisher information of D-dimensional hydrogenic systems in position and momentum spaces." *Journal of Mathematical Physics* 47.5 (2006): 52104-52300.
- [72] Avery, John S. *Hyperspherical harmonics and generalized Sturmians*. Vol. 4. Springer Science & Business Media, 2006.
- [73] Aquilanti, Vincenzo, Simonetta Cavalli, and Cecilia Coletti. "The d-dimensional hydrogen atom: hyperspherical harmonics as momentum space orbitals and alternative Sturmian basis sets." *Chemical Physics* 214.1 (1997): 1-13.
- [74] Tsipis, Constantinos A. *New methods in quantum theory*. No. 3. Kluwer Academic Pub, 1996.
- [75] Chatzisavvas, K. Ch, Ch C. Moustakidis, and C. P. Panos. "Information entropy, information distances, and complexity in atoms." *The Journal of chemical physics* 123.17 (2005): 174111.
- [76] Oyewumi, K. J., F. O. Akinpelu, and A. D. Agboṣa. "Exactly complete solutions of the pseudoharmonic potential in N-dimensions." *International Journal of Theoretical Physics* 47.4 (2008): 1039-1057.
- [77] Yáñez, R. J., et al. "Entropic integrals of hyperspherical harmonics and spatial entropy of D-dimensional central potentials." *Journal of Mathematical Physics* 40.11 (1999): 5675-5686.
- [78] Buyarov, V., et al. "Computation of the entropy of polynomials orthogonal on an interval." *SIAM Journal on Scientific Computing* 26.2 (2004): 488-509.
- [79] Dehesa, J. S., R. González-Férez, and P. Sánchez-Moreno. "The Fisher-information-based uncertainty relation, Cramer–Rao inequality and kinetic energy for the D-dimensional central problem." *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* 40.8 (2007): 1845.
- [80] Sakurai, Jun John, and Jim Napolitano. *Modern quantum mechanics*. Addison-Wesley, 2011.
- [81] Galindo, Alberto, and Pedro Pascual. "The Physical Basis of Quantum Mechanics." *Quantum Mechanics I*. Springer Berlin Heidelberg, 1990. 1-32.

- [82] Robinett, R. W. "Quantum and classical probability distributions for position and momentum." *American Journal of Physics* 63.9 (1995): 823-831.
- [83] Atkins, Peter W., and Ronald S. Friedman. *Molecular quantum mechanics*. Oxford university press, 2011.
- [84] Harrison, Paul. *Quantum wells, wires and dots: theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures*. John Wiley & Sons, 2005.
- [85] Bohr, A., and B. R. Mottelson. "Nuclear Structure, World Scient." *Publ., Singapore* (1998).
- [86] Kuhn, Hans, and Christoph Kuhn. "Early quantum chemistry of polyenes. Useful stimulus in research on conducting polymers." *Chemical physics letters* 204.1 (1993): 206-210.
- [87] Bonneau, Guy, Jacques Faraut, and Galliano Valent. "Self-adjoint extensions of operators and the teaching of quantum mechanics." *American Journal of Physics* 69.3 (2001): 322-331.
- [88] Sykes, A. G., et al. "Spatial nonlocal pair correlations in a repulsive 1D Bose gas." *Physical review letters* 100.16 (2008): 160406.
- [89] Hassanabadi, H., A. N. Ikot, and S. Zarrinkamar. "Exact Solution of Klein-Gordon with the Pöschl-Teller Double-Ring-Shaped Coulomb Potential." *Acta Physica Polonica A* 126.3 (2014): 647-652.
- [90] Yu, Jiang, and Shi-Hai Dong. "Exactly solvable potentials for the Schrödinger equation with spatially dependent mass." *Physics Letters A* 325.3 (2004): 194-198.
- [91] de Castro, A. S., A. Armat, and H. Hassanabadi. "Scattering and bound states of fermions in the modified Hulthén potential." *The European Physical Journal Plus* 129.10 (2014): 1-7.
- [92] Majernik, V., and L. Richterek. "Entropic uncertainty relations for the infinite well." *Journal of Physics A: Mathematical and General* 30.4 (1997): L49.
- [93] Stam, A. J. "Some inequalities satisfied by the quantities of information of Fisher and Shannon." *Information and Control* 2.2 (1959): 101-112.

- [94] Schrödinger, Erwin. "Quantization as an eigenvalue problem." *Annalen der Physik* 79.4 (1926): 361-376.
- [95] Field, J. H. "Relationship of quantum mechanics to classical electromagnetism and classical relativistic mechanics." *European journal of physics* 25.3 (2004): 385.
- [96] Dannon, H. Vic. "Wave-Particle Duality: de Broglie Waves and Uncertainty." *Gauge Institute Journal* (2006).
- [97] Putnam, Hilary. "A philosopher looks at quantum mechanics (again)." *The British journal for the philosophy of science* 56.4 (2005): 615-634.
- [98] Bessa, Vagner, and Ilde Guedes. "Wave functions of log-periodic oscillators." *Journal of Mathematical Physics* 52.6 (2011): 062106.
- [99] Lewis Jr, H. Ralph, and W. B. Riesenfeld. "An Exact Quantum Theory of the Time-Dependent Harmonic Oscillator and of a Charged Particle in a Time-Dependent Electromagnetic Field." *Journal of Mathematical Physics* 10.8 (1969): 1458-1473.
- [100] Pedrosa, I. A. "Exact wave functions of a harmonic oscillator with time-dependent mass and frequency." *Physical Review A* 55.4 (1997): 3219.
- [101] Milne, W. E. "The remainder in linear methods of approximation." *J. Research, Nat. Bureau Stand* 43 (1949): 501-511.
- [102] Pinney, Edmund. "The nonlinear differential equation $y'' + p(x)y + cy^{-3} = 0$." *Proceedings of the American Mathematical Society* 1.5 (1950): 681.
- [103] Pedrosa, I. A. "Canonical transformations and exact invariants for dissipative systems." *Journal of mathematical physics* 28.11 (1987): 2662-2664.
- [104] Hartley, John G., and John R. Ray. "Ermakov systems and quantum-mechanical superposition laws." *Physical Review A* 24.6 (1981): 2873.
- [105] Ermakov, V. P. "Transformation of differential equations." *Univ. Izv. Kiev* 20 (1880): 1-19.
- [106] Ray, John R., and James L. Reid. "More exact invariants for the time-dependent harmonic oscillator." *Physics Letters A* 71.4 (1979): 317-318.
- [107] Cariñena, José F., and Javier De Lucas. "A nonlinear superposition rule for solutions of the Milne–Pinney equation." *Physics Letters A* 372.33 (2008): 5385-5389.

- [108] Aslanov, Afgan. "Determination of convergence intervals of the series solutions of Emden–Fowler equations using polytropes and isothermal spheres." *Physics letters A* 372.20 (2008): 3555-3561.
- [109] Choi, Jeong Ryeol, et al. "Information theories for time-dependent harmonic oscillator." *Annals of Physics* 326.6 (2011): 1381-1393.
- [110] Massen, S. E., and C. P. Panos. "Universal property of the information entropy in atoms, nuclei and atomic clusters." *Physics Letters A* 246.6 (1998): 530-533.
- [111] Gadre, Shridhar R., et al. "Some novel characteristics of atomic information entropies." *Physical Review A* 32.5 (1985): 2602.
- [112] Panos, C. P., and S. E. Massen. "Quantum entropy for nuclei." *International Journal of Modern Physics E* 6.03 (1997): 497-505.
- [113] Dover, C. B., and Nguyen Van Giai. "The nucleon-nucleus potential in the Hartree-Fock approximation with Skyrme's interaction." *Nuclear Physics A* 190.2 (1972): 373-400.
- [114] Grypeos, M. E., C. G. Koutroulos, and G. J. Papadopoulos. "Approximate treatment of the Dirac equation with scalar and vector potentials of rectangular shapes." *Physical Review A* 50.1 (1994): 29.
- [115] Papadopoulos, G. J., C. G. Koutroulos, and M. E. Grypeos. "Analytic Advantages of Spherically Symmetric Step-Function Potentials in the Dirac Equation with Scalar and Fourth Component of Vector Potential." *International Journal of Theoretical Physics* 39.2 (2000): 455-468.

Abstract

In this thesis we investigate the theory of quantum information systems in the description of electronic and nuclear structures. One of the applications of the concepts and techniques of information theory is in the atomic, molecular and nuclear structures which will be discussed in both relativistic (Dirac equation) and nonrelativistic (Schrödinger equation) cases here. Such a procedure, leads to the information entropy of representation of relativistic and nonrelativistic systems which is a complementary to energy representation arising from density functional and wavefunction theories. In this procedure, the information concepts plays the most crucial role. The content of the thesis are in summary as following. In first, having discussed the information concept, some information measurements including standard deviation, Shannon entropy and Fisher information, are introduced and their characteristics are analyzed. Also, these measurements are studied for the nonrelativistic hydrogen (Coulomb potential) and pseudoharmonic systems in three dimensions and the corresponding uncertainty principles are obtained. In the following, the same measurements are determined in Klein-Gordon equation and framework in Dirac relativistic framework. Furthermore, the information measurements are investigated for time-dependent harmonic oscillators (Log-periodic oscillators). In the end, the global information entropy properties are studied for single-fermion systems. Next, the information entropy for a nucleon in nucleus and a particle in a (pseudo) relativistic analytical model of hypernucleus will be discussed.

Keywords: Standard deviation; Shannon entropy; Fisher information; Generalized uncertainty principle; Relativistic system; Nonrelativistic system; Schrödinger equation; Klein-Gordon equation; Dirac equation.



Faculty of Physic Department

MSc thesis is Nuclear Physics

Investigation of Shannon entropy of relativistic and non-relativistic systems

By:

Seyede Amene Najafizade

Supervisor(s):

Dr. Hassan Hassanabadi

Dr. Saber Zarrinkamar

August 2016